

**Füllungs- und wechselwirkungsabhängiger
Mott-Übergang: Quanten-Cluster-Rechnungen im
Rahmen der Selbstenergiefunktional-Theorie**

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

vorgelegt von
Matthias Balzer
aus Fulda

Würzburg 2008

Eingereicht am: 20. November 2008
bei der Fakultät für Physik und Astronomie

1. Gutachter: Prof. Dr. M. Potthoff
2. Gutachter: Prof. Dr. W. Hanke
der Dissertation

1. Prüfer: Prof. Dr. M. Potthoff
2. Prüfer: Prof. Dr. W. Hanke
3. Prüfer: PD. Dr. L. Worschech
im Promotionskolloquium

Tag des Promotionskolloquiums: _____

Doktorurkunde ausgehändigt am: _____

Kurzfassung

Die Untersuchung stark korrelierter Elektronensysteme anhand des zweidimensionalen Hubbard-Modells bildet das zentrale Thema dieser Arbeit. Wir analysieren das Schicksal des Mott-Isolators bei Dotierung als auch bei Reduzierung der Wechselwirkungsstärke. Die numerische Auswertung erfolgt mit Hilfe von Quanten-Cluster-Approximationen, die eine thermodynamisch konsistente Beschreibung der Grundzustandseigenschaften garantieren.

Der hier verwendete Rahmen der Selbstenergiefunktional-Theorie bietet eine große Flexibilität bei der Konstruktion von Cluster-Näherungen. Eine detaillierte Analyse gibt Aufschluss über die Qualität und das Konvergenzverhalten unterschiedlicher Cluster-Näherungen innerhalb der Selbstenergiefunktional-Theorie. Wir verwenden für diese Untersuchungen das eindimensionale Hubbard-Modell und vergleichen unsere Resultate mit der exakten Lösung.

In zwei Dimensionen finden wir als Grundzustand des Teilchen-Loch-symmetrischen Modells bei Halbfüllung einen antiferromagnetischen Isolator unabhängig von der Wechselwirkungsstärke. Die Berücksichtigung kurzreichweitiger räumlicher Korrelationen durch unsere Cluster-Näherung führt, im Vergleich mit der dynamischen Mean-Field-Theorie, zu einer deutlichen Verbesserung des antiferromagnetischen Ordnungsparameters. Darüberhinaus beobachten wir in der paramagnetischen Phase einen Metall-Isolator-Übergang als Funktion der Wechselwirkungsstärke, der sich qualitativ vom reinen Mean-Field-Szenario unterscheidet.

Ausgehend vom antiferromagnetischen Mott-Isolator zeigt sich ein füllungsgetriebener Metall-Isolator-Übergang in eine paramagnetische metallische Phase. Abhängig von der verwendeten Cluster-Approximation tritt dabei zunächst eine antiferromagnetische metallische Phase auf. Neben langreichweitiger antiferromagnetischer Ordnung haben wir in unseren Rechnungen auch Supraleitung berücksichtigt. Das Verhalten des supraleitenden Ordnungsparameters als Funktion der Dotierung ist dabei in guter Übereinstimmung sowohl mit anderen numerischen Verfahren als auch mit experimentellen Ergebnissen.

Abstract

The central goal of this thesis is the examination of strongly correlated electron systems on the basis of the two-dimensional Hubbard model. We analyze how the properties of the Mott insulator change upon doping and with interaction strength. The numerical evaluation is done using quantum cluster approximations, which allow for a thermodynamically consistent description of the ground state properties.

The framework of self-energy-functional theory offers great flexibility for the construction of cluster approximations. A detailed analysis sheds light on the quality and the convergence properties of different cluster approximations within the self-energy-functional theory. We use the one-dimensional Hubbard model for these examinations and compare our results with the exact solution.

In two dimensions the ground state of the particle-hole symmetric model at half-filling is an antiferromagnetic insulator, independent of the interaction strength. The inclusion of short-range spatial correlations by our cluster approach leads to a considerable improvement of the antiferromagnetic order parameter as compared to dynamical mean-field theory. In the paramagnetic phase we furthermore observe a metal-insulator transition as a function of the interaction strength, which qualitatively differs from the pure mean-field scenario.

Starting from the antiferromagnetic Mott insulator a filling-controlled metal-insulator transition in a paramagnetic metallic phase can be observed. Depending on the cluster approximation used an antiferromagnetic metallic phase may occur at first. In addition to long-range antiferromagnetic order, we also considered superconductivity in our calculations. The superconducting order parameter as a function of doping is in good agreement with other numerical methods, as well as with experimental results.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Hubbard-Modell	4
2.1	Ein-Band-Hubbard-Modell	4
2.2	Eigenschaften des (Ein-Band-)Hubbard-Modells	5
2.2.1	Teilchen-Loch-Transformation	6
2.2.2	Der Limes $U \rightarrow \infty$	6
2.2.3	Mott-Metall-Isolator-Übergang	7
2.2.4	Magnetismus	7
2.2.5	Exakte Ergebnisse in $D = 1$ und $D = \infty$	8
2.3	Das zweidimensionale Hubbard-Modell	11
3	Selbstenergiefunktional-Theorie	13
3.1	Selbstenergiefunktional	13
3.1.1	Parametrisierung der Selbstenergie: Referenzsysteme	15
3.1.2	Eingeschränkte Translationsinvarianz	17
3.1.3	Thermodynamische Konsistenz	19
3.2	Numerische Auswertung	20
3.2.1	Q -Matrix-Methode	20
3.2.2	Numerische Integration	21
3.2.3	Laufzeitaspekte	23
3.2.4	Parameteroptimierung	24
3.3	Exakte Diagonalisierung	26
3.3.1	Invariante Unterräume	26
3.3.2	(Block-)Lanczos	27
3.3.3	Green-Funktion	29
3.3.4	Implementierung des Lanczos-Algorithmus	30
4	Dotierung des Mott-Isolators: Variational Cluster Approach	31
4.1	Teilchen-Loch-Symmetrie	32
4.2	Dotierung des Mott-(Heisenberg-)Isolators	34
4.2.1	Charakterisierung der Phasenübergänge	34
4.2.2	Koexistenz paramagnetischer und antiferromagnetischer Lösung	37
4.3	Phasenseparation im Hubbard- und t - J -Modell	40
4.3.1	Phasendiagramm	43
4.3.2	Next-Nearest-Neighbor-Hopping	46
4.3.3	Clusterfüllung und Variationsparameter	48
4.4	Einfluss von Clustergröße und Clustergeometrie	49

4.4.1	Bandlücke Δ und Phasenseparation	49
4.4.2	Analyse der Finite-Size-Effekte	52
5	Das 1D-Hubbard-Modell: Eine Analyse der Clusternäherungen	54
5.1	Mott-Isolator bei Halbfüllung	56
5.1.1	Optimierung der Hopping-Parameter: Grundzustandsenergie	56
5.1.2	Ein-Teilchen-Anregungen	58
5.1.3	Unabhängige Optimierung mehrerer Variationsparameter	61
5.1.4	Bad-Plätze	63
5.1.5	Einfluss von Bad-Plätzen auf dynamische Größen	66
5.2	Füllungsabhängiger Mott-Übergang	70
5.2.1	Variation der On-Site-Energien	71
5.2.2	Bad-Plätze als Ladungsreservoirs	74
5.3	Auswahlkriterien für Referenzsysteme	79
6	2D-Hubbard-Modell: Variational Cluster Approach mit Bad-Plätzen	82
6.1	Teilchen-Loch-Symmetrie	82
6.1.1	Antiferromagnetischer Grundzustand	82
6.1.2	Paramagnet: Mott-Hubbard-Übergang in $D = 2$	87
6.2	Dotierung des Mott-Isolators	94
6.2.1	Paramagnetischer Metall-Isolator-Übergang	94
6.2.2	Antiferromagnetische Ordnung	97
7	Supraleitung	103
7.1	Spinabhängige Teilchen-Loch-Transformation	103
7.2	Supraleitender Ordnungsparameter	105
8	Zusammenfassung	109
	Literaturverzeichnis	112

Kapitel 1

Einleitung

Die moderne Festkörperphysik ist in der Lage, physikalische Eigenschaften einer Vielzahl von Materialien zu erklären [1]. Dies trifft insbesondere auf einfache Metalle sowie einige Halbleiter und Isolatoren zu. Dagegen sind Materialien, deren Eigenschaften durch Elektronen in schmalen d - und f -Orbitalen bestimmt werden, deutlich schwieriger zu beschreiben. In Übergangsmetallen, wie z. B. Vanadium, Eisen, Kupfer und deren Oxiden, erfahren die d -Elektronen aufgrund ihrer räumlichen Einschränkung eine starke Coulomb-Abstoßung. Das Wechselspiel der internen Freiheitsgrade (Spin, Ladung, Drehimpuls) der d - und f -Elektronen kann eine Reihe unterschiedlicher Phasen hervorbringen, die sich energetisch nur wenig unterscheiden und daher konkurrieren oder auch kooperieren. Stark korrelierte Elektronensysteme können daher äußerst empfindlich auf die Veränderung externer Parameter wie Temperatur, Druck oder Dotierung reagieren.

Beispiele sind die extrem großen Widerstandsänderungen beim Übergang vom Metall zum Isolator in Vanadiumoxid und beachtliche Volumenänderungen bei Phasenübergängen in Actinoiden und Lanthanoiden [1]. Hohe Sprungtemperaturen (über dem Siedepunkt von Stickstoff) in Supraleitern mit Kupferoxidebenen (Kuprate) stellen ein weiteres Beispiel für hochinteressante, aber auch bislang noch weitgehend unverstandene Effekte elektronischer Korrelationen dar. In sogenannten Heavy-Fermion-Systemen verhalten sich Elektronen bei tiefen Temperaturen, als besäßen sie ein Vielfaches ($10^2 - 10^3$) der Masse freier Elektronen in einfachen Metallen. Die Vielfalt dieser und weiterer Phänomene sowie die Sensitivität bzgl. äußerer Einflüsse gestaltet die experimentelle und theoretische Behandlung stark korrelierter Elektronensysteme besonders schwierig.

Schwach korrelierte Elektronensysteme, wie Silizium oder Aluminium, lassen sich gut in einem Modell effektiver unabhängiger Elektronen beschreiben. Die Grundlage dafür bildet die Fermi-Flüssigkeits-Theorie. Niedrig angeregte Zustände werden für tiefe Temperaturen durch voneinander im Wesentlichen unabhängige Quasiteilchen in Analogie zu einem nichtwechselwirkenden System beschrieben. Stark korrelierte Elektronensysteme machen es dagegen erforderlich, über das Bild unabhängiger Elektronen wesentlich hinauszugehen. So versagt die Annahme starrer Bänder (bestehend aus unabhängigen Ein-Teilchen-Niveaus) bei der Beschreibung von Isolatoren wie Nickeloxid oder Manganoxid, die magnetische Ordnung erst bei relativ niedrigen Temperaturen zeigen, aber eine große Bandlücke aufweisen. Die Band-Theorie sagt hier fälschlicherweise einen metallischen Zustand voraus, sofern langreichweitige magnetische Ordnung auszuschließen ist.

Mott hat durch seine Arbeiten wesentlich zum Verständnis korrelationsinduzierter Isolatoren (Elektron-Elektron-Wechselwirkung bedingt einen isolierenden Zustand in *partiell* gefüllten Bändern) beigetragen [2, 3]. Der isolierende Zustand wird nach ihm als Mott-

Isolator bezeichnet. Im einfachsten Fall betrachtet man ein Gittermodell mit einem einzigen Orbital auf jedem Gitterplatz. Ohne Elektron-Elektron-Wechselwirkung entsteht durch Überlapp der Orbitale ein *einzelnes* Band. Ein Mott-Isolator kann in diesem Modell bei einer Besetzung von einem Elektron je Gitterplatz entstehen. Während hier ohne Elektron-Elektron-Wechselwirkung ein exakt halbgefülltes Band existiert und somit ein metallischer Zustand vorliegt, führt die starke Coulomb-Abstoßung, die zwei Elektronen am selben Platz erfahren, nach Mott zu einer Aufspaltung in *zwei* Bänder. Ein-Teilchen-Anregungen, bei denen ein Elektron entfernt wird (unteres Hubbard-Band) bzw. ein Elektron hinzugefügt wird (oberes Hubbard-Band) sind durch ein großes Gap energetisch voneinander getrennt. Dies ist charakteristisch für einen Mott-Isolator.

Zur theoretischen Behandlung stark korrelierter Elektronensysteme und insbesondere von Mott-Isolatoren werden vereinfachte Gittermodelle verwendet, die die relevanten physikalischen Eigenschaften der Materialien wiedergeben. Das einfachste nichttriviale Gittermodell in diesem Zusammenhang ist das Hubbard-Modell [4], das im folgenden Kapitel im Detail vorgestellt wird. Mit Hilfe des Hubbard-Modells lassen sich sowohl der Mott-Isolator als auch Phasenübergänge (vom Mott-Isolator) in metallische und supraleitende Phasen beschreiben. Phasenübergänge treten hier als Funktion der Wechselwirkungsstärke oder in Abhängigkeit der Dotierung auf.

Zur exakten bzw. approximierten Lösung des Hubbard-Modells sind eine Vielzahl unterschiedlicher numerischer und analytischer Methoden herangezogen worden. In Übereinstimmung mit Motts Bild vom korrelationsinduzierten Isolator schlug Hubbard, ausgehend vom Limes großer Wechselwirkung, eine Aufspaltung der ursprünglichen (freien) Zustandsdichte in ein unteres und oberes Hubbard-Band vor [5]. Ein Metall-Isolator-Übergang durch Verringerung der Wechselwirkungsstärke kann als Überlappen der beiden Hubbard-Bänder verstanden werden. Fermi-Flüssigkeits-Eigenschaften des metallischen Zustands für schwache Wechselwirkung vermag Hubbards Ansatz allerdings nicht zu beschreiben. Brinkman und Rice [6] erklären den Metall-Isolator-Übergang im Hubbard-Modell dagegen durch eine Divergenz der effektiven Masse der Quasiteilchen, indem sie vom metallischen Zustand für schwache Wechselwirkung starten. Dieser Ansatz liefert eine angemessene Beschreibung der niederenergetischen Physik des Metalls, hochfrequente Anregungen im Ein-Teilchen-Spektrum werden aber nicht erfasst.

Große Fortschritte konnten durch die Entwicklung der Dynamical Mean-Field Theory (DMFT) [7] erzielt werden. Mit diesem Ansatz gelingt eine konsistente Beschreibung sowohl des Metalls als auch des Isolators. Die DMFT bildet dabei das Gitterproblem selbstkonsistent auf ein effektives Ein-Platz-Modell ab. Der Einfluss des umgebenden Gitters wird durch ein Reservoir nichtwechselwirkender Elektronen (Bad) beschrieben. Der betrachtete Gitterplatz kann Elektronen mit dem Bad austauschen, zeitliche quantenmechanische Fluktuationen werden dadurch berücksichtigt. Im Gegensatz zur *statischen* Molekularfeld-Theorie wird das umgebende Medium in der DMFT nicht durch eine Zahl, sondern mittels einer frequenzabhängigen Hybridisierungsfunktion $\Delta(\omega)$ beschrieben, die selbstkonsistent bestimmt wird. Während räumliche Fluktuationen durch die Abbildung auf ein effektives Ein-Platz-Modell im Rahmen der DMFT vernachlässigt werden, wird die lokale Dynamik der Elektronen exakt behandelt.

Die DMFT-Lösung des Hubbard-Modells führt bereits auf ein komplexes Phasendiagramm für den Mott-Metall-Isolator-Übergang. Quanten-Cluster-Methoden [8] erlauben als Erweiterung der DMFT, zusätzlich auch *kurzreichweitige* räumliche Korrelationen in der Beschreibung stark korrelierter Systeme zu berücksichtigen und deren Relevanz für die physikalischen Eigenschaften des Systems zu untersuchen. Als Clustererweiterungen der DMFT

existieren die Cellular Dynamical Mean-Field Theory (CDMFT) [9, 10] und die Dynamical Cluster Approximation (DCA) [11]. Während in CDMFT eine Aufteilung des Gitters in identische Cluster im Ortsraum vorgenommen wird, basiert die DCA auf einer Formulierung im reziproken Raum. Wie in DMFT beschreibt das Bad den Einfluss des umgebenden Mediums jenseits der Cluster Grenzen und wird durch entsprechende Selbstkonsistenzgleichungen bestimmt. Eine numerisch exakte Lösung des selbstkonsistenten Clusterproblems ist mit Hilfe von Quanten-Monte-Carlo-Methoden möglich. Dieses Verfahren funktioniert allerdings nur für endliche (genügend hohe) Temperaturen $T > 0$ und in Abwesenheit des fermionischen Vorzeichenproblems. Reduziert man das (kontinuierliche) Bad auf einige wenige Bad-Plätze, lässt sich das Clusterproblem durch exakte Diagonalisierung sogar für $T = 0$ lösen. Als Konsequenz können die Selbstkonsistenzgleichungen allerdings nur noch näherungsweise erfüllt werden, so dass eine thermodynamisch konsistente Beschreibung im Allgemeinen nicht mehr gegeben ist.

Clusterapproximationen im Rahmen der Selbstenergiefunktional-Theorie (SFT) [12] bilden eine neue Möglichkeit, Grundzustandseigenschaften des Hubbard-Modells thermodynamisch konsistent zu behandeln. Überdies erlaubt die Formulierung der Theorie, sich bei der Optimierung der Clusterparameter auf wenige relevante Größen zu konzentrieren, ohne die thermodynamische Konsistenz zu verletzen. Dadurch lässt sich der numerische Aufwand zum Teil erheblich reduzieren, während die Qualität der Resultate praktisch unverändert bleibt.

Die Untersuchung des Hubbard-Modells in $D = 2$ steht im Mittelpunkt dieser Arbeit. Wenn auch stark motiviert durch die enge Verbindung zur Hochtemperatur-Supraleitung in den Kupraten, ist unser eigentliches Interesse am $2D$ -Hubbard-Modell grundlegender Natur und konzentriert sich auf universelle im Gegensatz zu materialspezifischen Aspekten. Das Schicksal des Mott-Isolators bei Dotierung oder bei Reduzierung der Wechselwirkungsstärke steht dabei im Vordergrund. Neben physikalischen Fragestellungen sollen auch die Eigenschaften der verwendeten variationellen Clustermethode herausgearbeitet werden, wie der Einfluss von Clustergröße, Clustergeometrie oder Wahl der Variationsparameter.

Im folgenden Kapitel gehen wir detailliert auf das Hubbard-Modell mit seinen, im Rahmen dieser Arbeit, relevanten Eigenschaften ein. Die zugrundeliegende Theorie sowie die numerischen Aspekte der Methode werden danach vorgestellt (Kap. 3). Anschließend folgt die Anwendung auf das $2D$ -Hubbard-Modell (Kap. 4). Eine detaillierte Untersuchung der Eigenschaften der Clustermethode wird für das eindimensionale Hubbard-Modell durchgeführt, da hier ein Vergleich mit der exakten Lösung möglich ist (Kap. 5). Mit den so gewonnenen Erkenntnissen kann schließlich die Berechnung in $D = 2$ verfeinert werden (Kap. 6 und 7).

Kapitel 2

Hubbard-Modell

Aus dem Wechselspiel von kinetischer Energie auf der einen Seite und Elektron-Elektron-Wechselwirkung auf der anderen Seite resultieren eine Reihe nichttrivialer Viel-Teilchen-Effekte. Metall-Isolator-Übergänge, die durch Wechselwirkung getrieben werden (Mott-Metall-Isolator-Übergang), sind faszinierende Aspekte dieses Wechselspiels. Ein weiteres hochinteressantes Viel-Teilchen-Phänomen ist die Entstehung langreichweitiger magnetischer Ordnung, die in vielen Fällen auf starke Korrelationen zurückzuführen ist [13]. Desweiteren kann in diesem Zusammenhang schließlich die Hochtemperatur-Supraleitung erwähnt werden. Charakteristische Eigenschaften der kupratbasierten Hochtemperatur-Supraleiter lassen sich, als eine mögliche Sichtweise, als die Physik eines dotierten Mott-Isolators verstehen [14]. Grundlegende Eigenschaften stark korrelierter Materialien, wie vieler Übergangsmetalloxide (einschließlich der Kuprate), lassen sich im Rahmen theoretischer Modelle beschreiben. Vor allem aufgrund des starken Interesses an der Physik der Kuprate haben effektive Modelle wie das zweidimensionale Hubbard-Modell bzw. (im Limes starker Wechselwirkung) das t - J -Modell besondere Bedeutung erlangt. Obwohl diese effektiven Modelle als stark vereinfachte Beschreibung der elektronischen Struktur der Kuprate zu betrachten sind, enthalten sie dennoch wesentliche physikalische Aspekte, wie numerische Rechnungen zeigen. Dazu gehören unter anderem Antiferromagnetismus, Streifenphasen, Pseudogap-Verhalten sowie $d_{x^2-y^2}$ -Paarung [15]. Wie empfindlich das Wechselspiel zwischen den verschiedenen Phasen sein kann, zeigt sich z. B. in den abweichenden Ergebnissen, die unterschiedliche numerische Methoden ergeben können.

2.1 Ein-Band-Hubbard-Modell

Das Hubbard-Modell ist das einfachste nichttriviale fermionische Gittermodell. Es wurde ursprünglich eingeführt, um die niederenergetischen Anregungen schmaler d -Bänder in der Nähe der Fermi-Energie zu diskutieren [16]. Trotz seiner Einfachheit ist eine exakte Lösung nur in wenigen Ausnahmefällen möglich. Im Allgemeinen muss auf Näherungsverfahren zurückgegriffen werden.

Als Standardmodell zur Untersuchung der Hochtemperatur-Supraleitung der Kuprate hat insbesondere das zweidimensionale Drei-Band- bzw. (effektive) Ein-Band-Hubbard-Modell Bedeutung erlangt. Ausgangspunkt hierfür ist der Umstand, dass die Physik der Hochtemperatur-Supraleiter durch die Eigenschaften der Kupferoxidebenen bestimmt wird [14]. Relevant für die Darstellung der elektronischen Zustände sind das $d_{x^2-y^2}$ -Orbital des zentralen Kupferatoms sowie die p -Orbitale der umgebenden Sauerstoffatome, die mit dem

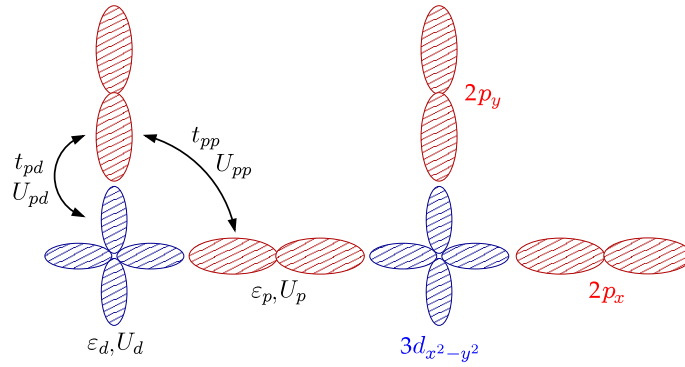


Abbildung 2.1: Relevante Orbitale der Kupferoxidebene zur Beschreibung der elektronischen Struktur der Kuprate. Als Parameter des Drei-Band-Hubbard-Modells treten die Hopping-Integrale t_{pp} , t_{pd} , die On-Site-Energien ε_p , ε_d sowie die Coulomb-Wechselwirkung U_p , U_d , U_{pd} auf. Bei der Abbildung auf das Ein-Band-Hubbard-Modell wird der Parameter U entscheidend durch U_{pd} bestimmt [14].

$d_{x^2-y^2}$ -Orbital eine starke kovalente Bindung eingehen (siehe Abb. 2.1). Daraus resultiert eine Einheitszelle bestehend aus einem Kupferatom und zwei Sauerstoffatomen, die auf eine Beschreibung der Kupferoxidebenen in Form eines Drei-Band-Modells führt, das zweidimensionale Drei-Band-Hubbard-Modell. Wesentliche Aspekte der niederenergetischen Physik lassen sich aber bereits in einem effektiven Ein-Band-Modell verstehen.

Im Ortsraum ist das Ein-Band-Hubbard-Modell in zweiter Quantisierung durch den Ausdruck

$$\hat{H} = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \quad (2.1)$$

gegeben. Die Operatoren $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger$ und $\hat{c}_{i\sigma}$ erzeugen bzw. vernichten ein Teilchen im Ein-Teilchen-Zustand mit Spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ an einem Gitterplatz i , der Besetzungszahloperator ist durch $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$ definiert. Die Parameter t_{ij} enthalten sowohl die Werte für die Hopping-Integrale als auch die On-Site-Energien t_{ii} ($= \varepsilon$) des Gittermodells. Die lokale Coulomb-Wechselwirkung, relevant bei Doppelbesetzung eines Gitterplatzes, wird durch die Größe U beschrieben. Effektive Werte für die Modellparameter lassen sich mit Hilfe von Bandstrukturrechnungen gewinnen.

2.2 Eigenschaften des (Ein-Band-)Hubbard-Modells

Einige ausgewählte Eigenschaften des Hubbard-Modells¹, die für die Diskussion unserer Daten hilfreich sind, sollen im Folgenden vorgestellt werden. Neben Symmetrieeigenschaften sind insbesondere exakte Resultate in den Dimensionen $D = 1$ und $D = \infty$ interessant. Wir beschränken uns hierbei auf die Betrachtung hyperkubischer Gitter mit Nearest-Neighbor-Hopping t und Next-Nearest-Neighbor-Hopping t' als Modellparameter. Werden Gitter mit endlicher Anzahl L an Gitterplätzen betrachtet, so setzen wir periodische Randbedingungen voraus. Der Energienullpunkt wird $\varepsilon = 0$ gewählt. Der Hamilton-Operator Gl. 2.1 lässt

¹Die Bezeichnung Hubbard-Modell wird im Weiteren synonym mit Ein-Band-Hubbard-Modell verwendet.

sich dadurch in der speziellen Form

$$\hat{\mathcal{H}} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} - t' \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle \sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} - \mu \sum_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \quad (2.2)$$

schreiben, wobei die Notation $\langle ij \rangle$ und $\langle\langle ij \rangle\rangle$ die Summe über nächste bzw. übernächste Gitterplätze meint. Die großkanonische Formulierung erlaubt die Festlegung der Teilchenzahl N (bzw. Teilchendichte $n = N/L$) mit Hilfe des chemischen Potentials μ .

2.2.1 Teilchen-Loch-Transformation

Das hyperkubische Gitter ist ein bipartites Gitter², so dass als geeignete Teilchen-Loch-Transformation

$$\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \mapsto \eta_i \hat{c}_{i\sigma} \quad (\hat{c}_{i\sigma} \mapsto \eta_i \hat{c}_{i\sigma}^\dagger) \quad (2.3)$$

gewählt wird. Der Phasenfaktor wird auf $\eta_i = 1$ für Gitterplätze i des Untergitters A bzw. auf $\eta_i = -1$ für Untergitter B gesetzt. Angewendet auf den Hamilton-Operator Gl. 2.2 ergibt die Teilchen-Loch-Transformation

$$\hat{\mathcal{H}} \mapsto -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + t' \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle \sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} - (U - \mu) \sum_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + (U - 2\mu)L \quad (2.4)$$

für ein Modell mit L Gitterplätzen. Es ist zu bemerken, dass die Transformation das Vorzeichen von t' ändert. Bei einer Abbildung von Loch- auf Elektronendotierung ist daher, neben einer Verschiebung der Grundzustandsenergie, die Parameteränderung $t' \mapsto -t'$ zu berücksichtigen. Teilchen-Loch-Symmetrie liegt offensichtlich nur für $t' = 0$ und $\mu = U/2$ vor.

2.2.2 Der Limes $U \rightarrow \infty$

Im Limes $U \rightarrow \infty$ lässt sich das Hubbard-Modell (mit Elektronenfüllung $N < L$ und $N \rightarrow L$) auf das t - J -Modell abbilden. Zweite Ordnung Störungstheorie in $1/U$ unter Ausschluss von Doppelbesetzung führt auf

$$\hat{H}_{t-J} = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \sum_{i \neq j} \frac{2t_{ij}^2}{U} \left(\hat{\mathbf{S}}_i \hat{\mathbf{S}}_j - \frac{1}{4} \hat{n}_i \hat{n}_j \right) \quad (2.5)$$

mit den Heisenberg-Spinoperatoren $\hat{\mathbf{S}}_i$ für Spin 1/2 [17]. Im Spezialfall von Halbfüllung ($N = L$) ergibt sich das antiferromagnetische Heisenberg-Modell

$$\hat{H}_H = \sum_{i \neq j} J_{ij} \left(\hat{\mathbf{S}}_i \hat{\mathbf{S}}_j - \frac{1}{4} \right), \quad (2.6)$$

wobei $J_{ij} = 2t_{ij}^2/U$ gilt. Folglich beschreibt das halbgefüllte Hubbard-Modell im Limes $U \rightarrow \infty$ einen antiferromagnetischen Isolator. Wird ausschließlich Nearest-Neighbor-Hopping t betrachtet, lässt sich die magnetische Wechselwirkung vereinfachend durch $J \sum_{\langle ij \rangle} \hat{\mathbf{S}}_i \hat{\mathbf{S}}_j$ mit $J = 2t^2/U$ darstellen (Anderson-Superaustausch [7]).

²Ein bipartites Gitter kann in zwei sich durchdringende Untergitter A und B derart aufgeteilt werden, dass alle nächsten Nachbarn eines beliebigen Gitterplatzes zum jeweils anderen Untergitter gehören [17].

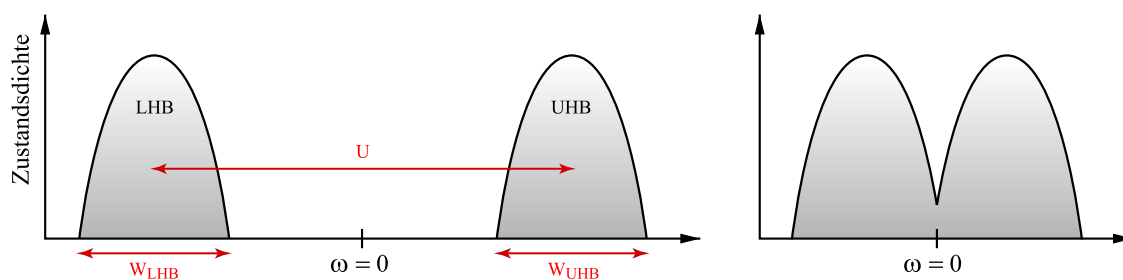


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung des Mott-Isolators mit unterem (LHB) und oberem (UHB) Hubbard-Band. Der Mott-Metall-Isolator-Übergang lässt sich daraus für $U \approx (W_{\text{LHB}} + W_{\text{UHB}})/2$ ablesen.

2.2.3 Mott-Metall-Isolator-Übergang

Während Band-Isolatoren aus einem effektiven Ein-Teilchen-Bild heraus (unbesetztes oder vollständig besetztes Band) verstanden werden können, lässt sich der Mott-Isolator nur als Viel-Teilchen-Effekt erklären. Mit Hilfe des *halbgefüllten* Hubbard-Modells kann ein solcher durch Elektron-Elektron-Wechselwirkung erzeugter Isolator beschrieben werden.

Die grundlegende Idee des Mott-Metall-Isolator-Übergangs ist in einem quasi-atomaren Bild zu verstehen [17]. Für hinreichend große Werte der Wechselwirkung $U \gg W$ (W Bandbreite des nichtwechselwirkenden Systems) ist jeder Gitterplatz einfach besetzt. Das Hinzufügen eines weiteren Elektrons erfordert daher die Energie $U - W_{\text{UHB}}/2$. Das zusätzliche Teilchen kann von einem Gitterplatz zu einem anderen Gitterplatz hüpfen (t_{ij}), es entsteht ein oberes Hubbard-Band (UHB) der Breite W_{UHB} . In ähnlicher Weise führen die Hopping-Integrale zu einer Verbreiterung der atomaren Niveaus, wenn ein Elektron entfernt wird, d. h. ein einzelnes Loch betrachtet wird (unteres Hubbard-Band (LHB) mit W_{LHB}).

Das Spektrum der Ladungsanregungen ist somit durch das untere und obere Hubbard-Band gegeben, der Abstand (der Schwerpunkte) dieser Bänder wird grob durch die Wechselwirkung U festgelegt (siehe Abb. 2.2). Unteres und oberes Hubbard-Band sind keine starren Bänder (wie in der Beschreibung unabhängiger Elektronen), sondern entstehen als Viel-Teilchen-Effekt und sind als solcher von der Elektronenzahl abhängig. Bei Halbfüllung ($N = L$) in Teilchen-Loch-Symmetrie ist $W_{\text{LHB}} = W_{\text{UHB}}$ und das Spektrum symmetrisch zu $\omega = 0$. In einem sehr einfachen Bild kann der Übergang vom Mott-Isolator zum Metall bei Halbfüllung als Funktion von U durch Überlappen der beiden Hubbard-Teilbänder für $U \approx (W_{\text{LHB}} + W_{\text{UHB}})/2$ verstanden werden.

2.2.4 Magnetismus

Ferromagnetismus tritt nicht als wesentliche Eigenschaft des Ein-Band-Hubbard-Modells auf, sondern ist eher als Ausnahme zu betrachten. Lieb konnte z. B. nachweisen, dass der Grundzustand des repulsiven Hubbard-Modells ($U > 0$) für bipartite Gitter bei Halbfüllung ein Singulett ist, sofern beide Untergitter die gleiche Anzahl an Gitterplätzen besitzen [18]. Liebs Theorem behält unabhängig von der Gitterstruktur für beliebige Dimensionen seine Gültigkeit.

Der Nachweis eines ferromagnetischen Grundzustands gelingt im Grenzfall eines einzelnen Lochs im halbgefüllten Band für $U = \infty$ [17]. Diese Phase ist als Nagaoka-Ferromagnetismus bekannt. Der Nagaoka-Ferromagnet wird auch für endliche Lochdotierung als

stabil angenommen, allerdings existiert für diesen Fall kein formaler Beweis.

Aus der Abbildung des Hubbard-Modells auf das (Spin-1/2-)Heisenberg-Modell für große Wechselwirkung (Gl. 2.6) wird deutlich, dass antiferromagnetische Korrelationen nahe Halbfüllung eine besondere Rolle spielen. Während sich in $D = 1$ aufgrund von Quantenfluktuationen keine langreichweitige antiferromagnetische Ordnung ausbildet, ist die Existenz von Néel-Ordnung für $D \geq 3$ gesichert [17]. In $D = 2$ ist eine exakte Aussage zum Antiferromagnetismus im Heisenberg-Modell nicht möglich, numerische Resultate lassen aber auf einen antiferromagnetischen Grundzustand schließen (vergl. Abschnitt 2.3).

Es sei darauf hingewiesen, dass Aussagen zu langreichweitiger magnetischer Ordnung in $D \leq 2$ aufgrund des Mermin-Wagner-Theorems [19] nur für den Grundzustand relevant sind, da hier für endliche Temperaturen jede Art von langreichweitiger magnetischer Ordnung auszuschließen ist.

2.2.5 Exakte Ergebnisse in $D = 1$ und $D = \infty$

Trotz seiner einfachen Struktur lässt sich das Hubbard-Modell nur für wenige Ausnahmefälle exakt lösen. Exakte Lösungen sind in $D = 1$ mit Hilfe des Bethe-Ansatzes sowie im Limes $D \rightarrow \infty$ im Rahmen der Dynamical Mean-Field Theory (DMFT) möglich.

Eindimensionales Hubbard-Modell

Wir betrachten zunächst das Hubbard-Modell Gl. 2.1 in $D = 1$. Dabei soll nur Nearest-Neighbor-Hopping t berücksichtigt werden. Teilchen-Loch-Symmetrie (und damit Halbfüllung $N = L$) liegt für $\mu = U/2$ vor (siehe Abschnitt 2.2.1). Die exakte Grundzustandsenergie E_0 folgt aus dem Bethe-Ansatz und ist für Halbfüllung durch

$$E_0/L = -4t \int_0^\infty dx \frac{J_0(x)J_1(x)}{x(1 + \exp(xU/2t))} \quad (2.7)$$

gegeben [20]. J_0, J_1 sind Bessel-Funktionen. Während sich für $U = 0$ ein metallischer Zustand ergibt, sind unteres und oberes Hubbard-Band für alle $U > 0$ durch eine Bandlücke voneinander getrennt. Die exakte Größe des Gaps Δ ist durch

$$\Delta = \frac{16t^2}{U} \int_1^\infty dx \frac{\sqrt{x^2 - 1}}{\sinh(2\pi tx/U)} \quad (2.8)$$

bestimmt [21]. Eine Betrachtung der Grenzfälle starker und schwacher Wechselwirkung führt auf [17]

$$\Delta = \begin{cases} (8t/\pi)\sqrt{U/t} e^{-2\pi t/U} & \text{für } U \lesssim \frac{W}{2} = 2t \\ U - 4t + 8 \ln(2)t^2/U & \text{für } U \gtrsim W = 4t \end{cases} \quad (2.9)$$

Das Gap ist endlich für alle $U > 0$, wenn auch exponentiell klein im Limes $U \rightarrow 0$. Im Bereich kleiner Wechselwirkung wird die Bandlücke im Mott-Isolator durch die Tendenz zu magnetischer Ordnung bestimmt ($\Delta \sim \exp(-t/U)$), ab $U \approx \mathcal{O}(W)$ spielen Ladungskorrelationen die wesentliche Rolle. Die Bandbreite der Hubbard-Bänder für $U \gg W$ ergibt sich als $W_{\text{LHB}} = W_{\text{UHB}} = 4t$ [17].

Der füllungsabhängige Mott-Metall-Isolator-Übergang kann durch die Ladungssuszeptibilität („Kompressibilität“)

$$\kappa = \frac{\partial n}{\partial \mu} \quad (2.10)$$

charakterisiert werden. Für $U = 0$ ist die Kompressibilität κ proportional zur (Tight-Binding-)Zustandsdichte an der Fermi-Energie und damit endlich für jede Bandfüllung mit Ausnahme von $n = 0$ und $n = 2$ (wegen der Van-Hove-Singularitäten an der unteren und oberen Bandkante). Aufgrund des Gaps im Ein-Teilchen-Anregungsspektrum ergibt sich für beliebige Wechselwirkung $U > 0$ der Wert $\kappa = 0$ für die Ladungssuszeptibilität im Mott-Isolator. Die Kompressibilität ist allerdings unstetig am Metall-Isolator-Übergang und zeigt sogar divergentes Verhalten in der metallischen Phase für $n \rightarrow 1$. Im Metall in der Nähe von Halbfüllung ($n < 1$) gilt

$$\kappa \propto \alpha \delta^{-1} \quad (2.11)$$

für $\delta \rightarrow 0$ mit der Lochdotierung $\delta = 1 - n$ und einer U -abhängigen Konstante $\alpha > 0$ [22]. Daraus folgt, dass der Wert der Dotierung δ als Funktion des chemischen Potentials in der Nähe des Metall-Isolator-Übergangs durch

$$\delta \propto \sqrt{\mu(0) - \mu(\delta)} \quad (2.12)$$

bestimmt ist, woraus sich eine unendliche Steigung von $\delta(\mu)$ beim Übergang zu Halbfüllung (d. h. $\delta = 0$) ablesen lässt.

Numerische Rechnungen im Rahmen der Dynamical Density-Matrix Renormalization Group (DDMRG) zeigen im Prinzip exakte Übereinstimmung mit analytischen Resultaten des Bethe-Ansatzes und liefern weitaus mehr Information [23]. DDMRG bietet einen geeigneten numerischen Zugang zum eindimensionalen Hubbard-Modell in Ergänzung zum Bethe-Ansatz.

Unendlichdimensionales Hubbard-Modell

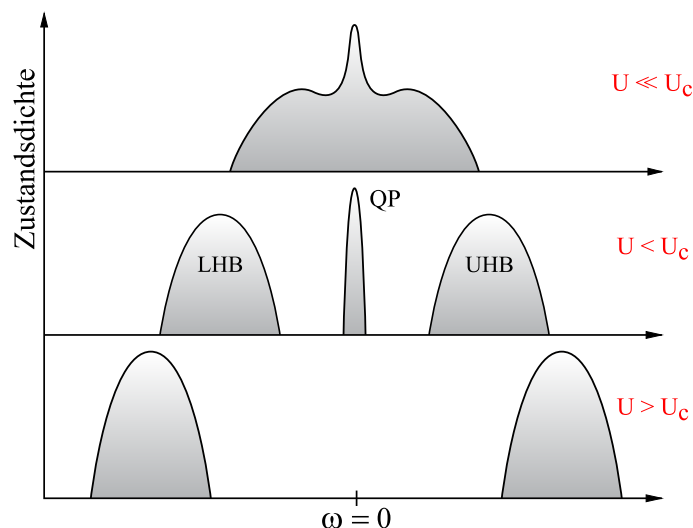


Abbildung 2.3: Schematische Darstellung des Mott-Metall-Isolator-Übergangs in $D = \infty$ (DMFT). Der Phasenübergang ($U = U_c$) ist durch das Verschwinden des Quasiteilchen-Peaks (QP) im bereits voll ausgebildeten Mott-Hubbard-Gap bestimmt („preformed-gap scenario“).

Eine exakte Behandlung des Hubbard-Modells im Limes $D \rightarrow \infty$ ist im Rahmen der DMFT möglich. Räumliche quantenmechanische Fluktuationen werden hier vernachlässigbar, die Selbstenergie ist eine rein lokale Größe. Modelle, in denen die Wechselwirkung auf

einen einzelnen Platz beschränkt ist, zeigen ebenfalls eine rein lokale Selbstenergie und sind daher (im Limes $D \rightarrow \infty$) äquivalent zum Hubbard-Modell. Die Verbindung wird dabei durch die sogenannte DMFT-Selbstkonsistenzbedingung hergestellt [7]. Ein Beispiel für ein solches effektives Modell ist das Störstellen-Anderson-Modell. Obgleich die DMFT eine exakte Theorie des unendlichdimensionalen Hubbard-Modells darstellt, ist eine analytische Lösung der DMFT-Selbstkonsistenzgleichungen im Allgemeinen nicht möglich, so dass auf numerische Methoden zurückgegriffen werden muss.

Der Grenzübergang $D \rightarrow \infty$ setzt eine geeignete Reskalierung der Hopping-Parameter voraus, so dass sich ein endlicher Erwartungswert der kinetischen Energie (pro Gitterplatz) ergibt. Für das hyperkubische Gitter mit Nearest-Neighbor-Hopping t folgt mit der Wahl

$$\tilde{t} = \frac{t}{\sqrt{2D}} \quad (2.13)$$

für das reskalierte Hopping eine Gauß-Verteilung als freie Zustandsdichte [17]

$$\rho_0(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\tilde{t}}} e^{-\frac{\omega^2}{2\tilde{t}^2}}. \quad (2.14)$$

Das so definierte Band ist nicht beschränkt, so dass als effektive Bandbreite die Standardabweichung

$$W = 4 \left(\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \rho_0(\omega) \omega^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.15)$$

verwendet wird.

Im Gegensatz zum eindimensionalen halbgefüllten Hubbard-Modell kann sich in $D = \infty$ langreichweitige antiferromagnetische Ordnung ausbilden, sofern die Perfect-Nesting-Bedingung

$$\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = -\varepsilon(\mathbf{k}), \quad \mathbf{Q} = (\pi, \pi, \dots, \pi) \quad (2.16)$$

erfüllt ist (was für das hyperkubische Gitter ohne magnetische Frustration zutrifft). Diese Eigenschaft lässt sich für schwache Wechselwirkung in Hartree-Fock-Näherung verifizieren, für starke Wechselwirkung ergibt sie sich aus der Abbildung auf das Heisenberg-Modell (siehe Abschnitt 2.2.2). Analytische Argumente und numerische Rechnungen führen somit auf einen antiferromagnetischen Isolator als Grundzustand für beliebige Wechselwirkung [7, 17]. Im Limes $U \rightarrow \infty$ ist der exakte Grundzustand der Néel-Zustand. In endlichen Dimensionen dagegen spielen Spinfluktuationen eine wesentliche Rolle und führen zu einer Reduktion des magnetischen Ordnungsparameters.

In Abwesenheit langreichweitiger magnetischer Ordnung lassen analytische Überlegungen auf einen Mott-Metall-Isolator-Übergang schließen [7]. Der kritische Wert der Wechselwirkung U_c ergibt sich aus numerischen Rechnungen zu $U_c \approx 1.5W$ (im Gegensatz zu $U_c = 0$ in $D = 1$). Abweichend vom einfachen Bild des Metall-Isolator-Übergangs in Abschnitt 2.2.3 ist der Phasenübergang nicht allein durch ein Aufspalten der Zustandsdichte in unteres und oberes Hubbard-Band mit zunehmender Wechselwirkung U charakterisiert. Vielmehr tritt in der metallischen Phase zusätzlich ein Quasiteilchen-Peak um $\omega = 0$ auf (siehe Abb. 2.3). Dadurch bleibt der Zustand metallisch, obwohl die beiden Hubbard-Bänder bereits ausgebildet sind (preformed Gap). Erst das Verschwinden des Quasiteilchen-Peaks führt zum Mott-Metall-Isolator-Übergang in $D = \infty$. Für große Wechselwirkung $U \gg W$ gilt wie in $D = 1$ für die Breite der Hubbard-Bänder $W_{\text{LHB}} = W_{\text{UHB}} = W$ [17].

Ein wesentlicher Aspekt des Mott-Metall-Isolator-Übergangs in $D = \infty$ ist das Auftreten eines Koexistenzbereichs $U_{c1}(T) < U < U_{c2}(T)$ für Temperaturen T unterhalb eines

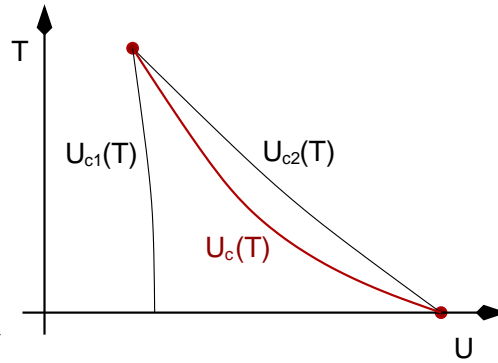


Abbildung 2.4: Koexistenzbereich des unendlichdimensionalen Hubbard-Modells mit paramagnetischer metallischer und isolierender Phase. Die Phasengrenze ist durch $U_c(T)$ festgelegt.

kritischen Werts T_c . In diesem Parameterbereich folgt aus den DMFT-Selbstkonsistenzgleichungen sowohl die Existenz einer metallischen als auch einer isolierenden paramagnetischen Lösung [7]. Der eigentliche Phasenübergang (erster Ordnung) bestimmt sich aus dem Vergleich der freien Energie der beiden Lösungen und führt auf die Phasengrenze $U_c(T)$ (siehe Abb. 2.4). Nur an den kritischen Endpunkten $U_c(0)$ bzw. $U_c(T_c)$ ist der Phasenübergang zweiter Ordnung.

Dotierung des Hubbard-Modells in $D = \infty$ erzeugt im Unterschied zum eindimensionalen Hubbard-Modell keine Divergenz in der Kompressibilität beim Übergang zum Mott-Isolator ($n \rightarrow 1$). Die Kompressibilität bleibt endlich für alle $U > U_c$ und es gilt $0 < \kappa < \infty$ für $n \rightarrow 1$ bzw. $\kappa = 0$ bei Half-füllung [7].

2.3 Das zweidimensionale Hubbard-Modell

Während in den Dimensionen $D = 1$ und $D = \infty$ der Grundzustand des Hubbard-Modells (numerisch) exakt bestimmt werden kann, ist ein vergleichbarer Zugang in $D = 2$ nicht möglich. Zur Untersuchung des zweidimensionalen Hubbard-Modells ist man folglich auf geeignete Näherungen angewiesen. Dementsprechend ist die Physik des Modells in $D = 2$ bei weitem nicht so gut verstanden wie in $D = 1$ und $D = \infty$.

Im Limes $U \rightarrow 0$ bieten Hartree-Fock-Rechnungen einen möglichen Zugang. So resultiert für das halbgefüllte Hubbard-Modell mit Nearest-Neighbor-Hopping t in $D = 2$ aus der Perfect-Nesting-Bedingung (Gl. 2.16) ein antiferromagnetischer Grundzustand für beliebige $U > 0$. Unter Berücksichtigung der Singularität in der freien Zustandsdichte ergibt sich für die Abhängigkeit der Bandlücke von U der Ausdruck [24]

$$\Delta \sim t e^{-2\pi\sqrt{t/U}}. \quad (2.17)$$

Der Grenzfall starker Wechselwirkung kann wie üblich durch die Abbildung auf das Heisenberg-Modell ($J = 2t^2/U$) behandelt werden. Aufgrund von Quantenfluktuationen ist der Ordnungsparameter ($m = n_\uparrow - n_\downarrow$) gegenüber dem Wert $m = 1$ für den klassischen Néel-Zustand reduziert. Numerische Rechnungen zum zweidimensionalen Heisenberg-Modell ergeben $m \approx 0.61$ [25]. Ergänzend zu den betrachteten Grenzfällen schwacher und starker Wechselwirkung bestätigen schon Rechnungen von Hirsch [24] und White *et al.* [26] das Auftreten von langreichweitiger antiferromagnetischer Ordnung für beliebige repulsive

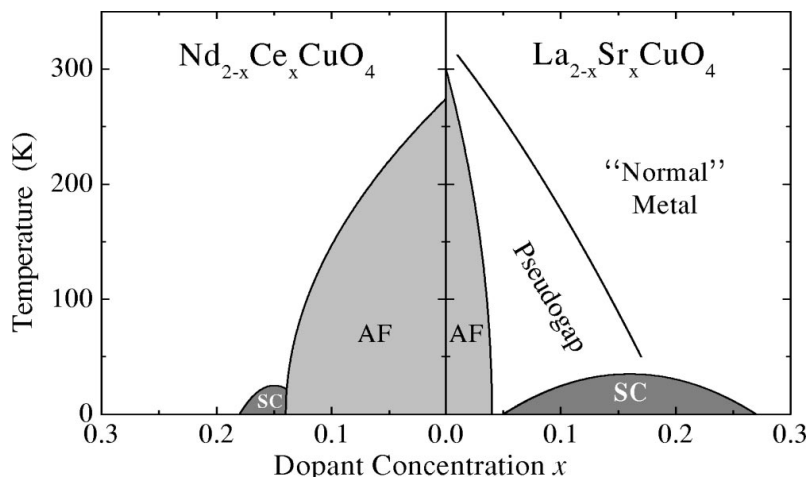


Abbildung 2.5: Schematisches Phasendiagramm der Hochtemperatur-Supraleiter für Elektronendotierung (links) und Lochdotierung (rechts) mit supraleitenden (SC) und antiferromagnetischen (AF) Phasen. Aus Rev. Mod. Phys. **75**, 473 - 541 (2003), Ref. [27].

Wechselwirkung. Bereits die Betrachtung des Antiferromagneten bei Halfüllung macht deutlich, dass eine umfassende Untersuchung des zweidimensionalen Hubbard-Modells ohne geeignete numerische Verfahren nicht möglich ist.

Aufgrund des großen Interesses an der Untersuchung der Hochtemperatur-Supraleitung hat das zweidimensionale (Ein-Band-)Hubbard-Modell einen besonderen Stellenwert erlangt. Ein schematisches Phasendiagramm der Hochtemperatur-Supraleiter ist in Abb. 2.5 zu sehen. Ausgehend vom Mott-Isolator zeigt sich zunächst eine antiferromagnetische metallische Phase, mit weiterer Dotierung kann der Übergang in die supraleitende Phase beobachtet werden. Die Herausforderung besteht somit darin, vom Mott-Isolator kommend, ein Verständnis des dotierten Hubbard-Modells zu entwickeln.

Kapitel 3

Selbstenergiefunktional-Theorie

Clustermethoden basieren auf der Idee, die physikalischen Eigenschaften eines Modells im thermodynamischen Limes durch selbstkonsistente oder variationelle Einbettung endlicher Cluster in ein unendliches Gitter zu bestimmen. Grundlage der vorliegenden Arbeit bildet die Variational Cluster Approximation (VCA) [28], eine mögliche Näherung im Rahmen der Selbstenergiefunktional-Theorie (SFT) [12]. Die SFT sowie daraus ableitbare Näherungen sollen im Folgenden vorgestellt werden.

3.1 Selbstenergiefunktional

Es soll zunächst ein allgemeines Modellsystem $\hat{H} = \hat{H}_0(\mathbf{t}) + \hat{H}_1(\mathbf{U})$ mit Ein-Teilchen-Parametern \mathbf{t} und Zwei-Teilchen-Wechselwirkung \mathbf{U} betrachtet werden, das sich in zweiter Quantisierung durch

$$\hat{H} = \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} U_{\alpha\beta\gamma\delta} \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\beta^\dagger \hat{c}_\delta \hat{c}_\gamma \quad (3.1)$$

darstellen lässt. Die Indizes α, β, \dots beziehen sich dabei auf eine vollständige (Ein-Teilchen-) Orthonormalbasis. In großkanonischer Formulierung gilt

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{H} - \mu \hat{N} \quad (3.2)$$

mit dem Teilchenzahloperator $\hat{N} = \sum_\alpha \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\alpha$. Der Parameter μ bezeichnet wie üblich das chemische Potenzial. Die zugehörige Green-Funktion $\mathbf{G}(\omega)$ des Modells $\hat{\mathcal{H}}$ ist in der Lehmann-Darstellung durch den Ausdruck [29]

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{mn} \langle m | \hat{c}_\alpha | n \rangle \langle n | \hat{c}_\beta^\dagger | m \rangle \frac{e^{-\beta E_m} + e^{-\beta E_n}}{\omega - (E_n - E_m)} \quad (3.3)$$

bestimmt. Dabei bezeichnen Z die (großkanonische) Zustandssumme und β die inverse Temperatur T . Die Eigenzustände und Eigenenergien von $\hat{\mathcal{H}}$ sind mit $|m\rangle$ und E_m notiert. Unter Einführung der Selbstenergie $\Sigma(\omega)$ lässt sich $\mathbf{G}(\omega)$ alternativ durch die Dyson-Gleichung [29]

$$\mathbf{G}(\omega) = \frac{1}{\mathbf{G}_0^{-1}(\omega) - \Sigma(\omega)} \quad (3.4)$$

darstellen; für die freie Green-Funktion $\mathbf{G}_0(\omega)$ gilt

$$\mathbf{G}_0(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \mathbf{t}}. \quad (3.5)$$

Man beachte, dass es sich bei den angegebenen Größen im Allgemeinen um Matrizen handelt (fett dargestellt). Funktionen dieser Matrizen sind über die entsprechende Potenzreihenentwicklung definiert.

Aufbauend auf der Selbstenergie Σ (die Abhängigkeit von ω wird im Weiteren nicht mehr explizit angegeben) als unabhängiger Variable erlaubt die SFT sowohl die Bestimmung statischer thermodynamischer Größen als auch die Beschreibung von Ein-Teilchen-Anregungen. Die zentrale Rolle nimmt hierbei das sogenannte Selbstenergiefunktional ein, das durch [12]

$$\Omega_t[\Sigma] = \text{Tr} \ln \frac{1}{\mathbf{G}_{t,0}^{-1} - \Sigma} + F[\Sigma] \quad (3.6)$$

definiert wird. Der Index t soll auf die implizite Abhängigkeit von den Ein-Teilchen-Parametern hinweisen. Es wurde die Abkürzung $\text{Tr} = T \sum_n e^{i\omega_n 0^+} \text{tr}$ (0^+ ist ein positives Infinitesimal) mit üblicher Definition der Spur tr und der fermionischen Matsubara-Frequenzen $\omega_n = (2n + 1)\pi T$ verwendet. Das Funktional $F[\Sigma]$ ist durch die Legendre-Transformierte des Luttinger-Ward-Funktional $\Phi[\mathbf{G}]$

$$F[\Sigma] = \Phi[\mathbf{G}[\Sigma]] - \text{Tr}(\Sigma \mathbf{G}[\Sigma]) \quad (3.7)$$

gegeben. Eine wesentliche Eigenschaft von $\Phi[\mathbf{G}]$, die in die Definition des Selbstenergiefunktional einght, ist

$$\frac{1}{T} \frac{\delta \Phi[\mathbf{G}]}{\delta \mathbf{G}} = \Sigma[\mathbf{G}], \quad (3.8)$$

wodurch $\mathbf{G}[\Sigma]$ formal als inverses Funktional von $\Sigma[\mathbf{G}]$ festgelegt wird. Die physikalische Selbstenergie wird durch Variation von $\Omega_t[\Sigma]$ bestimmt. Aus der Stationarität des Selbstenergiefunktional folgt

$$\frac{\delta \Omega_t[\Sigma]}{\delta \Sigma} = 0 \Leftrightarrow \mathbf{G} = \frac{1}{\mathbf{G}_{t,0} - \Sigma}, \quad (3.9)$$

d. h. es gilt die Dyson-Gleichung 3.4 für die Green-Funktion. Es ist zu betonen, dass die Stationaritätsbedingung Gl. 3.9 ein exaktes Resultat darstellt. Die durch entsprechende Lösung der Stationaritätsbedingung festgelegte Selbstenergie Σ_{opt} und Green-Funktion $\mathbf{G}[\Sigma_{\text{opt}}]$ sind exakte Größen des betrachteten Modells $\hat{\mathcal{H}}$. Das physikalische großkanonische Potenzial ist durch den Wert des Selbstenergiefunktional $\Omega = \Omega_t[\Sigma_{\text{opt}}]$ gegeben.

Obwohl sich die Eigenschaft Gl. 3.9 formal herleiten lässt, ist eine explizite Auswertung des Selbstenergiefunktional (im Allgemeinen) nicht möglich. Das rührt daher, dass die Definition des Selbstenergiefunktional gemäß Gl. 3.6 keinen geschlossenen Ausdruck für $\Omega_t[\Sigma]$ liefert. Eine Berechnung von $\Omega_t[\Sigma]$ auf einer gewissen Mannigfaltigkeit von Selbstenergien ist aber durchaus möglich. Dabei wird auf ein (exakt lösbares) sogenanntes Referenzsystem Bezug genommen. Hier wird ausgenutzt, dass $F[\Sigma]$ universell ist, d. h. nur von den Zwei-Teilchen-Parametern \mathbf{U} abhängt, nicht aber von den Ein-Teilchen-Größen t . Das bedeutet im Speziellen, dass das Funktional $F[\Sigma]$ für die beiden Modelle $\hat{H} = \hat{H}_0(t) + \hat{H}_1(\mathbf{U})$ bzw. $\hat{H}' = \hat{H}_0(t') + \hat{H}_1(\mathbf{U})$ identisch ist. Unter Berücksichtigung dieser Eigenschaft berechnet sich die Differenz der zugehörigen Selbstenergiefunktionale als

$$\Omega_t[\Sigma] - \Omega_{t'}[\Sigma] = \text{Tr} \ln \frac{1}{\mathbf{G}_{t,0}^{-1} - \Sigma} - \text{Tr} \ln \frac{1}{\mathbf{G}_{t',0}^{-1} - \Sigma}. \quad (3.10)$$

Da nach Voraussetzung das sogenannte Referenzsystem \hat{H}' exakt lösbar ist, folgt mit der physikalischen Selbstenergie $\Sigma(t')$ von \hat{H}'

$$\Omega_t[\Sigma(t')] = \Omega' + \text{Tr} \ln \frac{1}{\mathbf{G}_{t,0}^{-1} - \Sigma(t')} - \text{Tr} \ln \mathbf{G}' \quad (3.11)$$

mit dem physikalischen Wert des großkanonischen Potentials für das Referenzsystem $\Omega' \equiv \Omega_{\mathbf{t}'}[\Sigma(\mathbf{t}')]$ und mit der exakten Green-Funktion \mathbf{G}' des Referenzsystems.

3.1.1 Parametrisierung der Selbstenergie: Referenzsysteme

Mit Hilfe eines geeignet gewählten Referenzsystems lässt sich das Selbstenergiefunktional gemäß Gl. 3.11 auswerten. Entscheidend ist hierbei, dass nur die Ein-Teilchen-Parameter \mathbf{t}' von den Werten \mathbf{t} des ursprünglichen Modellsystems verschieden sein dürfen, der Wechselwirkungsanteil beider Modelle muss übereinstimmen ($\mathbf{U}' = \mathbf{U}$). Die Wahl der Parameter \mathbf{t}' wird allein dadurch eingeschränkt, dass das Referenzsystem \hat{H}' exakt lösbar bleiben muss. Die thermodynamischen Parameter Temperatur T und chemisches Potenzial μ sind im Modell- und Referenzsystem identisch.

Näherungen im Rahmen der SFT, wie die zu Beginn des Kapitels erwähnte VCA, lassen sich dadurch konstruieren, dass man den Raum der Test-Selbstenergien auf einen ausgewählten Unterraum \mathcal{S} einschränkt. Ein solcher Unterraum kann dadurch festgelegt werden, dass ein Referenzsystem \hat{H}' vorgegeben wird und alle oder einige der Ein-Teilchen-Parameter \mathbf{t}' als Variationsparameter betrachtet werden. Auf diese Weise wird eine Parametrisierung der (Test-)Selbstenergien $\Sigma(\mathbf{t}')$ impliziert, die \mathcal{S} definiert. Die Näherung besteht nun darin, die Stationaritätsbedingung Gl. 3.9 auf den Unterraum \mathcal{S} einzuschränken, d. h. durch die Bedingung

$$\frac{\Omega_{\mathbf{t}'}[\Sigma(\mathbf{t}')] }{\partial \mathbf{t}'} \stackrel{!}{=} 0 \quad (3.12)$$

zu ersetzen. Die Gleichungen 3.11 und 3.12 bilden die Grundlage für die numerische Rechnung.

Im Sinne der Näherung Gl. 3.12 werden die physikalischen Größen des betrachteten Modells \hat{H} durch die optimalen Variationsparameter \mathbf{t}'_{opt} definiert. Wesentliche Eigenschaften werden dabei durch das großkanonische Potenzial

$$\Omega := \Omega_{\mathbf{t}'}[\Sigma(\mathbf{t}'_{\text{opt}})], \quad (3.13)$$

die Green-Funktion

$$\mathbf{G}(\omega) := \frac{1}{\mathbf{G}_{\mathbf{t},0}^{-1}(\omega) - \Sigma(\omega, \mathbf{t}'_{\text{opt}})} \quad (3.14)$$

sowie die Ein-Teilchen-Spektralfunktion

$$\mathbf{A}(\omega) := -\frac{1}{\pi} \text{Im } \mathbf{G}(\omega + i0^+) \quad (3.15)$$

beschrieben. Obige Definition der Spektralfunktion geht von einer Darstellung im Ortsraum aus. Im Zuge der Diskussion der Resultate in den folgenden Kapiteln werden wir auf die Definitionen 3.13 bis 3.15 zurückkommen.

Die Wahl des Referenzsystems bestimmt den Charakter der Approximation. Es sind sowohl (dynamische) Mean-Field-Näherungen als auch Clusterapproximationen denkbar. Abb. 3.1 illustriert die Konstruktion ausgewählter Referenzsysteme zu einem gegebenen Modellsystem. Referenzsystem (a) dient als Beispiel einer Mean-Field-Näherung. Wie in Abb. 3.1 (a) dargestellt, erlaubt der Übergang vom Modell- zum Referenzsystem die Einführung zusätzlicher unkorrelierter Plätze (Bad-Plätze). Der Wechselwirkungsanteil bleibt dadurch unverändert, die Selbstenergie $\Sigma(\mathbf{t}')$ existiert weiterhin nur auf den korrelierten Plätzen. Diese Näherung wird als Two-Site Dynamical Impurity Approximation bezeichnet. Wird das ursprüngliche Gitter in identische entkoppelte Cluster endlicher Größe aufgeteilt,

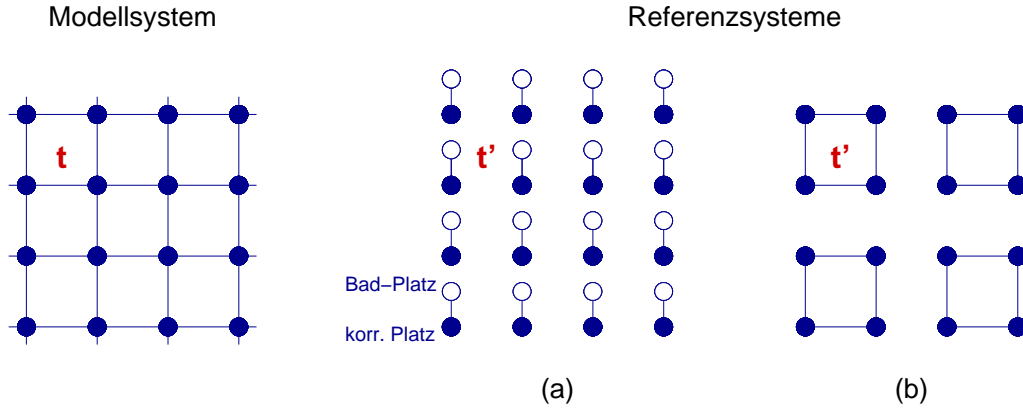


Abbildung 3.1: Konstruktion möglicher Referenzsysteme zu einem vorgegebenen Modellsystem. Der Übergang zum Referenzsystem erlaubt das Hinzufügen unkorrelierter Bad-Plätze. Der Charakter der Näherung wird durch das Referenzsystem bestimmt. (a) Two-Site Dynamical Impurity Approximation. (b) Variational Cluster Approximation.

so ergibt sich als Näherung die einleitend erwähnte VCA. Alle Ein-Teilchen-Parameter \mathbf{t}' können als Variationsparameter behandelt werden.

Die Kombination von korrelierten Plätzen und Bad-Plätzen sowie die Wahl der Variationsparameter lassen große Freiheit bei der Wahl des Referenzsystems. In der Praxis limitierende Faktoren sind die Clustergröße (korrelierte Plätze und Bad-Plätze) sowie die Anzahl zu optimierender Parameter. Es lassen sich auch etablierte Clustertechniken als abgeleitete Näherungen innerhalb der SFT interpretieren. Entscheidend hierbei ist die Bezugnahme auf ein passendes Referenzsystem mit geeigneten Variationsparametern. Als Beispiele solcher Clustermethoden werden im Folgenden die Cluster Perturbation Theory (CPT) [30] sowie die Cellular Dynamical Mean-Field Theory (CDMFT) [31] diskutiert.

Cluster Perturbation Theory

Im Rahmen der CPT wird das ursprüngliche Gitter in identische Cluster (offene Randbedingungen) mit jeweils L_c Plätzen aufgeteilt, das Inter-Cluster-Hopping \mathbf{V} wird in Störungstheorie behandelt. In der ersten nichttrivialen Ordnung ergibt sich die Green-Funktion des Modells als

$$\mathbf{G}_{\text{CPT}}(\omega) = \frac{1}{\mathbf{G}_{\text{cl}}^{-1}(\omega) - \mathbf{V}} \quad (3.16)$$

mit der Cluster-Green-Funktion $\mathbf{G}_{\text{cl}}(\omega)$. Die Verbindung der CPT zur SFT zeigt der Vergleich von Gl. 3.16 mit Gl. 3.14. Als geeignetes Referenzsystem werden die gleichen Cluster wie in CPT gewählt. Mit Hilfe der Dyson-Gleichung 3.4 gilt für die Selbstenergie des Referenzsystems $\Sigma(\mathbf{t}') = \mathbf{G}_{\mathbf{t}',0}^{-1} - \mathbf{G}'^{-1}$. Eingesetzt in Gl. 3.14 folgt

$$\mathbf{G}(\omega) = \frac{1}{\mathbf{G}'^{-1}(\omega) - (\mathbf{t} - \mathbf{t}'_{\text{opt}})} \quad (3.17)$$

als alternative Darstellung der SFT-Green-Funktion. Werden die Ein-Teilchen-Parameter des Referenzsystems (d. h. des Clusters) auf den physikalischen Werten des ursprünglichen Gitters festgehalten, so ist die SFT-Green-Funktion identisch mit der CPT-Green-Funktion. Unter diesem Gesichtspunkt kann die CPT als ein Spezialfall der VCA interpretiert werden.

tiert werden. Die Ein-Teilchen-Parameter des Referenzsystems werden dann nicht variationell bestimmt, sondern durch das Inter-Cluster-Hopping fixiert ($\mathbf{t} - \mathbf{t}'_{\text{opt}} \stackrel{!}{=} \mathbf{V}$). Dieser Aspekt verdeutlicht zugleich einen entscheidenden Vorteil der VCA gegenüber der CPT, nämlich die Möglichkeit z. B. langreichweitige magnetische Ordnung durch entsprechende Variationsparameter (symmetriebrechende Weiss-Felder) zu berücksichtigen. Dies ist im Rahmen der CPT nicht möglich.

Cellular Dynamical Mean-Field Theory

Ausgangspunkt der CDMFT ist die Aufteilung des Gitters in identische Cluster, analog zur CPT. Die grundlegende Idee der CDMFT besteht nun darin, den Einfluss des umgebenden Gitters auf den Cluster durch ein kontinuierliches Bad (eine unendliche Anzahl an Bad-Plätzen) an jedem korrelierten Platz zu beschreiben [31]. Es wird angenommen, dass die Parameter für das Bad derart gefunden werden können, dass die Selbstkonsistenzgleichung

$$\left(\frac{1}{\mathbf{G}_{\mathbf{t},0}^{-1}(\omega) - \Sigma(\mathbf{t}', \omega)} \right)_{ij\sigma} = G'_{ij\sigma}(\omega) \quad (3.18)$$

gilt [32]. Die Indizes i und j beziehen sich auf die (korrelierten) Plätze innerhalb eines Clusters, d. h. sie schließen keine Bad-Plätze mit ein. Mit σ ist der Spinfreiheitsgrad bezeichnet.

Führt man die partiellen Ableitungen $\partial\Omega_{\mathbf{t}}[\Sigma(\mathbf{t}')]/\partial\mathbf{t}'$ in der Stationaritätsbedingung 3.12 explizit aus, so folgt daraus [32]

$$T \sum_n \sum_{ij\sigma} \left(\frac{1}{\mathbf{G}_{\mathbf{t},0}^{-1}(i\omega_n) - \Sigma(\mathbf{t}', i\omega_n)} - \mathbf{G}'(i\omega_n) \right)_{ji\sigma} \frac{\partial\Sigma_{ij\sigma}(\mathbf{t}', i\omega_n)}{\partial\mathbf{t}'} = 0. \quad (3.19)$$

Die Matrixelemente der Selbstenergie $\Sigma_{ij\sigma}$ sowie auch deren Ableitungen $\partial\Sigma_{ij\sigma}/\partial\mathbf{t}'$ können per Konstruktion des Referenzsystems nur von Null verschiedene Werte annehmen, sofern i und j zum selben Cluster gehören. Alle Ein-Teilchen-Parameter des Bads (On-Site-Energien der Bad-Plätze sowie Hybridisierung mit den korrelierten Plätzen) werden als Variationsparameter behandelt. Können demnach Bad-Parameter gefunden werden, die die Selbstkonsistenzgleichung 3.18 der CDMFT erfüllen, wird Gl. 3.19 ebenfalls trivial erfüllt und das Selbstenergiefunktional ist stationär an der CDMFT-Selbstenergie.

In praktischen CDMFT-Rechnungen wird das kontinuierliche Bad durch eine endliche Anzahl an Bad-Plätzen ersetzt. Durch diese Reduktion der Bad-Freiheitsgrade kann die Selbstkonsistenzbedingung allerdings nicht mehr exakt erfüllt werden.

3.1.2 Eingeschränkte Translationsinvarianz

Real-Space-Cluster-Näherungen brechen per Konstruktion die Translationsinvarianz des ursprünglichen Gitters. Identische Cluster vorausgesetzt, definiert die periodische Anordnung der Cluster ein Supergitter, so dass eine eingeschränkte Translationsinvarianz erhalten bleibt. Jeder Gitterplatz \mathbf{x} des ursprünglichen Gitters lässt sich als Summe

$$\mathbf{x} = \mathbf{R} + \mathbf{r} \quad (3.20)$$

aus einem Supergittervektor \mathbf{R} und einem Clustervektor \mathbf{r} darstellen (siehe Abb. 3.2). Eine Größe \mathbf{G} , die im Ortsraum definiert ist (mit den Matrixelementen $G_{ij} \equiv G_{\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j}$),

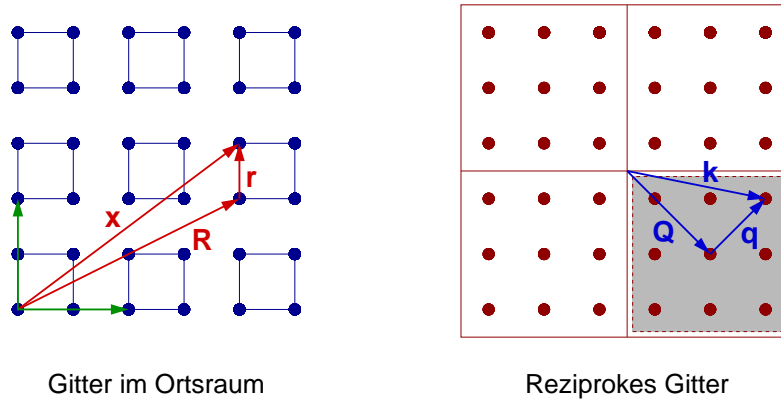


Abbildung 3.2: Die Abbildung illustriert die Definition des Supergitters durch entsprechende Basisvektoren (grün) und die Zerlegung des ursprünglichen Gitters in Supergitter- und Clustervektoren (rot). Die erste Brillouin-Zone des reziproken Gitters sowie des reziproken Supergitters (grau) sind ebenfalls dargestellt.

kann daher durch partielle Fourier-Transformation

$$G_{\mathbf{q},ab} = \frac{1}{N_c} \sum_{ij} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i} G_{\mathbf{R}_i+\mathbf{r}_a,\mathbf{R}_j+\mathbf{r}_b} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_j} \quad (3.21)$$

auf Blockdiagonalform gebracht werden. N_c bezeichnet die Anzahl der Cluster, die (diskreten) Vektoren \mathbf{q} sind aus der ersten Brillouin-Zone des reziproken Supergitters.

Die Formulierung der Translationsinvarianz gemäß Gl. 3.21 ist allerdings ungeeignet zur Darstellung physikalischer Größen wie z. B. der Spektralfunktion. Zur (näherungsweise) Wiederherstellung der uneingeschränkten Translationsinvarianz betrachten wir die volle Fourier-Transformation. Die Vektoren \mathbf{k} der ersten Brillouin-Zone des reziproken Gitters lassen sich eindeutig in einen Vektor \mathbf{q} der ersten Brillouin-Zone des reziproken Supergitters und einen weiteren Vektor \mathbf{Q} des reziproken Supergitters als

$$\mathbf{k} = \mathbf{Q} + \mathbf{q} \quad (3.22)$$

zerlegen (siehe Abb. 3.2). Es gilt mit $e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}} = 1$:

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} &= \frac{1}{N_c L_c} \sum_{ijab} e^{i(\mathbf{Q}+\mathbf{q})\cdot(\mathbf{R}_i+\mathbf{r}_a)} G_{\mathbf{R}_i+\mathbf{r}_a,\mathbf{R}_j+\mathbf{r}_b} e^{-i(\mathbf{Q}'+\mathbf{q}')\cdot(\mathbf{R}_j+\mathbf{r}_b)} \\ &= \frac{1}{L_c} \sum_{ab} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_a} G_{\mathbf{q},ab} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}_b}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Die volle Translationsinvarianz wird wiederhergestellt, indem die Nicht-Diagonalelemente $G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ vernachlässigt werden und man $G_{\mathbf{k}} := G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}$ per Definition festlegt.

Grundsätzlich enthalten die Green-Funktion und die Selbstenergie dieselbe Information, so dass exakte Resultate unabhängig davon sind, von welcher Größe die physikalischen Eigenschaften eines Modells abgeleitet werden. Die Wiederherstellung der Translationsinvarianz bei Verwendung von Clusterapproximationen lässt sich entweder auf die Green-Funktion oder auf die Selbstenergie anwenden, die jeweils komplementäre Größe wird durch die Dyson-Gleichung 3.4 festgelegt. Aufgrund der Matrixinversion in der Dyson-Gleichung

führen beide Varianten zu unterschiedlichen Ergebnissen. Erfahrungsgemäß lassen sich bessere Ergebnisse erzielen, wenn die Green-Funktion als Ausgangsgröße verwendet wird (siehe auch [31]).

3.1.3 Thermodynamische Konsistenz

Die Festlegung auf ein Referenzsystem sowie die Wahl der Variationsparameter berücksichtigt (nach Möglichkeit) die physikalischen Größen des Modells, die für die Rechnung von Interesse sind. Insbesondere für die Wahl der Variationsparameter ist in diesem Zusammenhang der Aspekt der thermodynamischen Konsistenz von Bedeutung. Thermodynamische Konsistenz bezeichnet den Sachverhalt, dass eine Größe $\langle \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} \rangle$ sowohl durch

$$\langle \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} \rangle = \frac{\partial \Omega}{\partial t_{ij\sigma}} \quad (3.24)$$

aus einer statischen thermodynamischen Größe als auch unter Benutzung des Spektraltheorems (Ein-Teilchen-Anregungen)

$$\langle \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{A_{ij\sigma}(\omega)}{1 + e^{\beta\omega}} \quad (3.25)$$

übereinstimmend berechnet werden kann [32]. Da sowohl das großkanonische Potenzial Ω als auch die Green-Funktion $\mathbf{G}(\omega)$ und damit die Spektralfunktion $\mathbf{A}(\omega)$ approximativ bestimmt werden (siehe Gl. 3.13 - 3.15), ist die Äquivalenz obiger Gleichungen nicht notwendig gegeben.

Thermodynamisch konsistente Approximationen setzen voraus, dass der $t_{ij\sigma}$ entsprechende Parameter $t'_{ij\sigma}$ im Referenzsystem als Variationsparameter behandelt wird. Für die Ableitung des Selbstenergiefunktional gilt nämlich

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Omega_{\mathbf{t}}[\boldsymbol{\Sigma}(\mathbf{t}'_{\text{opt}})]}{\partial t_{ij\sigma}} &= T \sum_n e^{i\omega_n 0^+} \left(\frac{1}{\mathbf{G}_{\mathbf{t},0}^{-1}(i\omega_n) - \boldsymbol{\Sigma}(\mathbf{t}'_{\text{opt}}, i\omega_n)} \right)_{ji\sigma} \\ &+ \left. \frac{\partial \Omega_{\mathbf{t}}[\boldsymbol{\Sigma}(\mathbf{t}')] }{\partial \mathbf{t}'} \right|_{\mathbf{t}'=\mathbf{t}'_{\text{opt}}} \cdot \frac{\partial \mathbf{t}'_{\text{opt}}}{\partial t_{ij\sigma}}, \end{aligned} \quad (3.26)$$

wobei der erste Term auf der rechten Seite aus der expliziten Abhängigkeit der freien Green-Funktion $\mathbf{G}_{\mathbf{t},0}$ von $t_{ij\sigma}$ folgt. Mit Hilfe des Cauchyschen Integralsatzes [33] lässt sich die Summe über die fermionischen Matsubara-Frequenzen in ein Integral über reelle Frequenzen transformieren und man erhält die Darstellung gemäß Gl. 3.25 (rechte Seite). Die implizite Abhängigkeit der optimalen Parameter \mathbf{t}'_{opt} von $t_{ij\sigma}$ wird mit dem zweiten Term berücksichtigt. Stationarität von $\Omega_{\mathbf{t}}[\boldsymbol{\Sigma}(\mathbf{t}'_{\text{opt}})]$ bedeutet, dass dieser Term keinen Beitrag liefert, solange $t'_{ij\sigma}$ als Variationsparameter optimiert wird. Nur unter dieser Bedingung sind die Gleichungen 3.24 und 3.25 äquivalent. Wird im Speziellen die Teilchenzahl

$$N = \sum_i \langle \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma} \rangle \quad (3.27)$$

betrachtet, so ist als zugehöriger Variationsparameter eine gitterplatzunabhängige On-Site-Energie, d. h. ein Shift im chemischen Potenzial des Clusters erforderlich, um die thermodynamische Konsistenz der Näherung sicherzustellen.

3.2 Numerische Auswertung

Wesentliche Schritte zur Auswertung des Selbstenergiefunktionals sind zum einen die (numerisch) exakte Lösung des Referenzsystems, zum anderen die Berechnung der Spur verbunden mit der Summation über die Matsubara-Frequenzen ($T \sum_n e^{i\omega_n 0^+} \text{tr}$).

Eigenwerte E_m und Eigenzustände $|m\rangle$ des Referenzsystems werden hier mittels exakter Diagonalisierung bestimmt (siehe Kap. 3.3). Damit sind sowohl das großkanonische Potenzial Ω' als auch die Green-Funktion $\mathbf{G}'(\omega)$ bekannt. Ausgehend von der Lehmann-Darstellung (Gl. 3.3) gelingt eine elegante Darstellung von $\mathbf{G}'(\omega)$ durch Einführen der Matrizen

$$\begin{aligned} Q_{\alpha k} &= \langle m | \hat{c}_\alpha | n \rangle \sqrt{\frac{e^{-\beta E_m} + e^{-\beta E_n}}{Z'}} \\ &\stackrel{T \rightarrow 0}{=} (\delta_{E_m, E_0} \langle m | \hat{c}_\alpha | n \rangle + \delta_{E_n, E_0} \langle m | \hat{c}_\alpha | n \rangle) / \sqrt{g} \end{aligned} \quad (3.28)$$

und

$$g_{kq}(\omega) = \frac{\delta_{kq}}{\omega - (E_n - E_m)} = \frac{\delta_{kq}}{\omega - \omega'_k}. \quad (3.29)$$

Die (großkanonische) Grundzustandsenergie des Referenzsystems wird mit E_0 bezeichnet, k ist als Multi-Index (m, n) zu verstehen. Mögliche Grundzustandsentartung ist durch den Entartungsgrad g berücksichtigt. Damit lässt sich die Green-Funktion des Referenzsystems kompakt als

$$\mathbf{G}'(\omega) = \mathbf{Q} \mathbf{g}(\omega) \mathbf{Q}^\dagger \quad (3.30)$$

schreiben.¹ Pole und Gewichte von $G_{\alpha\beta}(\omega)$ sind entsprechend durch ω'_k und $Q_{\alpha k} Q_{k\alpha}^\dagger$ gegeben. Man beachte, dass \mathbf{Q} keine quadratische Matrix ist. Es gilt $\mathbf{Q} \mathbf{Q}^\dagger = \mathbf{1}$, aber $\mathbf{Q}^\dagger \mathbf{Q} \neq \mathbf{1}$.

Die numerische Berechnung der Tr-Terme des Selbstenergiefunktionals gemäß Gl. 3.11 ist als Summe über die Polstellen von $\mathbf{G}(\omega)$ und $\mathbf{G}'(\omega)$ möglich. Alternativ lässt sich die Summation über die Matsubara-Frequenzen als direkte (numerische) Integration auf der imaginären Achse ausführen.

3.2.1 Q-Matrix-Methode

Wie die analytische Auswertung von Gl. 3.11 zeigt [34], kann die Funktion $\Omega_t(\mathbf{t}') \equiv \Omega_t[\boldsymbol{\Sigma}(\mathbf{t}')]]$ auf die Form

$$\begin{aligned} \Omega_t(\mathbf{t}') &= \Omega' + T \sum_k \ln(1 + e^{-\beta \omega'_k}) - T \sum_k \ln(1 + e^{-\beta \omega_k}) \\ &\stackrel{T \rightarrow 0}{=} E_0 - \sum_k \omega'_k \Theta(-\omega'_k) + \sum_k \omega_k \Theta(-\omega_k) \end{aligned} \quad (3.31)$$

gebracht werden. Während die Polstellen ω'_k der Green-Funktion \mathbf{G}' des Referenzsystems bekannt sind, müssen die Polstellen ω_k von \mathbf{G} noch berechnet werden.

¹Die Matrix $\mathbf{G}'(\omega)$ der Green-Funktion des Referenzsystems hat die gleiche Dimension $L \times L$ ($L = N_c L_c$ ist die Anzahl der Gitterplätze des Modellsystems) wie die Matrix $\mathbf{G}(\omega)$, schließt also nicht nur einen einzelnen Cluster ein. Da sämtliche Cluster äquivalent behandelt werden, ist eine Darstellung von $\mathbf{G}'(\omega)$ in Blockdiagonalform (mit identischen Blöcken) möglich. Für die praktische Auswertung ist daher die formale Unterscheidung zwischen der Green-Funktion eines einzelnen Clusters ($\mathbf{G}'_{cl}(\omega)$) bzw. des gesamten Referenzsystems ($\mathbf{G}'(\omega)$) unerheblich.

Unter Verwendung der \mathbf{Q} -Matrizen findet sich für die SFT-Green-Funktion gemäß Gl. 3.17 die Darstellung

$$\begin{aligned} \mathbf{G} &= \frac{1}{(\mathbf{Q}g\mathbf{Q}^\dagger)^{-1} - \mathbf{V}} = \mathbf{Q}g\mathbf{Q}^\dagger \sum_{n=0}^{\infty} (\mathbf{V}\mathbf{Q}g\mathbf{Q}^\dagger)^n \\ &= \mathbf{Q}g \sum_{n=0}^{\infty} (\mathbf{Q}^\dagger\mathbf{V}\mathbf{Q}g)^n \mathbf{Q}^\dagger = \mathbf{Q} \frac{1}{g^{-1} - \mathbf{Q}^\dagger\mathbf{V}\mathbf{Q}} \mathbf{Q}^\dagger \end{aligned} \quad (3.32)$$

mit der Abkürzung

$$\mathbf{V} = \mathbf{t} - \mathbf{t}'. \quad (3.33)$$

Da $g^{-1} = \omega - \mathbf{\Lambda}$ ($\Lambda_{kq} = \delta_{kq}\omega'_k$), sind die Polstellen von \mathbf{G} die Eigenwerte der Matrix

$$\mathbf{M} = \mathbf{\Lambda} + \mathbf{Q}^\dagger\mathbf{V}\mathbf{Q}. \quad (3.34)$$

Die Dimension von \mathbf{M} ist durch die Anzahl der Anregungsenergien (mit endlichem spektralen Gewicht) der Green-Funktion \mathbf{G}' festgelegt, d. h. durch die Dimension von g .

Aus der Hinzunahme von Bad-Plätzen im Referenzsystem folgt strenggenommen die Relation $\dim \mathbf{t}' > \dim \mathbf{t}$, so dass die Matrix \mathbf{V} nicht definiert ist. Aus diesem Grund ist es notwendig, Bad-Plätze formal auch im Modellsystem einzuführen, allerdings völlig entkoppelt von den korrelierten Plätzen. Dadurch werden die physikalischen Eigenschaften des Modellsystems nicht verändert, der Beitrag der Bad-Plätze zum großkanonischen Potenzial kann nachträglich eliminiert werden. Eine sinnvolle Wahl der On-Site-Energien dieser Bad-Plätze ist z. B. $\varepsilon_{\text{bath}} = 0$ oder $\varepsilon_{\text{bath}} = \mu$.

Da die Green-Funktion des Modellsystems gemäß Gl. 3.32 durch die \mathbf{Q} -Matrizen ausgedrückt werden kann, lassen sich auch Erwartungswerte, die über das Spektraltheorem Gl. 3.25 gegeben sind, mit Hilfe der \mathbf{Q} -Matrizen berechnen. Als Beispiel sei hier die Teilchendichte n angeführt. Für $T = 0$ gilt

$$n = \frac{1}{L} \sum_{i\sigma} \int_{-\infty}^0 d\omega A_{i\sigma}(\omega), \quad (3.35)$$

woraus mit $A_{i\sigma}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\mathbf{Q} \frac{1}{\omega + i0^+ - \mathbf{M}} \mathbf{Q}^\dagger \right]_{i\sigma}$ die einfache Beziehung

$$n = \frac{1}{L} \sum_{i\sigma} \sum_{\omega_k < 0} \left| \mathbf{Q}\mathbf{U}^\dagger \right|_{i\sigma k}^2 \quad (3.36)$$

folgt. Die unitäre Transformation \mathbf{U} diagonalisiert die Matrix \mathbf{M} , $\omega_k = (\mathbf{U}\mathbf{M}\mathbf{U}^\dagger)_{kk}$. Eine numerische Integration von Gl. 3.35 kann dadurch umgangen werden.

3.2.2 Numerische Integration

Mit Hilfe der Identität $\text{tr} \ln = \ln \det$ und der Rechenregeln für Determinanten kann $\Omega_{\mathbf{t}}(\mathbf{t}')$ (Gl. 3.11) alternativ durch

$$\begin{aligned} \Omega_{\mathbf{t}}(\mathbf{t}') &= \Omega' - T \sum_n e^{i\omega_n 0^+} \ln \det (\mathbf{1} - \mathbf{V}\mathbf{G}'(i\omega_n)) \\ &\stackrel{T \rightarrow 0}{=} \Omega' - \frac{1}{2\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega\eta} \ln \det (\mathbf{1} - \mathbf{V}\mathbf{G}'(i\omega)) \end{aligned} \quad (3.37)$$

berechnet werden. Man beachte die Äquivalenz

$$\begin{aligned} \det(\mathbf{1} - \mathbf{V}\mathbf{G}'(i\omega)) &= \det \mathbf{G}'^{-1}(i\omega) \det(\mathbf{G}'(i\omega) - \mathbf{G}'(i\omega)\mathbf{V}\mathbf{G}'(i\omega)) \\ &= \det(\mathbf{1} - \mathbf{G}'(i\omega)\mathbf{V}). \end{aligned} \quad (3.38)$$

Die numerische Integration erfolgt in zwei Schritten. Dazu wird das Integral I aufgeteilt in einen niederfrequenten Anteil $I_1(\omega_c)$ im Intervall $[-\omega_c, \omega_c]$ und einen hochfrequenten Anteil $I_2(\omega_c)$ innerhalb der Grenzen $(-\infty, -\omega_c]$ und $[\omega_c, \infty)$, also $I = I_1(\omega_c) + I_2(\omega_c)$. Die Cutoff-Frequenz ω_c ist geeignet zu wählen. Mit Hilfe der Eigenschaft $\mathbf{G}'(-i\omega) = [\mathbf{G}'(i\omega)]^\dagger$ kann der niederenergetische Anteil $I_1(\omega_c)$ weiter umgeformt werden:

$$\begin{aligned} I_1(\omega_c) &= -\frac{1}{2\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{-\omega_c}^{\omega_c} d\omega e^{i\omega\eta} \ln \det(\mathbf{1} - \mathbf{V}\mathbf{G}'(i\omega)) \\ &= -\frac{1}{2\pi} \int_0^{\omega_c} d\omega \left[\ln \det(\mathbf{1} - \mathbf{V}\mathbf{G}'(i\omega)) + \ln \det(\mathbf{1} - \mathbf{G}'(i\omega)\mathbf{V})^\dagger \right] \\ &= -\frac{1}{\pi} \int_0^{\omega_c} d\omega \ln |\det(\mathbf{1} - \mathbf{V}\mathbf{G}'(i\omega))|. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Wegen der endlichen Cutoff-Frequenz ω_c ist der Limes $\eta \rightarrow 0$ trivial. In dieser Form lässt sich der Wert von $I = I_1(\omega_c)$ mit Standardmethoden zur numerischen Integration (wie z. B. der Simpsonschen Formel oder Gaußscher Quadratur) berechnen.

Der noch fehlende Anteil $I_2(\omega_c)$ soll im Wesentlichen analytisch bestimmt werden. Dazu betrachten wir zunächst die Hochfrequenzentwicklung der Green-Funktion

$$\mathbf{G}'(i\omega) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mathbf{M}^{(n)}}{(i\omega)^{n+1}} \quad (3.40)$$

mit den Spektralmomenten $\mathbf{M}^{(n)}$. Weiterhin greifen wir auf die Potenzreihenentwicklung des natürlichen Logarithmus $\ln(1-x) = -x - x^2/2 + \mathcal{O}(x^3)$ zurück. Was folgt, ist die Darstellung

$$\ln(\mathbf{1} - \mathbf{V}\mathbf{G}'(i\omega)) = -\frac{\mathbf{V}\mathbf{M}^{(0)}}{i\omega} - \frac{\frac{1}{2}(\mathbf{V}\mathbf{M}^{(0)})^2 + \mathbf{V}\mathbf{M}^{(1)}}{(i\omega)^2} + \mathcal{O}((i\omega)^{-3}) \quad (3.41)$$

für hohe Frequenzen $i\omega$. Mit Hilfe von Gl. 3.41 kann das Integral $I_2(\omega_c)$ jetzt analytisch berechnet werden.

Fasst man die Integration über negative und positive Matsubara-Frequenzen wie bei $I_1(\omega_c)$ zusammen, so ergibt sich

$$I_2(\omega_c) = -\frac{1}{2\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{\omega_c}^{\infty} d\omega \left[e^{i\omega\eta} \text{tr} \ln(\mathbf{1} - \mathbf{V}\mathbf{G}'(i\omega)) + e^{-i\omega\eta} \text{tr} \ln(\mathbf{1} - \mathbf{V}\mathbf{G}'(-i\omega)) \right] \quad (3.42)$$

bei erneuter Anwendung der Identität $\text{tr} \ln = \ln \det$. Da die obere Integrationsgrenze nicht endlich ist, führt der Limes $\eta \rightarrow 0$ in Verbindung mit dem Konvergenz erzeugenden Faktor

$e^{i\omega\eta}$ auf ein nichttriviales Ergebnis. Durch Einsetzen von Gl. 3.41 in Gl. 3.42 folgt schließlich

$$\begin{aligned} I_2(\omega_c) &\approx \frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{\omega_c}^{\infty} d\omega \left[\frac{\sin(\omega\eta)}{\omega} \text{tr} \mathbf{V} - \frac{\cos(\omega\eta)}{\omega^2} \text{tr} \left(\frac{1}{2} \mathbf{V}^2 + \mathbf{V} \mathbf{M}^{(1)} \right) \right] \\ &= \frac{1}{2} \text{tr} \mathbf{V} - \frac{1}{\pi \omega_c} \text{tr} \left(\frac{1}{2} \mathbf{V}^2 + \mathbf{V} \mathbf{M}^{(1)} \right), \end{aligned} \quad (3.43)$$

wobei $\mathbf{M}^{(0)} = \mathbf{1}$ für das nullte Spektralmoment der Green-Funktion berücksichtigt wurde. Insgesamt gilt also für das Selbstenergiefunktional (bzw. die Funktion $\Omega_{\mathbf{t}}(\mathbf{t}')$):

$$\begin{aligned} \Omega_{\mathbf{t}}(\mathbf{t}') &= \Omega' - \frac{1}{\pi} \int_0^{\omega_c} d\omega \ln |\det(\mathbf{1} - \mathbf{V} \mathbf{G}'(i\omega))| \\ &\quad + \frac{1}{2} \text{tr} \mathbf{V} - \frac{1}{\pi \omega_c} \text{tr} \left(\frac{1}{2} \mathbf{V}^2 + \mathbf{V} \mathbf{M}^{(1)} \right) + \mathcal{O}(\omega_c^{-3}). \end{aligned} \quad (3.44)$$

Voraussetzung für die numerische Auswertung von Gl. 3.44 ist die Kenntnis von $\mathbf{M}^{(1)}$. Eine mögliche Variante zur Bestimmung des Spektralmoments $\mathbf{M}^{(1)}$ folgt aus der Darstellung der Green-Funktion

$$G'_{ij\sigma}(i\omega) = \sum_k \frac{Q_{i\sigma k} Q_{kj\sigma}^\dagger}{i\omega - \omega_k} = \frac{1}{i\omega} \sum_k \frac{Q_{i\sigma k} Q_{kj\sigma}^\dagger}{1 - \frac{\omega_k}{i\omega}} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_k Q_{i\sigma k} Q_{kj\sigma}^\dagger \frac{(\omega_k)^n}{(i\omega)^{n+1}} \quad (3.45)$$

mit den Gewichten $Q_{i\sigma k} Q_{kj\sigma}^\dagger$ und den Polstellen ω_k unter Verwendung der \mathbf{Q} -Matrizen. Der Vergleich mit Gl. 3.40 führt auf den Ausdruck

$$M_{ij\sigma}^{(1)} = \sum_k Q_{i\sigma k} \omega_k Q_{kj\sigma}^\dagger \quad (3.46)$$

für das erste Spektralmoment. Die Eigenschaft $\mathbf{M}^{(0)} = \mathbf{Q} \mathbf{Q}^\dagger = \mathbf{1}$ für das nullte Spektralmoment ist trivial erfüllt.

3.2.3 Laufzeitaspekte

Die Berechnung der Tr-Terme in Gl. 3.11 beansprucht einen deutlichen Anteil der Rechenzeit, bei kleinen Clustern dominiert sie die Laufzeit. Die praktische Auswertung berücksichtigt die eingeschränkte Translationsinvarianz durch die partielle Fourier-Transformation gemäß Gl. 3.21. Da das Referenzsystem aus entkoppelten Clustern aufgebaut ist, bleiben Größen des Referenzsystems wie die Green-Funktion \mathbf{G}' oder die Ein-Teilchen-Parameter \mathbf{t}' invariant unter dieser Transformation. Unabhängig davon, ob die Berechnung des Selbstenergiefunktionals mit Hilfe der \mathbf{Q} -Matrizen durchgeführt wird oder auf die numerische Integration zurückgreift, wird durch die partielle Fourier-Transformation nur die Matrix $\mathbf{V} = \mathbf{t} - \mathbf{t}'$ als einzige Größe transformiert ($\mathbf{V} \rightarrow \tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{q})$).

Daraus resultiert für die \mathbf{Q} -Matrix-Methode eine blockdiagonale Matrix $\mathbf{M} \rightarrow \tilde{\mathbf{M}}(\mathbf{q})$ (siehe Gl. 3.34), wodurch die praktische Bestimmung der Eigenwerte erst möglich ist.² Analog lässt sich auch die numerische Integration beschleunigen, indem $\det(\mathbf{1} - \mathbf{V} \mathbf{G}')$ in

²Der Aufwand exakter Diagonalisierung einer quadratischen Matrix der Dimension N ist $\mathcal{O}(N^3)$ für $N \rightarrow \infty$.

Gl. 3.44 als Produkt $\Pi_{\mathbf{q}} \det(\mathbf{1} - \tilde{\mathbf{V}}(\mathbf{q})\mathbf{G}'_{\text{cl}})$ (mit der Green-Funktion \mathbf{G}'_{cl} eines einzelnen Clusters) berechnet wird.

Der Unterschied im Rechenaufwand zur Auswertung der Tr-Terme mit Hilfe der \mathbf{Q} -Matrizen bzw. numerischer Integration vergrößert sich mit zunehmender Anzahl an Polstellen der Cluster-Green-Funktion. Eine quantitative Analyse beider Verfahren zeigt, dass eine numerische Integration³ durchaus um einen Faktor 100 schneller sein kann als die \mathbf{Q} -Matrix-Methode, abhängig vom betrachteten System [31]. Es ist jedoch auch zu berücksichtigen, dass mit zunehmender Clustergröße der Anteil der exakten Diagonalisierung zur Bestimmung des Grundzustands und des Anregungsspektrums an der Gesamtrechenzeit zunimmt. So ergibt sich für eine Auswertung mit \mathbf{Q} -Matrizen, dass dieser Anteil z. B. bei der Verwendung eines Cluster mit $L_c = 4$ Plätzen vernachlässigt werden darf, während bei Rechnungen mit größeren Clustern ($L_c = 8$ oder $L_c = 10$), abhängig von der Modellgröße und der Methode zur exakten Diagonalisierung (vergl. Kap. 3.3), die Bestimmung des Grundzustands und des Anregungsspektrums den überwiegenden Teil der Rechenzeit beansprucht.

Die numerische Integration erfordert sowohl die geeignete Wahl der Cutoff-Frequenz ω_c (siehe Gl. 3.44) als auch ein sinnvolles Konvergenzkriterium für die Integration selbst, um eine ausreichende Genauigkeit zu gewährleisten. Die Verwendung der \mathbf{Q} -Matrizen macht die Festlegung solcher zusätzlicher Parameter, die u. U. an die Änderung der Modellparameter angepasst werden müssen, unnötig. Da bei Clustern mit wenigen Plätzen die Laufzeit insgesamt unkritisch ist und bei größeren Clustern einige Hundert Anregungsenergien im Rahmen der \mathbf{Q} -Matrix-Methode tolerierbar sind, greifen wir bei unseren Rechnungen vorwiegend auf dieses Verfahren zurück.

3.2.4 Parameteroptimierung

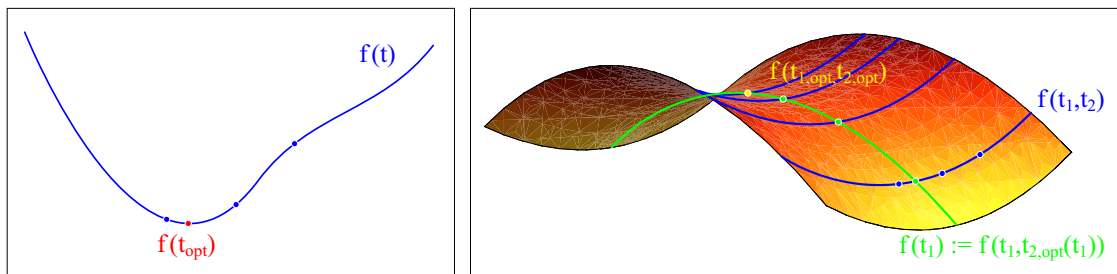


Abbildung 3.3: (links) Eindimensionale Optimierung durch iteratives Einschachteln des Minimums. (rechts) Mehrdimensionale Optimierung durch rekursive Anwendung eindimensionaler Verfahren.

Neben der numerischen Auswertung des Selbstenergiefunktional nach Gl. 3.31 oder 3.44 ist zur Bestimmung einer (approximierten) Lösung die Suche nach stationären Punkten des Selbstenergiefunktional (d. h. $\partial\Omega_{\mathbf{t}}(\mathbf{t}')/\partial\mathbf{t}' = 0$) erforderlich. Das Auffinden solcher optimalen Parameter \mathbf{t}'_{opt} wird dadurch erschwert, dass die mehrdimensionale Funktion $\Omega_{\mathbf{t}}(\mathbf{t}')$ (im Gegensatz zum Ritzschen Variationsprinzip) im Allgemeinen einen Sattelpunkt an der Stelle \mathbf{t}'_{opt} besitzt. Dadurch kann selbst bei eindimensionaler Optimierung die Lösung entweder durch ein Minimum oder ein Maximum gegeben sein.

³Die numerische Integration, die diesen Rechnungen zugrunde liegt, weicht im Detail von der hier beschriebenen Vorgehensweise ab.

Im einfachsten Fall eines einzigen Variationsparameters kann ein (lokales) Extremum durch iteratives Einschachteln gefunden werden. Die Konvergenz lässt sich gegebenenfalls verbessern, wenn in der Umgebung des Extremums ein parabolischer Verlauf der Funktion angenommen wird. Rekursives Anwenden der eindimensionalen Optimierung erlaubt die Verallgemeinerung auf einen mehrdimensionalen Parameterraum. Abb. 3.3 veranschaulicht das Prinzip anhand einer Optimierung in zwei Dimensionen. Die beiden Koordinaten seien t_1 bzw. t_2 , die zu optimierende Funktion $f(t_1, t_2)$. Für einen vorgegebenen Wert von t_1 wird zunächst ein Minimum in der Koordinatenrichtung t_2 bestimmt. Als Ergebnis dieser (eindimensionalen) Optimierung erhält man als Wertepaar den optimalen Parameterwert $t_{2,\text{opt}}(t_1)$ sowie den zugehörigen Funktionswert $f(t_1, t_{2,\text{opt}}(t_1))$. Die wiederholte Minimumsuche für unterschiedliche Werte von t_1 definiert auf diese Weise eine eindimensionale Funktion $f(t_1) := f(t_1, t_{2,\text{opt}}(t_1))$, deren Maximum analog bestimmt werden kann. Wird der Charakter des gesuchten Sattelpunkts (gemeint ist die Art des Extremums in den verschiedenen Parameterrichtungen) vorgegeben, so kann dieses Verfahren prinzipiell auf beliebig viele Variationsparameter angewendet werden.

Die rekursive eindimensionale Optimierung liefert gute Ergebnisse bei zweidimensionalem Parameterraum und ist ebenfalls nützlich bei drei Variationsparametern. Einige Sorgfalt ist geboten, wenn mehrere Extrema in einer Parameterrichtung dicht beieinander liegen. Gehen wir von zwei Minima in der Parameterrichtung t_2 aus, so mag die Bestimmung des optimalen Parameters $t_{2,\text{opt}}(t_1)$ einmal auf das „linke“, ein andermal auf das „rechte“ Minimum führen, abhängig vom Wert von t_1 . In diesem Fall ist eine Optimierung von $f(t_1) := f(t_1, t_{2,\text{opt}}(t_1))$ nicht mehr sinnvoll.

Ein weiteres Verfahren zur Optimierung, das sich vor allem bei drei oder mehr Variationsparametern bewährt hat, ist der Downhill-Simplex-Algorithmus [35]. Ausgehend von $n+1$ Startpunkten $\{\mathbf{t}'_1, \dots, \mathbf{t}'_{n+1}\}$ im n -dimensionalen Parameterraum wird ein sogenanntes Simplex (n -dimensionaler Körper mit $n+1$ Eckpunkten) definiert, das sich in Abhängigkeit der Funktionswerte an seinen Eckpunkten seinen Weg durch den Parameterraum bahnt. Dabei ändert das Simplex in jedem Iterationsschritt Form und/oder Größe. Schließt das Simplex ein (lokales) Minimum ein, so wird dessen Volumen durch Kontraktion solange verkleinert, bis das Minimum mit ausreichender Genauigkeit bestimmt ist. Der Weg des Simplex durch den Parameterraum wird durch den Gradienten der zu minimierenden Funktion bedingt. So besteht ein wesentlicher Schritt der Iteration darin, den Eckpunkt des Simplex \mathbf{t}'_{max} mit dem größten Funktionswert am Schwerpunkt der übrigen Eckpunkte ($\mathbf{t}'_{\text{c}} = (1/n) \sum_{i \neq i_{\text{t}'_{\text{max}}}} \mathbf{t}'_i$) zu spiegeln, was näherungsweise einer Bewegung in Richtung des stärksten Gefälles entspricht.

Da der Downhill-Simplex-Algorithmus per Konstruktion nur lokale Extrema im mehrdimensionalen Raum finden kann, wird nicht $\Omega_{\mathbf{t}}(\mathbf{t}')$ selbst, sondern das Betragsquadrat des Gradienten $|\nabla_{\mathbf{t}'} \Omega_{\mathbf{t}}(\mathbf{t}')|^2$ optimiert. Die Ableitungen werden numerisch berechnet. Weil der Betrag des Gradienten minimiert wird, spielt der Charakter des stationären Punktes (im Gegensatz zum rekursiven eindimensionalen Verfahren) für die Optimierung keine Rolle. Allerdings ist darauf zu achten, dass lokale Minima mit $|\nabla_{\mathbf{t}'} \Omega_{\mathbf{t}}(\mathbf{t}')|^2 \neq 0$, die u. a. aus Wendepunkten von $\Omega_{\mathbf{t}}(\mathbf{t}')$ in einzelnen Parameterrichtungen resultieren können, zu verwerfen sind.

3.3 Exakte Diagonalisierung

Die numerische Auswertung des Selbstenergiefunktionals Gl. 3.11 setzt die exakte Lösung des Referenzsystems, d. h. eines Clusters endlicher Größe, voraus. Durch Wahl einer geeigneten Basis $\{|\phi_n\rangle\}$ lässt sich der Hamilton-Operator in Matrixform ($H_{mn} = \langle\phi_m|\hat{H}|\phi_n\rangle$) darstellen und das Clusterproblem kann, wie bereits erwähnt, durch exakte Diagonalisierung gelöst werden. Wegen des exponentiellen Anwachsens des Hilbert-Raums mit der Clustergröße zeigen sich aber auch unmittelbar die Grenzen dieser Technik, was sowohl Laufzeit- als auch Speicheranforderungen betrifft. Bei Verwendung direkter Methoden zur vollen Diagonalisierung⁴ der Hamilton-Matrix ist die Auswertung des Selbstenergiefunktionals im Wesentlichen auf Cluster mit maximal vier bis sechs Plätzen beschränkt.

Um auch Cluster mit mehr Plätzen im Rahmen der SFT verwenden zu können, bedarf es geeigneter Methoden, die auftretenden Matrizen in ihrer Größe zu beschränken. Als geeignet hat sich dabei die Verwendung des Block-Lanczos-Algorithmus [36] herausgestellt, der im Folgenden dargestellt werden soll.

3.3.1 Invariante Unterräume

Ein wesentlicher Aspekt zum Verständnis des Lanczos-Verfahrens ist das Konzept invarianter Unterräume. Unter Ausnutzung von Symmetrien, wie z. B. der Gesamtteilchenzahl $N_\uparrow + N_\downarrow$ oder der Projektion des Gesamtspins S_{tot}^z , kann eine Basis derart gewählt werden, dass die daraus resultierende Hamilton-Matrix \mathbf{H} in Blockdiagonalform vorliegt. Dadurch wird die ursprüngliche $N \times N$ -Matrix ($N = \dim \mathbf{H}$) in kleinere Matrizen zerlegt (vergl. den Aspekt der partiellen Fourier-Transformation Kap. 3.2.3).

Eine solche Blockstruktur der Hamilton-Matrix macht die Idee invarianter Unterräume deutlich. Ein invarianter Unterraum $\mathcal{H}_U \subset \mathcal{H}$ ist dadurch definiert, dass

$$|\phi\rangle \in \mathcal{H}_U \quad \Rightarrow \quad \hat{H}|\phi\rangle \in \mathcal{H}_U \quad (3.47)$$

für beliebige Vektoren $|\phi\rangle$ aus \mathcal{H}_U gilt [37, 38]. Insbesondere bildet gemäß obiger Definition jeder Eigenvektor einen invarianten Unterraum von \mathcal{H} . Ist eine Orthonormalbasis $\{|\gamma_i\rangle\}$ eines M -dimensionalen invarianten Unterraums $\mathcal{H}_U \subset \mathcal{H}$ bekannt, so lässt sich der Hamilton-Operator in \mathcal{H}_U als $M \times M$ -Matrix \mathbf{H}_U darstellen. Dabei gilt

$$\mathbf{H}_U = \mathbf{G}^\dagger \mathbf{H} \mathbf{G} \quad (3.48)$$

mit der $N \times M$ -Matrix $\mathbf{G} = (\gamma_1, \dots, \gamma_M)$. Die Spaltenvektoren γ_i sind eine Darstellung der Basisvektoren $|\gamma_i\rangle$. Sind demnach nur die Eigenwerte und Eigenvektoren des invarianten Unterraums \mathcal{H}_U relevant, so reduziert sich das N -dimensionale Eigenwertproblem (volle Hamilton-Matrix \mathbf{H}) auf die Diagonalisierung einer (deutlich) kleineren $M \times M$ -Matrix \mathbf{H}_U . Gemäß Gleichung 3.48 gilt

$$\mathbf{H}_U \psi = \lambda \psi \quad \Rightarrow \quad \mathbf{H}(\mathbf{G}\psi) = \lambda(\mathbf{G}\psi). \quad (3.49)$$

Die grundlegende Idee des Lanczos-Algorithmus besteht nun darin, einen näherungsweise invarianten Unterraum in geeigneter Weise zu erzeugen.

⁴Im Zusammenhang mit Methoden der exakten Diagonalisierung wird die Bezeichnung *volle Diagonalisierung* im Folgenden für direkte Methoden verwendet, die ein vollständiges Orthonormalsystem einer gegebenen (orthogonalen/hermiteschen) Matrix bestimmen. Damit soll von Näherungsverfahren wie dem Lanczos-Algorithmus unterschieden werden.

Der Unterraum, auf dem der Lanczos-Algorithmus aufbaut, ist der sogenannte Krylov-Raum \mathcal{K}_M , definiert durch [37, 38]

$$\mathcal{K}_M = \text{span} \left\{ |\phi_0\rangle, \hat{H}|\phi_0\rangle, \hat{H}^2|\phi_0\rangle, \dots, \hat{H}^{M-1}|\phi_0\rangle \right\}, \quad M < N \quad (3.50)$$

mit einem zufällig gewählten Startvektor $|\phi_0\rangle$. Dass der Krylov-Raum die Eigenschaften eines näherungsweise invarianten Unterraums von \mathcal{H} erfüllt, lässt sich anhand der Definitionsgleichung 3.47 überprüfen. Dazu wird der Hamilton-Operator auf die Elemente von \mathcal{K}_M angewendet:

$$\left\{ \hat{H}|\phi_0\rangle, \hat{H}^2|\phi_0\rangle, \dots, \hat{H}^{M-1}|\phi_0\rangle, \hat{H}^M|\phi_0\rangle \right\} \quad (3.51)$$

Zusätzlich ist das Konvergenzverhalten der Krylov-Vektoren für große M zu berücksichtigen [37]. Aus

$$\begin{aligned} \hat{H}^{M-1}|\phi_0\rangle &= \sum_{k=0}^N c_k \varepsilon_k^{M-1} |\psi_k\rangle \\ &= c_0 \varepsilon_0^{M-1} \left(|\psi_0\rangle + \sum_{k=1}^N \frac{c_k}{c_0} \left(\frac{\varepsilon_k}{\varepsilon_0} \right)^{M-1} |\psi_k\rangle \right), \\ \hat{H}|\psi_k\rangle &= \varepsilon_k |\psi_k\rangle \end{aligned} \quad (3.52)$$

folgt, dass die Krylov-Vektoren $\hat{H}^{M-1}|\phi_0\rangle$ gegen den Grundzustand $|\psi_0\rangle$ konvergieren, sofern $|\varepsilon_k| < |\varepsilon_0|$ für $k > 0$ angenommen werden darf. Daraus lässt sich weiter schließen, dass $\hat{H}^M|\phi_0\rangle$ annähernd proportional zu $\hat{H}^{M-1}|\phi_0\rangle$ ist und \mathcal{K}_M einen näherungsweise invarianten Unterraum von \mathcal{H} bildet.

3.3.2 (Block-)Lanczos

Die Idee des Lanczos-Algorithmus besteht darin, durch Iteration eine Orthonormalbasis des Krylov-Raums zu erzeugen. Der Startvektor $|\phi_0\rangle$ wird dabei in Abhängigkeit des betrachteten Problems geeignet gewählt. Soll z. B. der Grundzustand berechnet werden, so muss der Startvektor $|\phi_0\rangle$ einen endlichen Überlapp mit dem tatsächlichen Grundzustand $|\psi_0\rangle$ haben. Dies kann im Allgemeinen dadurch erfüllt werden, dass der Startvektor durch zufällige Wahl der Koeffizienten bzgl. der verwendeten Basis erzeugt wird [39]. Sind Symmetrien des Grundzustands bekannt, so können diese an dieser Stelle bereits berücksichtigt werden.

Das Erzeugen der Krylov-Vektoren mit anschließender Orthonormierung führt auf folgende Rekursionsformel [37, 39]:

$$\begin{aligned} |\tilde{\phi}_{n+1}\rangle &= \hat{H}|\phi_n\rangle - \alpha_n |\phi_n\rangle - \beta_n |\phi_{n-1}\rangle \\ \alpha_n &= \langle \phi_n | \hat{H} | \phi_n \rangle \\ \beta_n &= \langle \phi_{n-1} | \hat{H} | \phi_n \rangle = \| \tilde{\phi}_n \| \\ |\phi_{n+1}\rangle &= \frac{|\tilde{\phi}_{n+1}\rangle}{\| \tilde{\phi}_{n+1} \|}. \end{aligned} \quad (3.53)$$

Die resultierende Matrixdarstellung \mathbf{H}_U in der Lanczos-Basis hat Tridiagonalform. Nach

M Iterationen ergibt sich [37, 39]:

$$\mathbf{H}_U = \begin{pmatrix} \alpha_0 & \beta_1 & & & \mathbf{0} \\ \beta_1 & \alpha_1 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \alpha_{M-2} & \beta_{M-1} \\ \mathbf{0} & & & \beta_{M-1} & \alpha_{M-1} \end{pmatrix}. \quad (3.54)$$

Im Unterschied zum Standard-Lanczos-Algorithmus werden beim Block-Lanczos-Verfahren [36] anstelle eines einzelnen Startvektors ($p = 1$) mehrere ($p > 1$) Startvektoren verwendet. Dadurch wird der Block-Krylov-Raum

$$\{|\phi_0^1\rangle, \dots, |\phi_0^p\rangle, \hat{H}|\phi_0^1\rangle, \dots, \hat{H}|\phi_0^p\rangle, \dots, \hat{H}^{m-1}|\phi_0^1\rangle, \dots, \hat{H}^{m-1}|\phi_0^p\rangle, \dots\} \quad (3.55)$$

festgelegt. Daraus wird iterativ, vergleichbar zum Standard-Algorithmus, durch Erzeugen der Krylov-Vektoren und anschließendes Orthonormieren eine Orthonormalbasis bestimmt. Ein neuer Aspekt kommt durch die Behandlung linear abhängiger Krylov-Vektoren hinzu. Für den Fall $p = 1$ bedeutet das Auftreten eines linear abhängigen Krylov-Vektors nach $M + 1$ Iterationen, dass \mathcal{K}_M ein invarianter Unterraum von \mathcal{H} ist und die vorangegangenen M Lanczos-Vektoren ein vollständiges Orthonormalsystem dieses Unterraums bilden. Aus der Rekursion 3.53 folgt dann $|\tilde{\phi}_{M+1}\rangle = 0$.

Beim Block-Lanczos-Verfahren ($p > 1$) dagegen bedeutet das Auftreten eines ersten linear abhängigen Krylov-Vektors nicht, dass bereits ein invarianter Unterraum von \mathcal{H} erzeugt wurde. Vielmehr enthält dieser linear abhängige Vektor $\hat{H}^l|\phi_0^m\rangle$ sowie alle Vielfachen $\hat{H}^n|\phi_0^m\rangle$, $n > l$, keine zusätzliche Information. Diese Vektoren sind daher aus der Krylov-Sequenz zu entfernen. Das Auffinden und Entfernen der linear abhängigen Vektoren wird als exakte Deflation⁵ bezeichnet. Nach p solcher exakter Deflationen, analog zum Fall $p = 1$, spannen die Lanczos-Vektoren einen invarianten Unterraum von \mathcal{H} auf.

Der Block-Lanczos-Algorithmus ist derart aufgebaut, dass nach M Iterationen sowohl die orthonormalen Lanczos-Vektoren $\{|\phi_1\rangle, \dots, |\phi_M\rangle\}$ als auch zusätzlich die Vektoren $\{|\tilde{\phi}_{M+1}\rangle, \dots, |\tilde{\phi}_{M+p_c}\rangle\}$ erzeugt wurden. Dabei ist p_c gegeben durch die Anzahl der Startvektoren p abzüglich der Anzahl der bereits aufgetretenen Deflationen. Aus den Vektoren $\{|\tilde{\phi}_{M+1}\rangle, \dots, |\tilde{\phi}_{M+p_c}\rangle\}$ können die folgenden p_c Lanczos-Vektoren gebildet werden, je nach Auftreten weiterer Deflationen.

Die Matrixdarstellung \mathbf{H}_U in der Block-Krylov-Basis ist im Wesentlichen eine Bandmatrix (*) mit der Bandbreite $2p_c + 1$. Da numerische Rechnungen endliche Genauigkeit bedingen, dient als Deflationskriterium $\|\tilde{\phi}_{M+1}\| \leq \varepsilon$ mit einem geeignet gewählten $\varepsilon > 0$ anstelle von $\varepsilon = 0$ bei exakter Deflation. Dadurch entstehen zusätzliche von Null verschiedene Einträge (×) in der Matrix. Methoden zur vollen Diagonalisierung, die die Bandstruktur einer Matrix effizient ausnutzen, sind dadurch nicht mehr anwendbar. Mit $p = 5$ Startvektoren, $M = 15$ Iterationen und angenommenen Deflationen nach 8, 11 und 13 Schritten

⁵Die Unterscheidung zwischen exakt linear abhängigen Vektoren und nahezu linear abhängigen Vektoren ist bei numerischen Rechnungen nicht möglich. Das Deflationskriterium muss daher angepasst werden und anstelle der Bezeichnung *exakte Deflation* wird in diesem Zusammenhang allgemein von *Deflation* gesprochen (siehe unten).

3.3.4 Implementierung des Lanczos-Algorithmus

Im Zusammenhang mit exakter Diagonalisierung kann die Ausnutzung von Symmetrien des Hamiltonians die Rechenzeit deutlich reduzieren, da nur die Dimension des betrachteten Unterraums relevant ist. Üblicherweise ist damit aber auch eine höhere Komplexität bei der Codierung der Basiszustände verbunden. Als Kompromiss lassen sich die Teilchenzahl $N_\uparrow + N_\downarrow$ sowie die Projektion des Gesamtspins $S_{\text{tot}}^z = N_\uparrow - N_\downarrow$ als Erhaltungsgrößen berücksichtigen. Weitere Erhaltungsgrößen, wie z. B. Inversionssymmetrie, gehen nicht in die Konstruktion der Hamilton-Matrix mit ein.

Nach Konstruktion der Basiszustände $|\phi_m\rangle$ wird die Matrixdarstellung des Hamilton-Operators ($H_{mn} = \langle \phi_m | \hat{H} | \phi_n \rangle$) berechnet. Da die Hamilton-Matrix erfahrungsgemäß viele Elemente $H_{mn} = 0$ enthält, bietet es sich an, nur die Einträge $H_{mn} \neq 0$ (sowie die zugehörigen Indizes (m, n)) als Sparse-Matrix zu speichern. Dadurch reduzieren sich sowohl der Speicherbedarf als auch die Laufzeit des Lanczos-Algorithmus, da die Matrix-Vektor-Multiplikationen $\mathbf{H}\phi$ den überwiegenden Anteil des Rechenaufwands ausmachen. Eine optionale Reorthonormierung der Krylov-Vektoren wird mit Hilfe des Gram-Schmidtschen Orthogonalisierungsverfahren [33] durchgeführt.

Kapitel 4

Dotierung des Mott-Isolators: Variational Cluster Approach

Der Metall-Isolator-Übergang im zweidimensionalen Hubbard-Modell ist das zentrale Thema dieses Kapitels. Dabei beschäftigen wir uns vorwiegend mit der Fragestellung, wie der Mott-Isolator durch Dotierung in die metallische Phase übergeht. Der Einfluss langreichweitiger magnetischer Ordnung sowie die Ordnung des Phasenübergangs sind dabei von besonderem Interesse. Ebenso soll die Abhängigkeit von den Modellparametern t' bzw. U (siehe Gl. 2.2, $t = 1$) untersucht werden. Sämtliche Rechnungen werden für Temperatur $T = 0$ ausgeführt.

Im Rahmen von Quanten-Cluster-Methoden beinhaltet bereits der 2×2 -Cluster ($L_c = 4$, siehe Abb. 4.1) den wesentlichen Schritt zur Berücksichtigung kurzreichweitiger Korrelationsphysik im zweidimensionalen Hubbard-Modell jenseits dynamischer Mean-Field-Betrachtungen. Es liegt daher nahe, als Einstieg in die VCA-Rechnungen zum Mott-Übergang zunächst den ($L_c=4$)-Cluster zu verwenden. Der vergleichsweise geringe numerische Aufwand ermöglicht sowohl die Untersuchung des Hubbard-Modells in einem großen Parameterbereich (t' , U , μ) als auch die gleichzeitige Optimierung mehrerer Variationsparameter. Aufbauend auf den so gewonnenen Resultaten lässt sich der Mott-Übergang in aufwändigeren Rechnungen mit größeren Clustern weiter untersuchen. Dabei kann auch der Einfluss von Clustergröße und Clustergeometrie berücksichtigt werden.

Das Referenzsystem wird durch $\hat{H}' = \hat{H}'_{\text{fix}} + \hat{H}'_{\text{var}}$ beschrieben, so dass die gewählten Variationsparameter nur in \hat{H}'_{var} auftauchen. Wir verwenden

$$\begin{aligned}\hat{H}'_{\text{fix}} &= -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} - t' \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle \sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \\ \hat{H}'_{\text{var}} &= \varepsilon \sum_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma} + h \sum_i e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_i} (\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow})\end{aligned}\quad (4.1)$$

mit dem Vektor $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. Die On-Site-Energie ε als Variationsparameter garantiert dabei die thermodynamische Konsistenz in Bezug auf die Teilchendichte n (siehe Kap. 3.1.3). Der Variationsparameter h koppelt an ein antiferromagnetisches (Weiss-)Feld und erlaubt damit, im Rahmen unserer Cluster-Mean-Field-Rechnungen, die Betrachtung langreichweitiger antiferromagnetischer Ordnung. Die Werte der Hopping-Parameter t und t' sind in diesem Fall in Referenz- und Modellsystem identisch. Das Gleiche gilt (obligatorisch) für die übrigen Modellparameter U , T und μ .

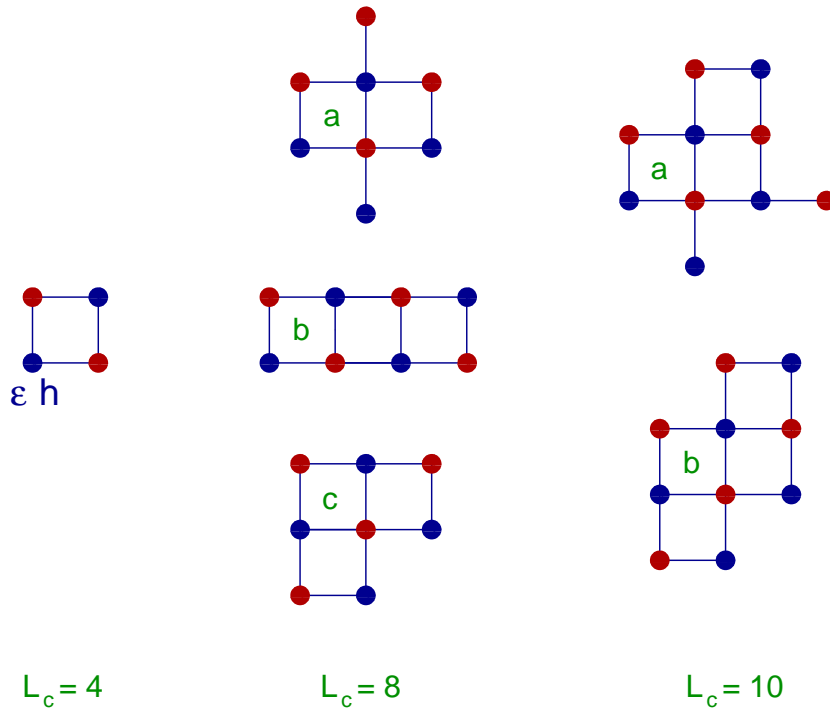


Abbildung 4.1: Referenzsysteme für das zweidimensionale Gitter. Betrachtet werden Cluster mit gerader Anzahl an Gitterplätzen, um antiferromagnetische Ordnung (Variationsparameter h) zu berücksichtigen. Eine thermodynamisch konsistente Beschreibung der Teilchendichte wird durch Optimierung der On-Site-Energie ε garantiert.

4.1 Teilchen-Loch-Symmetrie

Da der Mott-Isolator den Ausgangspunkt unserer Rechnungen bildet, ist es sinnvoll, zunächst einige Eigenschaften des Mott-Isolators selbst zu untersuchen, bevor das dotierte System betrachtet wird. Dazu berechnen wir den Grundzustand des Hubbard-Modells am Teilchen-Loch-symmetrischen Punkt ($t' = 0$, $\mu = U/2$) als Funktion von U . Der Variationsparameter ε ergibt sich bereits aus Symmetrieüberlegungen zu $\varepsilon = 0$, so dass nur das antiferromagnetische Feld h zu optimieren ist.

Die Resultate der VCA-Rechnungen sind in Abb. 4.2 dargestellt. Für $U = 8$ wird die Stationaritätsbedingung gemäß Gl. 3.12 am Maximum bei $h = 0$ (Ω_{PM} , Paramagnet) bzw. an den beiden Minima $h \approx \pm 0.2$ (Ω_{AF} , Antiferromagnet) der Funktion $\Omega_t(h)$ erfüllt (Abb. 4.2, links). Der stationäre Punkt mit der niedrigsten Energie (kleinster Wert des großkanonischen Potentials Ω) charakterisiert die stabile Lösung, der Grundzustand zeigt somit langreichweitige antiferromagnetische Ordnung. Der Gewinn an Bindungsenergie pro Platz durch Verwendung des antiferromagnetischen Weiss-Felds ergibt sich als $\Delta\Omega = \Omega_{\text{PM}} - \Omega_{\text{AF}} \approx 0.048$ (für $U = 8$). Das Aufbrechen antiferromagnetischer Kopplungen *zwischen* den einzelnen Clustern kann offenbar mit Hilfe des Weiss-Felds (teilweise) kompensiert werden, *innerhalb* der Clustergrenzen wird die magnetische Wechselwirkung bereits exakt berücksichtigt [41].

Wie Abb. 4.2 (Mitte) zu entnehmen ist, gilt für beliebige Wechselwirkung $\Delta\Omega > 0$, d. h. der Grundzustand des zweidimensionalen Hubbard-Modells ist für alle $U > 0$ ein Antiferromagnet. Dieses Ergebnis ist in Übereinstimmung mit den in Kap. 2.3 vorgestellten

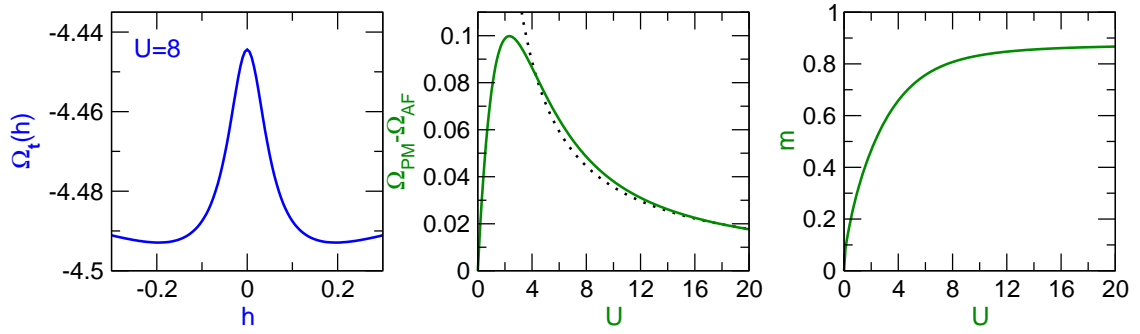


Abbildung 4.2: Antiferromagnetischer Grundzustand des 2D-Hubbard-Modells für Teilchen-Loch-Symmetrie ($t' = 0$, $\mu = U/2$). VCA-Rechnung mit $L_c = 4$ und $N_{\text{cl}} = 20 \times 20$. Dargestellt ist die Abhängigkeit des Selbstenergiefunktionals vom Variationsparameter h für $U = 8$ (links) sowie die Energiedifferenz $\Delta\Omega$ (siehe Text) zwischen paramagnetischer und antiferromagnetischer Lösung (Mitte) und der antiferromagnetische Ordnungsparameter m als Funktion der Wechselwirkungsstärke (rechts). Die gestrichelte Linie zeigt das $1/U$ -Verhalten für große Wechselwirkung.

ten Betrachtungen. Im Bereich großer Wechselwirkung wird das Hubbard-Modell auf das Heisenberg-Modell abgebildet und für die antiferromagnetische Kopplung gilt $J \sim 1/U$. Unter der Annahme, dass der Energieunterschied zwischen Paramagnet und Antiferromagnet im Wesentlichen durch die magnetische Kopplung bedingt wird, erwartet man folglich $\Omega_{\text{PM}} - \Omega_{\text{AF}} \sim 1/U$. Ein entsprechender Vergleich ist in Abb. 4.2 (Mitte) durch die gepunktete Kurve gegeben und zeigt eine gute Übereinstimmung der Daten mit dem erwarteten Verlauf.

Im Grenzfall $U \rightarrow 0$ wird die relevante Energieskala dagegen durch die Bandlücke Δ (Gl. 2.17) bestimmt, so dass ein exponentieller Verlauf der Energiedifferenz plausibel erscheint. Auf dieses Verhalten kann aus Abb. 4.2 (Mitte) nicht geschlossen werden. Es ist dabei zu beachten, dass die Hartree-Fock-Rechnung zur Bandlücke von $U \ll t$ ausgeht [17]. Dieser U -Bereich ist in Abb. 4.2 nicht gut sichtbar. Allerdings zeigt auch eine explizite Berechnung der Bandlücke für kleine Werte von U kein exponentielles Verhalten.

Im Rahmen der VCA gilt $\Sigma(\omega) \equiv 0$ im wechselwirkungsfreien System, d. h. unsere VCA-Rechnungen reproduzieren das exakte Ergebnis im Limes $U \rightarrow 0$. Die Abweichungen vom erwarteten Verlauf der Bandlücke sind daher an anderer Stelle zu suchen. Die Perfect-Nesting-Bedingung Gl. 2.16, die zur Berechnung von Δ (Gl. 2.17) vorausgesetzt wird, kann nur im Idealfall unendlicher Systemgröße $L \rightarrow \infty$ exakt erfüllt werden. Desweiteren führt die Aufteilung des Referenzsystems in entkoppelte Cluster zu einer Verletzung der Translationssymmetrie und ein wohldefinierter \mathbf{k} -Raum existiert nicht mehr. Der erhebliche Einfluss der Systemgröße auf den antiferromagnetischen Ordnungsparameter geht aus einer früheren (Mean-Field-)Untersuchung des Hubbard-Modells in $D = 3$ klar hervor. Unsere Rechnungen mit Hilfe der Two-Site Dynamical Impurity Approximation zeigen eine deutliche Abhängigkeit der Lösung von der Systemgröße (siehe [42], Abb. 4.14).

Der antiferromagnetische Ordnungsparameter $m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$ wird über die Spektralfunktion (Gl. 3.15) gemäß

$$m = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L e^{i\mathbf{Q}r_i} \int_{-\infty}^0 d\omega (A_{ii\uparrow}(\omega) - A_{ii\downarrow}(\omega)) \quad (4.2)$$

berechnet (mit $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$). Die Ergebnisse sind Abb. 4.2 (rechts) zu entnehmen. Für die praktische Auswertung ist es ausreichend, über nichtäquivalente Plätze zu summieren. Die Optimierung des Weiss-Felds h stellt die thermodynamische Konsistenz bzgl. des antiferromagnetischen Ordnungsparameters m sicher (so wie die Optimierung der On-Site-Energie ε die thermodynamische Konsistenz bzgl. der Teilchendichte n garantiert). Die alternative Berechnung des Ordnungsparameters als

$$m = \frac{1}{L} \left. \frac{\partial \Omega}{\partial h_{\text{AF}}} \right|_{h_{\text{AF}}=0} \quad (4.3)$$

ist dadurch äquivalent zu Gl. 4.2. Das *physikalische* Feld h_{AF} wird (analog zum Weiss-Feld h im Referenzsystem \hat{H}') durch einen Anteil

$$\hat{H}_{\text{AF}} = h_{\text{AF}} \sum_i e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_i} (\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}) \quad (4.4)$$

im Hamilton-Operator \hat{H} definiert. Die Extrapolation unserer Daten $m(1/U)$ auf $1/U = 0$ ergibt $m \approx 0.88$. Damit gelingt bereits mit Hilfe des einfachen ($L_c=4$)-Clusters eine entscheidende Verbesserung gegenüber dem DMFT-Resultat $m = 1$, wenn auch eine deutliche Abweichung vom exakten Wert $m \approx 0.61$ [25] bleibt. Da die Größe des Ordnungsparameters wesentlich durch langreichweitige Spin-Anregungen beeinflusst wird (langreichweitige antiferromagnetische Ordnung in zwei Dimensionen wird durch Spinwellen mit Wellenvektor $\mathbf{q} \rightarrow 0$ für beliebige Temperaturen $T > 0$ zerstört), kann der verbleibende Mean-Field-Charakter der VCA auf einer Längenskala jenseits der Cluster Grenzen als Grund für diese Überschätzung der Magnetisierung gesehen werden [41].¹

4.2 Dotierung des Mott-(Heisenberg-)Isolators

Unser eigentliches Interesse gilt nicht dem Mott-Isolator selbst, sondern der metallischen Phase in der Nähe des Mott-Isolators bei Dotierung des Systems. Die Randbedingung $\varepsilon = 0$ für Teilchen-Loch-Symmetrie ist im dotierten System nicht mehr erfüllt, d. h. die Variationsparameter ε und h sind jetzt unabhängig voneinander zu optimieren. Als äußerst zuverlässiges Verfahren zur Bestimmung der optimalen Parameterwerte ε_{opt} und h_{opt} hat sich hier die rekursive eindimensionale Optimierung (Kap. 3.2.4) herausgestellt.

4.2.1 Charakterisierung der Phasenübergänge

Die Ergebnisse für $U = 8$, $t' = 0$ sind in Abb. 4.3 dargestellt. Zu sehen ist der Verlauf der optimalen Variationsparameter ε und h als Funktion des chemischen Potentials μ (Abb. 4.3, a und b) sowie das großkanonische Potenzial $\Omega - \Omega_{\text{PM}}$ (Abb. 4.3, c) und der antiferromagnetische Ordnungsparameter m (Abb. 4.3, d). Im Isolator bleiben die optimalen Werte der Variationsparameter konstant,² das gilt generell sowohl im Paramagneten als auch im

¹Lokale Größen wie der antiferromagnetische Ordnungsparameter $m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$ hängen nur äußerst schwach von der Clustergröße ab [40] (siehe Kap. 6.1.1). Der Einfluss von Spinwellen mit $\mathbf{q} \rightarrow 0$ kann dagegen durch Cluster dieser Größenordnung nicht beschrieben werden.

²Da sich der Grundzustand innerhalb der Bandlücke nicht ändert, hängt die VCA-Green-Funktion im Gap in der Form $\mathbf{G}(\omega + \mu)$ vom chemischen Potenzial μ ab (siehe Lehmann-Darstellung Gl. 3.3). Mit Hilfe der Dyson-Gleichung 3.4 folgt die gleiche Abhängigkeit $\Sigma(\omega + \mu)$ für die Selbstenergie. Eine eigene Abhängigkeit der optimalen Variationsparameter t'_{opt} (durch welche die Selbstenergie definiert wird) vom chemischen Potenzial ist damit innerhalb der Bandlücke auszuschließen.

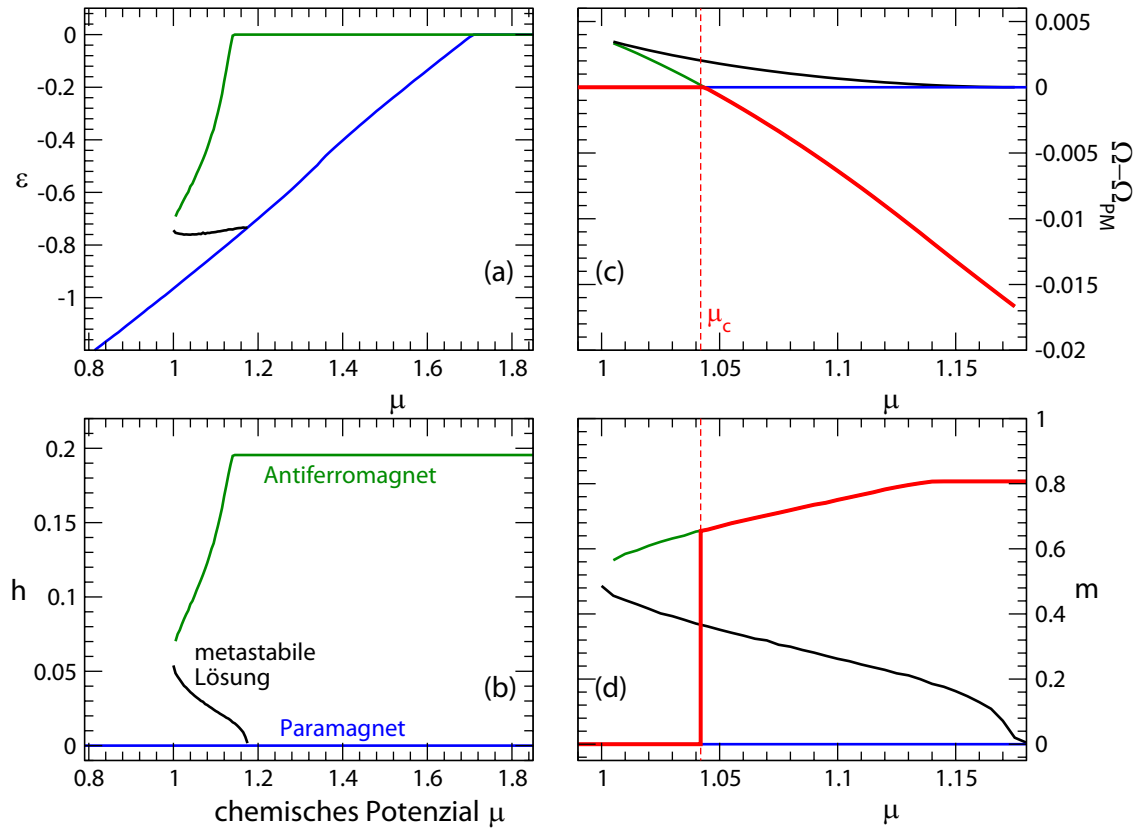


Abbildung 4.3: Abhängigkeit der optimalen Variationsparameter ε und h vom chemischen Potenzial μ für $U = 8$ ($t' = 0$). Das großkanonische Potenzial Ω sowie der antiferromagnetische Ordnungsparameter m sind ebenfalls dargestellt. Es treten mehrere Lösungen auf, die rote Linie kennzeichnet jeweils den Verlauf der energetisch stabilen Phase ($L_c = 4$, $N_{cl} = 100 \times 100$).

Antiferromagneten (die zugehörige Teilchendichte n kann Abb. 4.5 entnommen werden). Mit zunehmender Lochdotierung nimmt der optimale Wert der On-Site-Energie ε immer weiter ab. Die Differenz $\mu - \varepsilon$ fungiert dabei als ein effektives chemisches Potenzial im Cluster. Es zeigt sich, dass der Variationsparameter ε die Änderung des physikalischen Parameters μ weitgehend kompensiert, so dass im Cluster weiterhin $n' = 1$ gilt, abweichend von der Füllung des Modellsystems $n < 1$.

Wie unsere Ergebnisse zeigen, ist die Bandlücke Δ im Paramagneten kleiner als im Antiferromagneten. Dies kann in einem einfachen physikalischen Bild verstanden werden. Wir kommen auf diesen Punkt weiter unten zurück. Mit abnehmendem chemischen Potenzial wird folglich zunächst der Paramagnet dotiert ($\mu_{PM} = 1.70$), mit Beginn der Dotierung gilt $\varepsilon \neq 0$. Erst bei einem kleineren Wert $\mu_{AF} = 1.41$ geht auch der Mott-Heisenberg-Isolator³ in die metallische Phase über (Abb. 4.3, a; siehe auch Abb. 4.5).

Die stabile Phase ist durch den kleineren Wert des großkanonischen Potenzials der beiden Lösungen bestimmt. Ausgehend von Halbfüllung beobachtet man demgemäß zuerst einen kontinuierlichen Phasenübergang vom antiferromagnetischen Mott-Heisenberg-

³Die Bezeichnung Mott-Heisenberg-Isolator wird für einen Mott-Isolator mit langreichweitiger antiferromagnetischer Ordnung verwendet, während der paramagnetische Mott-Isolator als Mott-Hubbard-Isolator bezeichnet wird [17].

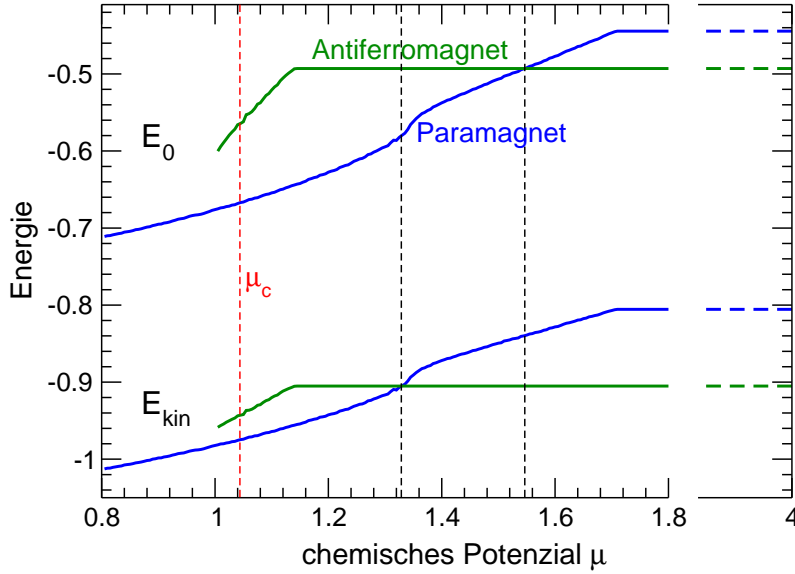


Abbildung 4.4: Grundzustandsenergie E_0 und kinetische Energie E_{kin} (siehe Gl. 4.5) der paramagnetischen und antiferromagnetischen Phase aus Abb. 4.3. Die farbliche Kennzeichnung der Lösungen ist in beiden Abbildungen identisch.

Isolator zum antiferromagnetischen Metall. Der Schnittpunkt $\Omega_{\text{AF}} = \Omega_{\text{PM}}$ ($\mu_c \approx 1.04$, siehe Abb. 4.3, c) markiert einen weiteren Phasenübergang *erster* Ordnung in die paramagnetische metallische Phase. Abb. 4.3, d zeigt den zugehörigen Verlauf des Ordnungsparameters. Mit Dotierung des Antiferromagneten wird der Ordnungsparameter reduziert, am kritischen chemischen Potenzial μ_c springt der Wert von $m \approx 0.65$ auf $m = 0$.

Eine Betrachtung von kinetischer (E_{kin}) und potenzieller Energie (E_{pot}) soll weiteren Aufschluss über die Natur des Phasenübergangs vom Antiferromagneten zum Paramagneten geben. Der Vergleich zwischen Grundzustandsenergie und kinetischer Energie ist in Abb. 4.4 zu sehen. Es gilt für die Grundzustandsenergie

$$E_0 = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} \quad (4.5)$$

mit $E_{\text{pot}} = U \langle \hat{n}_\uparrow \hat{n}_\downarrow \rangle$. Die Doppelbesetzung kann aus dem großkanonischen Potenzial mittels

$$\langle \hat{n}_\uparrow \hat{n}_\downarrow \rangle = \frac{\partial \Omega}{\partial U} \quad (4.6)$$

bestimmt werden, die Grundzustandsenergie wird aus $E_0 = \Omega + \mu N$ berechnet. Zur Berechnung der Doppelbesetzung gemäß Gl. 4.6 wird $\Delta U = 10^{-3}$ für die numerische Ableitung gewählt. Am Teilchen-Loch-symmetrischen Punkt $\mu = U/2 = 4$ ist der Grundzustand durch die antiferromagnetische Lösung gegeben, obwohl diese aufgrund der größeren Doppelbesetzung die höhere potenzielle Energie E_{pot} besitzt. Der größere Wert von E_{pot} wird allerdings durch die geringere kinetische Energie des Antiferromagneten überkompensiert. Die Dotierung des Paramagneten (und damit der Übergang vom Mott-Hubbard-Isolator zum paramagnetischen Metall) führt zu einer Absenkung der kinetischen Energie des Paramagneten. Da der Antiferromagnet für deutlich kleineres chemisches Potenzial dotiert wird, folgt daraus ein Schnittpunkt der Grundzustandsenergien von Paramagnet und Antiferromagnet. Dieser liegt bei $\mu \approx 1.55$. Die kinetischen Energien stimmen erst bei $\mu \approx 1.33$ überein, der Beitrag von E_{pot} darf hier nicht vergessen werden. Der Phasenübergang vom

Antiferromagneten zum Paramagneten ist allerdings bei $\mu_c \approx 1.04$ zu beobachten und wird offenbar weder durch die potenzielle noch durch die kinetische Energie getrieben. Vielmehr scheint der Anteil $-\mu N$ im großkanonischen Potenzial den Antiferromagneten wegen der größeren Teilchenzahl auch dann noch zu stabilisieren, wenn bereits Grundzustandsenergie als auch kinetische Energie die paramagnetische Lösung begünstigen.

Der Vergleich von antiferromagnetischem Mott-Heisenberg-Isolator und paramagnetischem Mott-Hubbard-Isolator zeigt, dass sich der Antiferromagnet durch eine größere Bandlücke Δ als auch durch geringere kinetische Energie E_{kin} und größere Doppelbesetzung $\langle \hat{n}_\uparrow \hat{n}_\downarrow \rangle$ vom Paramagneten unterscheidet. Eine Interpretation dieser Ergebnisse soll mit Hilfe eines einfachen (Teilchen-)Bilids versucht werden. Wir vergleichen den Antiferromagneten mit einem Zustand antiparallel angeordneter Spins auf einem Gitter mit Nearest-Neighbor-Hopping und betrachten den Spin eines beliebigen Gitterplatzes genauer. Dieser Spin kann ausschließlich auf die direkt benachbarten Gitterplätze (mit jeweils entgegengesetztem Spin) hüpfen. Ein Weiterhüpfen von diesem Platz ist aufgrund des Pauli-Verbots unzulässig, da von hier nur Gitterplätze mit Spins gleicher Orientierung erreicht werden können. Damit bleibt als einzige Möglichkeit, den ursprünglichen Platz wieder zu besetzen. Die antiparallele Anordnung der Spins begünstigt folglich Hüpfprozesse zu direkten Nachbarplätzen, führt aber wegen des Pauli-Prinzips zu einer starken Lokalisierung des Teilchens. Diese Interpretation des Grundzustands lässt sich analog auf Ein-Teilchen-Anregungen übertragen. Wird ein zweites Elektron auf den betrachteten Gitterplatz gebracht, so sind Hüpfprozesse dieses Elektrons zu benachbarten Plätzen aufgrund des Pauli-Verbots unmöglich. Wird das Elektron dagegen entfernt, so erfordert ein Hüpfen dieses Lochs das Aufbrechen antiferromagnetischer Kopplungen, und entsprechende Hüpfprozesse werden daher unterdrückt. Das bedeutet für den Mott-Heisenberg-Isolator insgesamt eine Absenkung der kinetischen Energie und Erhöhung der Doppelbesetzung auf der einen Seite sowie Bänder im Ein-Teilchen-Anregungsspektrum mit geringer Breite auf der anderen Seite.

Als analoges Bild für den Paramagneten soll ein Gitter mit zufällig angeordneten Spins dienen. Ein beliebig herausgegriffener Spin kann jetzt nur noch mit Wahrscheinlichkeit $1/2$ auf direkte Nachbarplätze hüpfen, allerdings ist ein Weiterhüpfen von hier möglich, jeder Gitterplatz kann im Prinzip erreicht werden. Durch die zufällige Anordnung der Spins werden Hüpfprozesse zu direkten Nachbarn im Vergleich zum Antiferromagneten zwar unterdrückt (höhere kinetische Energie, geringere Doppelbesetzung), andererseits wird die räumliche Einschränkung auf wenige Gitterplätze aufgehoben. Ein zweites Elektron oder ein Loch können durch Hüpfprozesse, im Gegensatz zum Antiferromagneten, im Prinzip beliebige Gitterplätze erreichen. Das führt zu einer Verbreiterung der Bänder im Ein-Teilchen-Anregungsspektrum und damit zu einer kleineren Bandlücke Δ .

Dieses Bild bietet einen möglichen Zugang zum Verständnis der VCA-Rechnungen, sollte aber (nicht nur wegen des als starr angenommenen Spinhintergrunds) lediglich als Interpretationshilfe angesehen werden.

4.2.2 Koexistenz paramagnetischer und antiferromagnetischer Lösung

In der Umgebung des Phasenübergangs vom antiferromagnetischen zum paramagnetischen Metall tritt neben den beiden bereits diskutierten Lösungen eine weitere dritte Lösung auf ($1.0 < \mu < 1.2$). Wie aus Abb. 4.3, c abgelesen werden kann, ist diese Lösung allerdings energetisch instabil. Daneben lässt sich aus der Krümmung $\Omega - \Omega_{\text{PM}}$ schließen, dass die Ladungssuszeptibilität κ (Gl. 2.10) offenbar kleiner sein muss als in den beiden übrigen

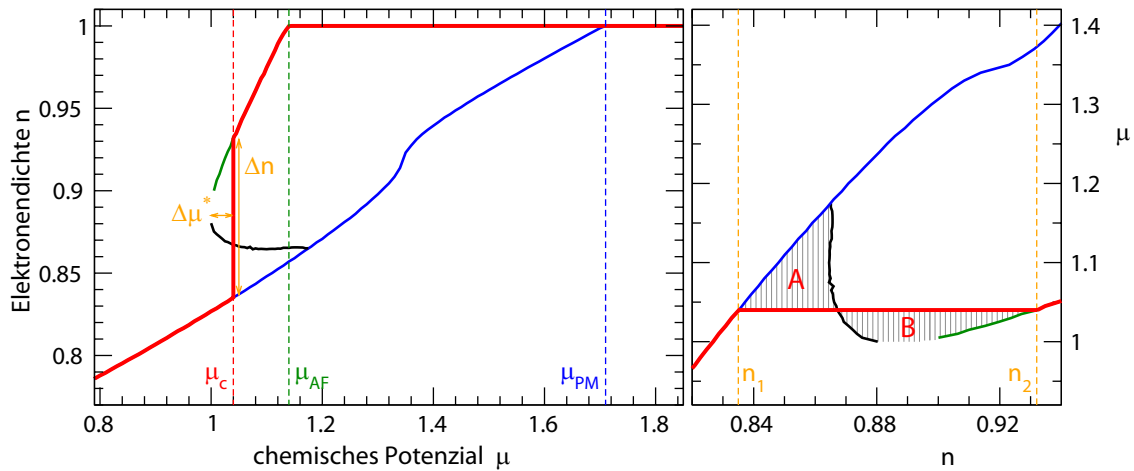


Abbildung 4.5: (links) Teilchendichte n als Funktion des chemischen Potentials μ . Die kritischen Werte des chemischen Potentials kennzeichnen den Übergang vom paramagnetischen Mott-Hubbard-Isolator zum paramagnetischen Metall (μ_{PM}) (dieser Phasenübergang ist wegen der stabilen antiferromagnetischen Lösung nicht realisiert), den Phasenübergang vom antiferromagnetischen Mott-Heisenberg-Isolator zum antiferromagnetischen Metall (μ_{AF}) sowie den Phasenübergang vom antiferromagnetischen zum paramagnetischen Metall (μ_c). (rechts) Bestimmung von μ_c mittels Maxwell-Konstruktion.

Phasen. Eine Verletzung der Stabilitätsbedingung $\partial n / \partial \mu > 0$ kann aus der Energiedifferenz $\Omega - \Omega_{PM}$ allein nicht bestimmt werden. Die entsprechende Teilchendichte als Funktion des chemischen Potentials ist in Abb. 4.5 aufgetragen. Hier kann $\partial n / \partial \mu < 0$ für die instabile dritte Lösung (in einem endlichen μ -Bereich) direkt abgelesen werden.

In der paramagnetischen und antiferromagnetischen metallischen Phase ist die Stabilitätsbedingung $\partial n / \partial \mu > 0$ dagegen erfüllt. In der Nähe des Metall-Isolator-Übergangs ($n \rightarrow 1$) ist keine Instabilität zu erkennen, die Teilchendichte $n(\mu)$ verläuft in beiden Phasen linear. Mit dem Verschwinden der antiferromagnetischen Lösung bei $\mu = 1.0$ ist eine Divergenz der Ladungssuszeptibilität κ verbunden, allerdings ist der Antiferromagnet hier bereits energetisch instabil. Wie anhand der optimalen Werte für ε und h ersichtlich ist (siehe Abb. 4.3), ist die antiferromagnetische Phase über die instabile dritte Lösung stetig mit der paramagnetischen Phase verbunden.

Von besonderem Interesse ist der Sprung in der Teilchendichte (und die damit verbundene Divergenz in κ) beim Übergang vom antiferromagnetischen zum paramagnetischen Metall bei $\mu_c \approx 1.04$. Eine kontinuierliche Dotierung des Modellsystems ist somit nur möglich, indem am kritischen chemischen Potenzial μ_c ein Gemisch aus beiden Phasen angenommen wird. Dieses Szenario erinnert an ein Flüssigkeits-Gas-Gemisch, das aus der Interpretation der Van-der-Waals-Gleichung für reale Gase folgt [43]. Die Auftragung der Daten als $\mu(n)$ (Abb. 4.5, rechts) macht die Analogie deutlich. Für den Vergleich mit Van-der-Waals-Isothermen ist der Druck p mit dem chemischen Potenzial μ , das Volumen V mit der Teilchendichte n gleichzusetzen. Mit Erreichen der kritischen Dotierung ($n \approx 0.93$), ausgehend von Halbfüllung, tritt ein Koexistenzbereich von antiferromagnetischer und paramagnetischer Phase auf. Mit zunehmender Dotierung verringert sich (bei konstantem chemischen Potenzial) der Anteil des Antiferromagneten, bis für $n \approx 0.84$ eine homogene paramagnetische Phase übrig bleibt. Das Analogon ist die Verflüssigung des Van-der-Waals-Gases durch Verringerung des Volumens V bei gleichbleibendem Druck p .

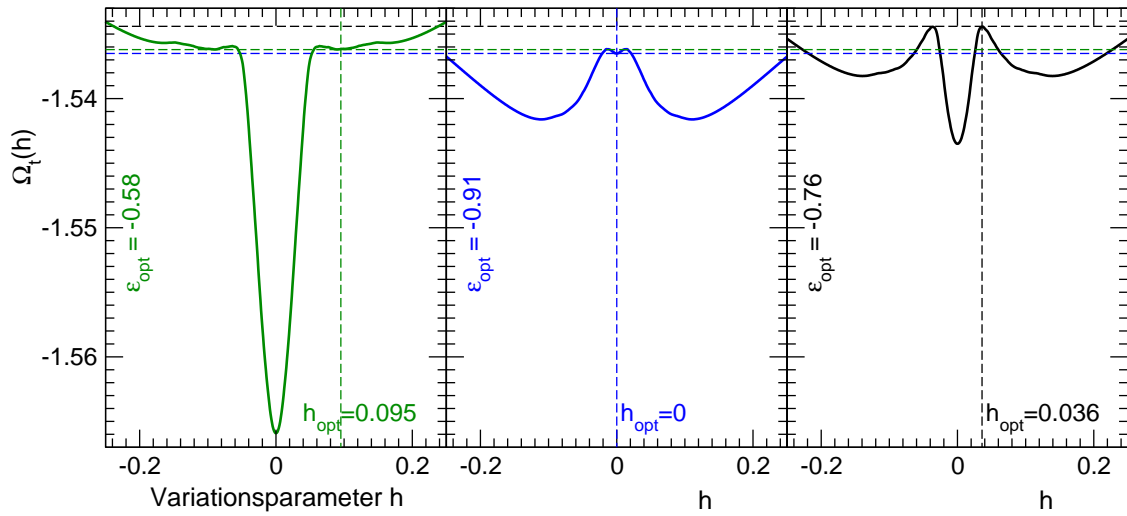


Abbildung 4.6: $\Omega_t(h)$ als Funktion des Weiss-Felds h für $\mu = 1.04$. Die optimalen Werte für die On-Site-Energie ε_{opt} sind Abb. 4.3 entnommen. Da die optimalen Variationsparameter ε_{opt} , h_{opt} nicht unabhängig voneinander sind, sind die Extrema der Funktion $\Omega_t(h)$ an den Stellen $h \neq h_{\text{opt}}$ keine weiteren stationären Punkte ($\Omega_t(\varepsilon)$ ist nur extremal für $\varepsilon = \varepsilon_{\text{opt}}$, sofern auch $h = h_{\text{opt}}$).

Ein solches Zwei-Phasen-Gebiet mit Divergenz in der Ladungssuszeptibilität wird mit dem Begriff Phasenseparation bezeichnet. Eine genauere Diskussion folgt in Abschnitt 4.3.

Das Selbstenergiefunktional bzw. die Funktion $\Omega_t(h)$ in Abhängigkeit des Weiss-Felds h ist in Abb. 4.6 gezeigt. Herausgegriffen ist der Verlauf für $\mu = 1.04$, $\Omega_t(h)$ ist für die drei Lösungen aus Abb. 4.5 mit den jeweils optimalen Werten ε_{opt} (Abb. 4.5, a) dargestellt. Paramagnetische und antiferromagnetische Lösung besitzen wie erwartet annähernd das gleiche Ω , die dritte Lösung zeigt einen deutlich größeren Wert des großkanonischen Potentials. Wie sich herausstellt ist allen stationären Punkten gemeinsam, dass $\Omega_t(\varepsilon)$ immer ein lokales Maximum für optimale On-Site-Energie besitzt. Als Funktion des Weiss-Felds $\Omega_t(h)$ ergibt sich dagegen ein komplexeres Verhalten. Die unabhängige Optimierung der Variationsparameter ε und h bedingt einen unterschiedlichen Verlauf des Selbstenergiefunktionals als Funktion von h für die drei Lösungen, da die Stationaritätsbedingung für abweichende Werte von ε erfüllt wird. Paramagnet und Antiferromagnet zeigen ein lokales Minimum als Funktion von h , die instabile Lösung besitzt ein Maximum am stationären Punkt. Eine Interpretation des Entstehens und Verschwindens von Extrema (z. B. das Zusammenlaufen eines Minimums und Maximums) ausschließlich unter Berücksichtigung eines solchen eindimensionalen Schnitts in der entsprechenden Parameterichtung ist daher mit Vorsicht zu genießen.

Neben der Ladungssuszeptibilität als Kriterium für die lokale Stabilität einer Lösung kann zusätzlich die magnetische Suszeptibilität

$$\chi_{\text{AF}} = \left. \frac{\partial m}{\partial h_{\text{AF}}} \right|_{h_{\text{AF}}=0} \quad (4.7)$$

herangezogen werden. Das physikalische Feld h_{AF} ist durch Gl. 4.4 definiert. Die Rechnung ergibt, dass die paramagnetische Lösung nur für Werte des chemischen Potentials $\mu \lesssim 1.18$ lokal stabil ist, d. h. bis zum Auftreten der dritten Lösung. An $\mu \approx 1.18$ divergiert die

magnetische Suszeptibilität χ_{AF} , der Übergang von der lokal stabilen zur lokal instabilen Phase ist durch einen Vorzeichenwechsel von χ_{AF} gekennzeichnet. Die Lösung ändert dabei ihren Charakter von einem Minimum in $\Omega_t(h)$ (bei $h = 0$) wie in Abb. 4.6 zu einem Maximum.

Aus Abb. 4.5 ist zu entnehmen, dass $\Omega_t(t')$ als Funktion eines Variationsparameters sehr flach werden kann. Dank der Auswertung des Selbstenergiefunktionals mit Hilfe der \mathbf{Q} -Matrix-Methode (Kap. 3.2.1) ist eine hinreichende Genauigkeit möglich. Um zusätzliche Finite-Size-Effekte aufgrund der Systemgröße (Anzahl der Cluster N_{cl}) auszuschließen, haben wir unsere Rechnungen mit $N_{cl} = 20 \times 20$ bis $N_{cl} = 100 \times 100$ durchgeführt. Aus dem Vergleich der Ergebnisse ist zu schließen, dass $N_{cl} = 20 \times 20$ als Modellgröße in diesem Fall bereits ausreichend ist.

4.3 Phasenseparation im Hubbard- und t - J -Modell

Der Begriff Phasenseparation bezeichnet eine thermodynamische Instabilität, die die Stabilitätsbedingung für die Ladungssuszeptibilität $\kappa^{-1} = \partial^2 E_0 / \partial n^2 > 0$ verletzt. Tritt eine solche Instabilität als Funktion der Elektronendichte n in einem Bereich $n_1 < n < n_2$ auf, so resultiert daraus ein Zwei-Phasen-System mit den Dichten n_1 bzw. n_2 für die einzelnen Phasen (Abb. 4.5 für $\mu_c \approx 1.04$). Während in unendlichen Systemen $\kappa^{-1} = 0$ im gesamten Bereich $n_1 < n < n_2$ zu erwarten ist, kann in endlichen Systemen aufgrund von Oberflächeneffekten die Ladungssuszeptibilität auch negative Werte annehmen [44]. Der Grund hierfür liegt im Beitrag der endlichen positiven Oberflächenenergie (pro Platz) durch die Phasengrenze [45]. Unsere Resultate in Abb. 4.5 zeigen genau dieses Verhalten.

In Analogie zu dem bereits erwähnten Flüssigkeits-Gas-Gemisch kann mittels einer Maxwell-Konstruktion das Verhalten des Systems im Koexistenzbereich (Phasen mit Ladungsdichten n_1 bzw. n_2) beschrieben werden [43]. Dabei haben wir das chemische Potenzial μ mit dem Druck p und die Teilchendichte n mit dem Volumen V eines Van-der-Waals-Gases verglichen. Zur Erläuterung der Maxwell-Konstruktion ist die Darstellung der Daten (Abb. 4.5, links) in der Form $\mu(n)$ (Abb. 4.5, rechts) hilfreich. Mit der Forderung

$$\frac{E_{0,2} - E_{0,1}}{L} = \int_{n_1}^{n_2} \mu \, dn \stackrel{!}{=} \mu_c (n_2 - n_1) \quad (4.8)$$

wird eine konsistente Beschreibung von $\mu(n)$, also ein stetiger Verlauf des chemischen Potentials beim Phasenübergang vom Antiferromagneten zum Paramagneten, mit minimaler Grundzustandsenergie E_0 ermöglicht.⁴ Die geometrische Interpretation von Gleichung 4.8 bedeutet, dass die beiden durch die Maxwell-Gerade entstandenen Flächen A und B (Abb. 4.5) gleich sein müssen. Aus dem Zusammenhang $\Omega = E_0 - \mu N$ folgt mittels

$$E_{0,2} - E_{0,1} = \Omega_2 - \Omega_1 + \mu(N_2 - N_1) \quad (4.9)$$

die Bedingung $\Omega_1(\mu_c) = \Omega_2(\mu_c)$ (wodurch Gl. 4.8 erfüllt werden kann) als alternatives Kriterium zur Bestimmung von μ_c . Wir haben die Bedingung $\Omega_1(\mu_c) = \Omega_2(\mu_c)$ bereits in

⁴Wir betrachten ein Zwei-Phasen-Gebiet bei Temperatur $T = 0$. Der Koexistenzbereich wird durch einen einzigen Freiheitsgrad (Teilchendichte n) charakterisiert (Gibbsche Phasenregel [43]) und kann durch die freie Energie $F(T, V, N)$ als geeignetes thermodynamisches Potenzial beschrieben werden. Wegen $T = 0$ stimmt der Wert der freien Energie F mit dem Wert der inneren Energie E_0 überein.

Abb. 4.3 zur Bestimmung des Phasenübergangs verwendet. Da die Variation der On-Site-Energie ε eine thermodynamisch konsistente Beschreibung der Teilchenzahl im Rahmen unserer VCA-Rechnungen sicherstellt, liefern beide Kriterien auch im Rahmen der verwendeten Approximation übereinstimmende Ergebnisse für μ_c .

Die Beobachtung von Ladungsinhomogenitäten wie Stripes- und Checkerboard-Strukturen in Hochtemperatur-Supraleitern [46, 47, 48] hat vermehrtes Interesse an der Untersuchung von Phasenseparation im $2D$ -Hubbard-Modell geweckt. Es ist zu erwarten, dass eine als Phasenseparation im Hubbard-Modell auftretende Instabilität unter dem Einfluss langreichweitiger Coulomb-Wechselwirkung in einen Zustand mit mikroskopischer (einige Gitterkonstanten) Ladungsordnung übergeht. Der langreichweitige Anteil der Coulomb-Wechselwirkung verhindert in diesem Fall die Ausbildung *ausgedehnter* homogener Phasen unterschiedlicher Ladungsdichte aufgrund der hohen elektrostatischen Energie und begünstigt eine makroskopisch homogene Ladungsverteilung im gesamten Gitter. Dagegen wird durch die Verringerung der Austauschenergie und kinetischen Energie ein phasenseparierter Zustand bevorzugt. Das Zusammenwirken beider konkurrierender Effekte, so die Erwartung, kann zu oben erwähnten Ladungsordnungen wie den beobachteten Stripes-Strukturen führen (also einer auf makroskopischer Skala homogenen Ladungsverteilung einerseits und einer Art Phasenseparation im Bereich einiger Gitterkonstanten andererseits). Auch unabhängig von den in realen Materialien gefundenen Ladungsordnungen ist die Untersuchung von Phasenseparation an sich bereits eine interessante Fragestellung zum Verständnis der Phasendiagramme grundlegender Viel-Teilchen-Modellsysteme.

Es existieren eine Reihe von Arbeiten zur Phasenseparation im Hubbard-Modell und t - J -Modell, mit zum Teil abweichenden Ergebnissen. Als gesichert gilt die Beobachtung von Phasenseparation im t - J -Modell für $J \gg t$ [49, 50, 51, 52]. Es entstehen eine halbgefüllte antiferromagnetische Phase mit verminderter Austauschenergie durch Maximierung der Anzahl antiferromagnetischer Bindungen sowie eine dotierte Phase mit niedriger kinetischer Energie. Der interessante Bereich $J < t$, in dem die Abbildung vom Hubbard-Modell auf das t - J -Modell relevant wird, ist dagegen eher unklar. Während Rechnungen zum Grundzustand des zweidimensionalen t - J -Modells von Emery *et al.* (exakte Diagonalisierung) [52] und Hellberg und Manousakis (Green's Function Monte Carlo) [51] Phasenseparation für beliebige J ergeben, finden Shih *et al.* (Power Lanczos) [50] und Putikka und Luchini (High-Temperature Series Expansion) [49] keine Anzeichen für Phasenseparation für kleine Werte von J .

Das Hubbard-Modell mit Nearest-Neighbor-Hopping zeigt laut Rechnungen von Moreo *et al.* (Quantum Monte Carlo) [53] und Becca *et al.* (Green's Function Monte Carlo) [45] keine Phasenseparation. Analytische Betrachtungen von Su [54] schließen Phasenseparation für endliche Temperaturen und $t' = 0$ ebenfalls aus. Macridin *et al.* (Dynamical Cluster Approximation mit Quantum Monte Carlo) [55] finden Phasenseparation im lochdotierten Hubbard-Modell ab $U \approx W$ für $t' > 0$. Phasenseparation wird hier im Unterschied zu oben diskutierten Ergebnissen aber in der paramagnetischen Lösung (für $T \lesssim 0.1$ und $t' = 0.3$ bzw. $T \lesssim 0.06$ und $t' = 0.1$) beobachtet. Dabei besteht der Koexistenzbereich aus einem inkompressiblen Mott-Isolator und einem korrelierten Metall mit starken antiferromagnetischen Korrelationen. Es wird vermutet, dass in dem untersuchten Parameterbereich der wesentliche Effekt von t' die Verringerung der kinetischen Energie der metallischen Phase ist. Rechnungen von Aichhorn *et al.* (Variational Cluster Approximation) [40] für $U = 8$ und $t' = -0.3$ zeigen Anzeichen für Phasenseparation zwischen supraleitenden Phasen mit und ohne Antiferromagnetismus für $n < 1$. Für $n > 1$ (Elektronendotierung) lassen die Ergebnisse darauf schließen, dass keine Phasenseparation im thermodynamischen Limes zu

erwarten ist.

Kürzlich durchgeführte Rechnungen von Chang und Zhang (Auxiliary-Field Quantum Monte Carlo) [56] ergeben Phasenseparation bereits im Teilchen-Loch-symmetrischen Hubbard-Modell für $U \geq 4$, während für $U < 4$ keine definitive Aussage möglich ist. Ausgangspunkt für die Untersuchungen ist die Betrachtung der Grundzustandsenergie des phasenseparierten Systems. Mit der dotierungsabhängigen Grundzustandsenergie pro Platz $e_0(n)$ lässt sich die Grundzustandsenergie des phasenseparierten Systems als [52]

$$E = (L - L_h)e_0(1) + L_h e_0(1 - \delta) \quad (4.10)$$

berechnen. Es wird angenommen, dass sich der Koexistenzbereich aus einer lochdotierten Phase ($e_0(1 - \delta)$, $\delta = 1 - n$) und einer antiferromagnetischen Phase bei Halbfüllung ($e_0(1)$, $\delta = 0$) zusammensetzt. Die dotierte Phase erstreckt sich über L_h Gitterplätze. Eine alternative Darstellung von Gl. 4.10 ist durch den Ausdruck

$$E = L e_0(1) + N_h \frac{e_0(1 - \delta) - e_0(1)}{\delta} \quad (4.11)$$

gegeben. Dabei bezeichnet N_h die Anzahl der Löcher, es gilt $\delta = N_h/L_h$. Zeigt sich hier ein Minimum in $(e_0(1 - \delta) - e_0(1))/\delta$ bei endlicher Dotierung δ , so lässt sich daraus auf einen phasenseparierten Zustand schließen. Die zusätzliche Betrachtung von Spinkorrelationen in der Arbeit von Chang und Zhang untermauert die Annahme einer makroskopischen Koexistenz von Antiferromagnet bei Halbfüllung und nichtmagnetischer dotierter Phase bei der Ableitung der Grundzustandsenergie Gl. 4.10 des phasenseparierten Systems.

Der Grundzustand des zweidimensionalen (Teilchen-Loch-symmetrischen) Hubbard-Modells und des t - J -Modells bei Halbfüllung ist ein antiferromagnetischer Isolator. Dotierung des Systems führt zur Zerstörung der antiferromagnetischen Phase. Im Limes $J \gg t$ wird offensichtlich, dass die Energieabsenkung durch Maximierung der Anzahl antiferromagnetischer Bindungen einen phasenseparierten Zustand zwischen Antiferromagnet (bei Halbfüllung) und einer dotierten metallischen Phase hervorruft. Wie die hier vorgestellte Auswahl an Arbeiten gezeigt hat, sind zuverlässige Aussagen zur Phasenseparation im Hubbard- und t - J -Modell für *schwache* Kopplung J allerdings schwierig, insbesondere aufgrund von Finite-Size-Effekten. Der Argumentation von Putikka und Luchini [49] folgend, kann die Grundzustandsenergie durch die kinetische Energie der Löcher bei kleinen Dotierungen im unendlichen System stärker abgesenkt werden als in Clustern endlicher Größe (sowohl offene als auch periodische Randbedingungen an den Clustergrößen vergrößern die Grundzustandsenergie). Vielmehr tragen lokale Wechselwirkungen, wie antiferromagnetische Kopplung, in kleinen Clustern wesentlich zur Verringerung der Grundzustandsenergie bei.

Mit Hilfe des Weiss-Felds h wird eine antiferromagnetische Wechselwirkung durch die selbstkonsistente Einbettung der Cluster in unseren VCA-Rechnungen auch über die Clustergrößen hinaus vermittelt. Dadurch ist eine Beschreibung langreichweitiger antiferromagnetischer Ordnung auf Cluster-Mean-Field-Niveau möglich. Es daher denkbar, dass im Rahmen der Approximation der Anteil der Wechselwirkung (und die daraus resultierende effektive antiferromagnetische Kopplung) gegenüber der kinetischen Energie stärker gewichtet wird. Dadurch würden die oben diskutierten Finite-Size-Effekte zusätzlich verstärkt werden.

Eine exakte Lösung des Hubbard-Modells in $D = \infty$ ist im Rahmen der DMFT möglich. Nichtlokale Korrelationen bleiben in diesem Limes allerdings gänzlich unberücksichtigt. Da kurzreichweitige Korrelationen in $D = 2$ allerdings nicht zu vernachlässigen sind,

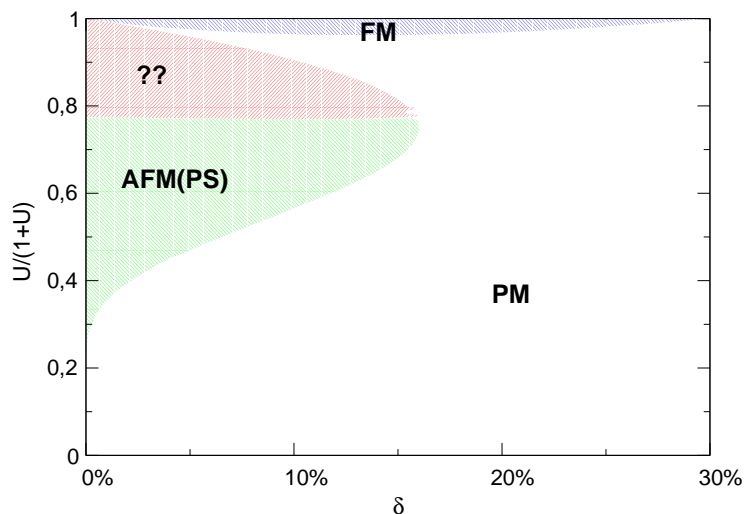


Abbildung 4.7: Schematisches Phasendiagramm des Hubbard-Modells in DMFT für ein hyperkubisches Gitter mit Nearest-Neighbor-Hopping ($W = 2\sqrt{2}$, siehe Gl. 2.15). Der Antiferromagnet ist für Halbfüllung stabil, ein phasenseparierter antiferromagnetischer Zustand (AFM(PS)) in der Nähe von Halbfüllung wird bis etwa $U = W$ beobachtet. Der Charakter der magnetischen Phase (??) für größere Wechselwirkung kann nicht bestimmt werden. Weiter treten paramagnetische (PM) und ferromagnetische (FM) Lösungen auf. Entnommen aus Eur. Phys. J. B **27**, 473 (2002), Ref. [57].

wird durch DMFT-Rechnungen in erster Linie die grundlegende Fragestellung, ob das Hubbard-Modell an sich Phasenseparation zeigen kann, untersucht. Zitzler *et al.* (Wilson's Numerical Renormalization Group) [57] finden für ein hyperkubisches Gitter mit Nearest-Neighbor-Hopping einen phasenseparierten Zustand mit Néel-Ordnung im Bereich kleiner bis mittlerer Werte für U , stoßen allerdings für $U \gg t$ auf numerische Schwierigkeiten (siehe Abb. 4.7). Für das Bethe-Gitter mit Nearest-Neighbor-Hopping kann Phasenseparation im Paramagneten jenseits von Halbfüllung für $T > 0$ beobachtet werden (Eckstein *et al.*, Two-Site Dynamical Impurity Approximation [58]). Mit zusätzlichem Next-Nearest-Neighbor-Hopping tritt Phasenseparation auch bei Halbfüllung auf.

4.3.1 Phasendiagramm

Der Koexistenzbereich von antiferromagnetischer und paramagnetischer metallischer Phase im zweidimensionalen Hubbard-Modell mit Nearest-Neighbor-Hopping ist im Phasendiagramm Abb. 4.8 in Abhängigkeit der Wechselwirkungsstärke dargestellt. Es wurden Modellsysteme mit $N_{\text{cl}} = 20 \times 20$ bis $N_{\text{cl}} = 100 \times 100$ ($L_c = 4$) für ausgewählte Werte von U betrachtet, der Einfluss der Systemgröße auf die Ergebnisse ist vernachlässigbar.

Für schwache Wechselwirkung $U \lesssim 5$ wird keine Phasenseparation beobachtet. Vielmehr findet sich eine stabile metallische Lösung im gesamten betrachteten Dotierungsbereich (Elektronendichten von $n = 1$ bis $n \approx 0.5$). Interessanterweise erlauben die bereits erwähnten Resultate von Chang und Zhang [56] eine zuverlässige Aussage zur Phasenseparation nur für Werte $U \geq 4$. Ihre Rechnung für $U = 2$ deutet eher auf einen homogenen Grundzustand hin. Chang und Zhang können Phasenseparation hier allerdings nicht endgültig ausschließen. Es wurden Cluster (mit Twisted Angle Boundary Condition) bis $L_c = 16 \times 16$ mit Auxiliary-Field Quantum Monte Carlo berechnet.

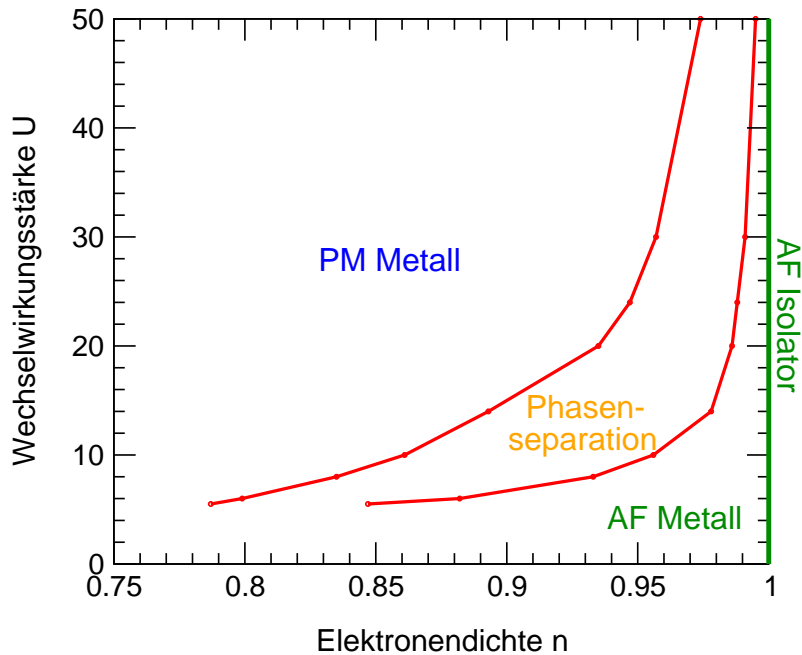


Abbildung 4.8: Phasenseparation im 2D-Hubbard-Modell mit Nearest-Neighbor-Hopping ($L_c = 4$). Isolator (AF Isolator) bzw. Metall (AF Metall) mit langreichweitiger antiferromagnetischer Ordnung sind bei Halbfüllung bzw. für geringe Dotierung zu finden, die paramagnetische metallische Phase (PM Metall) ist für größere Dotierung stabil.

Unsere VCA-Rechnungen mit $L_c = 4$ zeigen Phasenseparation ab $U = 5.5$. Die Größe Δn (siehe Abb. 4.5), die den phasenseparierten Zustand charakterisiert, nimmt mit der Wechselwirkung U bis zum Erreichen eines maximalen Werts bei $U \approx W$ zu (siehe Abb. 4.9). Versteht man die Néel-Temperatur T_N aus DCA-Rechnungen⁵ als Maß für die Stärke antiferromagnetischer Korrelationen, so ist Antiferromagnetismus im 2D-Hubbard-Modell (bei Teilchen-Loch-Symmetrie) am stärksten ausgeprägt für $U \approx 3/4W$ [55] (vergl. auch Abb. 6.5). Der vergleichbare Verlauf von $T_N(U)$ und $\Delta n(U)$ lässt auf eine enge Verbindung zwischen Phasenseparation und antiferromagnetischer Wechselwirkung schließen. Aus Abb. 4.9 ist $\Delta n \sim 1/U$ für große Wechselwirkung abzulesen. Wegen $J \sim t^2/U \rightarrow 0$ im Limes $U \rightarrow \infty$ sind antiferromagnetischer und paramagnetischer Zustand energetisch entartet. Eine Minimierung der Austauschenergie durch Maximierung der Anzahl antiferromagnetischer Kopplungen wird weniger wichtig. Eine Absenkung der Grundzustandsenergie durch einen phasenseparierten Zustand ist weniger wahrscheinlich. Der Verlauf des Koexistenzbereichs in Abb. 4.8 für große Wechselwirkung untermauert diese Argumentation. Phasenseparation tritt nur noch in der Nähe von Halbfüllung auf und ist auf einen Bereich mit geringer Dotierung beschränkt.

Neben der Größe Δn ist in Abb. 4.9 (Inset) auch der Wert von $\Delta\mu^*$ (zur Definition von $\Delta\mu^*$ siehe Abb. 4.5) zur Charakterisierung des phasenseparierten Zustands aufgetragen. Während unsere Argumentation, eine Tendenz zu Phasenseparation mit der Stärke antiferromagnetischer Korrelationen in Verbindung zu bringen, mit dem Verlauf von Δn

⁵Aufgrund des Mermin-Wagner-Theorems [19] gilt in $D = 2$ für die Néel-Temperatur $T_N = 0$. Der Wert von T_N aus DCA-Rechnungen gibt davon abweichend die Temperatur an, ab der antiferromagnetische Korrelationen die *Clustergrenzen* überschreiten.

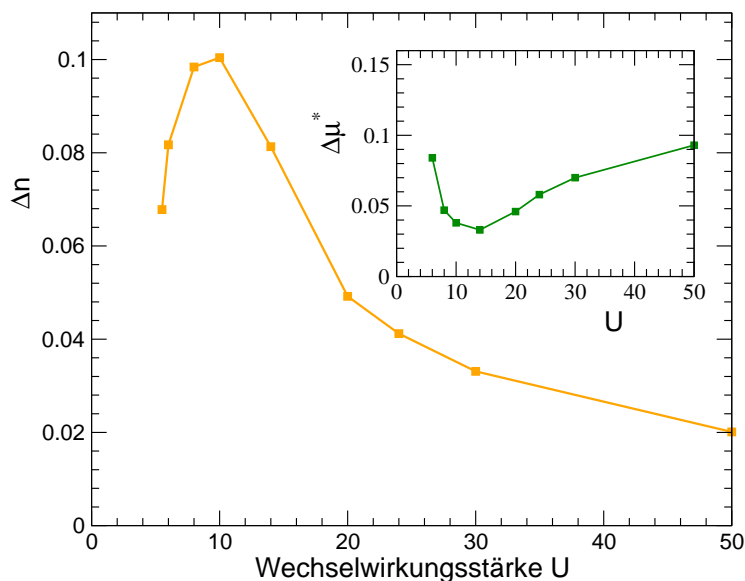


Abbildung 4.9: Charakterisierung des phasenseparierten Zustands mit Hilfe der Größen Δn bzw. $\Delta \mu^*$ (Inset). Die Definition der Größen ist Abb. 4.5 zu entnehmen ($L_c = 4$, $N_{cl} = 50 \times 50$).

konsistent erscheint, ist eine Interpretation anhand der Größe $\Delta \mu^*$ deutlich schwieriger. Wie aus Abb. 4.9 (Inset) zu erkennen ist, nimmt $\Delta \mu^*$ (im Gegensatz zu Δn) für große U mit der Wechselwirkung zu. Es ist allerdings zu beachten, wie in Abschnitt 4.3 erwähnt, dass die Ladungssuszeptibilität nur in endlichen Systemen negativ werden kann. Im Limes $L_c \rightarrow \infty$ muss dann entsprechend $\kappa^{-1} = 0$ im gesamten Koexistenzbereich gelten. Als Konsequenz ergibt sich $\Delta \mu^* = 0$ unabhängig von der Wechselwirkung U , wohingegen $\Delta n \neq 0$ weiterhin erfüllt ist. Dies zeigt, dass die Größe Δn deutlich besser geeignet ist, um einen phasenseparierten Zustand zu charakterisieren.

Im Unterschied zu den eingangs vorgestellten Ergebnissen von Chang und Zhang zeigen unsere Resultate eine Koexistenz mit einer antiferromagnetischen *metallischen* Phase anstelle eines antiferromagnetischen Mott-Heisenberg-Isolators. In einer Vielzahl der erwähnten Arbeiten zur Phasenseparation (Abschnitt 4.3) wird mit Gl. 4.11 bereits vorausgesetzt, dass eine Koexistenz mit einem (Mott-Heisenberg-)Isolator vorliegt, so auch in den Rechnungen von Chang und Zhang. Die Werte für Δn , die sich aus ihren Daten für $U = 4$ bis $U = 8$ bestimmen lassen, ergeben sich als $\Delta n \approx 0.07$ bis $\Delta n \approx 0.12$ und sind in guter Übereinstimmung mit den Ergebnissen der VCA-Rechnung in Abb. 4.9.⁶ Während die verschiedenen Arbeiten zur Phasenseparation im Teilchen-Loch-symmetrischen Hubbard-Modell in $D = 2$ keine endgültige Aussage zur Existenz eines phasenseparierten Zustands zulassen, zeigen die DMFT-Rechnungen von Zitzler *et al.* [57] Phasenseparation in $D = \infty$ für alle $U > 0$ (siehe Phasendiagramm Abb. 4.7). Ein maximaler Wert $\Delta n \approx 0.16$ wird für $U \approx W$ gefunden. Das Phasengemisch im Koexistenzbereich besteht hier ebenfalls aus einem antiferromagnetischen Isolator (Halbfüllung) und einer (dotierten) paramagnetischen metallischen Phase. Auffallend ist die qualitativ gute Übereinstimmung unserer Daten für Δn als Funktion von U in $D = 2$ im Vergleich mit den (dynamischen)

⁶Die Elektronendichten n_1 und n_2 der beiden Phasen im Koexistenzbereich, die unsere VCA-Rechnung ergeben (Abb. 4.8), weichen von den Daten aus [56] stärker ab, die Differenz $\Delta n = |n_2 - n_1|$ dagegen ist fast identisch.

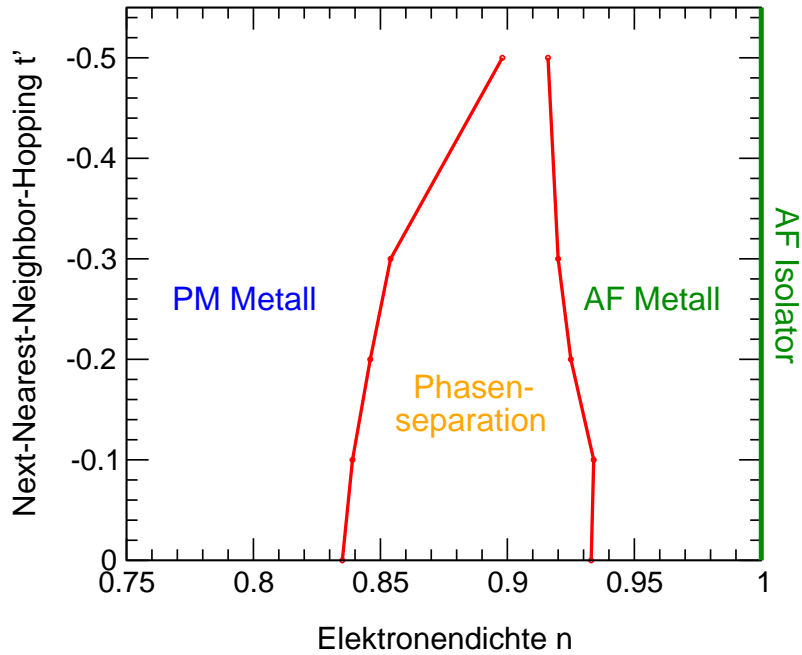


Abbildung 4.10: Einfluss von Next-Nearest-Neighbor-Hopping t' auf Phasenseparation im 2D-Hubbard-Modell für $U = 8$. Langreichweitige antiferromagnetische Ordnung wird bis $t' \approx -0.7$ beobachtet.

Mean-Field-Ergebnissen von Zitzler *et al.*, abgesehen von den abweichenden Ergebnissen für schwache Wechselwirkung (keine Phasenseparation).

4.3.2 Next-Nearest-Neighbor-Hopping

In Ergänzung zum Verhalten des Koexistenzbereichs abhängig von der Wechselwirkungsstärke U (Abb. 4.5) soll der Einfluss des Next-Nearest-Neighbor-Hoppings t' auf Phasenseparation diskutiert werden. Abb. 4.10 fasst die Ergebnisse für $U = 8$ zusammen, Phasenseparation kann bis $t' \approx -0.5$ beobachtet werden. Die Größen Δn und $\Delta \mu$ zeigen in diesem Fall als Funktion von t' einen vergleichbaren Verlauf, Δn bzw. $\Delta \mu^*$ nehmen mit abnehmendem Next-Nearest-Neighbor-Hopping monoton ab (und es gilt trivial $\Delta n = 0$ bzw. $\Delta \mu = 0$ mit Verschwinden des phasenseparierten Bereichs). Abb. 4.10 enthält die Daten für negative Werte von t' . Realistische Werte zur Beschreibung der kupratbasierten Hochtemperatur-Supraleiter im Rahmen des zweidimensionalen Ein-Band-Hubbard-Modells sind $t' = \pm 0.3$ ($U = 8$). Werden ausschließlich Füllungen $n \leq 1$ betrachtet, so entspricht $t' = 0.3$ den elektrondotierten und $t' = -0.3$ den lochdotierten Kupraten [32, 55]. Zusätzlich zu den in Abb. 4.10 dargestellten Daten wurde daher auch der Fall $t' = 0.3$ untersucht.

Wie sich herausstellt, kann für $t' = 0.3$ kein phasenseparierter Zustand gefunden werden. Vielmehr existiert eine stabile antiferromagnetische metallische Phase auch für große Lochdotierung (die Rechnung wurde durchgeführt bis $n \approx 0.5$). Die bereits erwähnten Rechnungen von Aichhorn *et al.* [40] unter Berücksichtigung von Supraleitung ergeben Phasenseparation ebenfalls nur für $t' < 0$ mit $n < 1$ (lochdotierte Kuprate). Macridin *et al.* [55] dagegen finden Phasenseparation in der paramagnetischen Phase, hier allerdings nur mit $t' > 0$ (Phasenseparation tritt auf für $T \lesssim 0.1$ und $t' = 0.3$ bzw. $T \lesssim 0.06$ und $t' = 0.1$).

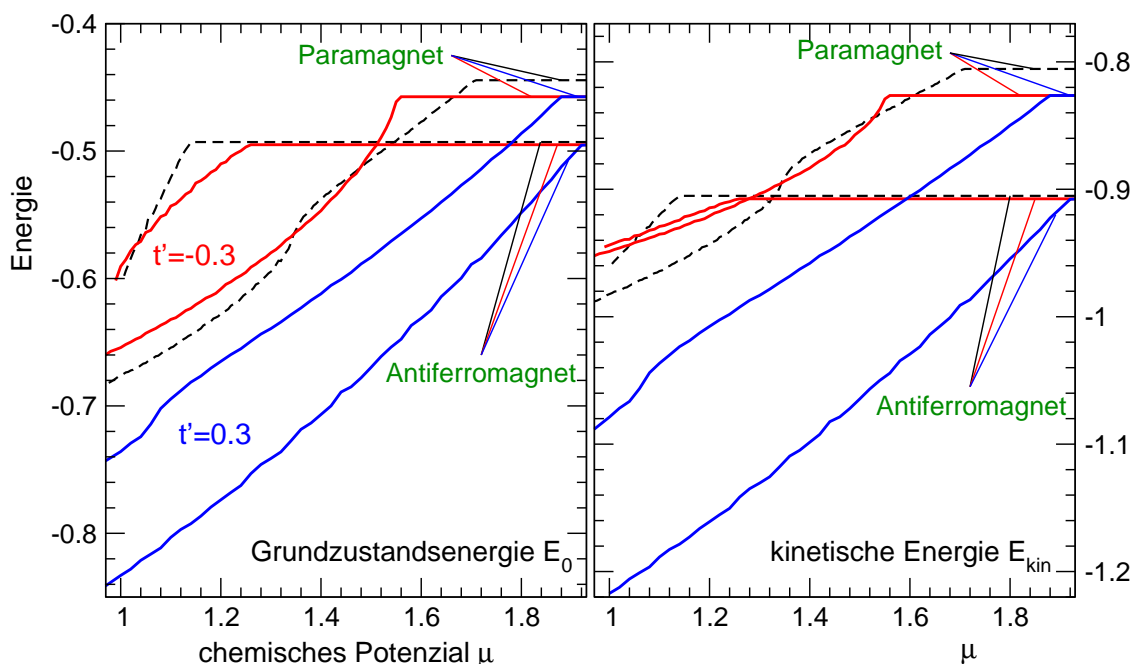


Abbildung 4.11: Grundzustandsenergie und kinetische Energie für $t' = 0$ (gestrichelte Linie), $t' = 0.3$ und $t' = -0.3$ als Funktion der Dotierung ($U = 8$). Die Doppelbesetzung wurde gemäß Gl. 4.6 berechnet.

Next-Nearest-Neighbor-Hopping frustriert die magnetische Ordnung des bipartiten Gitters, da durch t' antiferromagnetische Bindungen zwischen Gitterplätzen desselben Untergitters erzeugt werden. Eine antiparallele Anordnung der Spins auf benachbarten Gitterplätzen ist aber nicht verträglich mit antiferromagnetischer Ordnung auf nur einem Untergitter. So wird ab $t' \approx \pm 0.7$ das Auftreten einer antiferromagnetischen Lösung in unseren VCA-Rechnungen bereits bei Halbfüllung unterdrückt (Civelli *et al* [59] finden ein kritisches $t' \approx \pm 0.7$ für $U = 16$ mit CDMFT). Während bei Halbfüllung der antiferromagnetische Ordnungsparameter m unabhängig vom Vorzeichen von t' ist⁷, zeigt sich eine deutliche Asymmetrie bei Dotierung. Next-Nearest-Neighbor-Hopping mit $t' > 0$ (entspricht den elektrondotierten Kupraten) führt zu einer Stabilisierung antiferromagnetischer Korrelationen (im t - t' - J -Modell), $t' < 0$ dagegen lässt keine solche Tendenz erkennen [60]. Unsere VCA-Rechnungen zum Hubbard-Modell sind in Übereinstimmung mit diesen Resultaten. Auch im Experiment existiert die antiferromagnetische Phase in den elektrondotierten Kupraten in einem wesentlich größeren Bereich als es für lochdotierte Systeme beobachtet wird.

In Abb. 4.11 ist der Einfluss des Next-Nearest-Neighbor-Hoppings auf die Grundzustandsenergie bzw. die kinetische Energie dargestellt. Die Abbildung zeigt den Verlauf in Abhängigkeit von der Dotierung für $t' = \pm 0.3$ im Vergleich zu $t' = 0$. Bei Halbfüllung wird die kinetische Energie durch Next-Nearest-Neighbor-Hopping sowohl im Paramagneten als auch im Antiferromagneten abgesenkt, allerdings ist der Energiegewinn im Antiferromagneten (im Vergleich zum Paramagneten) vernachlässigbar. Während die Doppelbesetzung im Paramagneten durch t' um ca. 2% erhöht wird, bleibt sie im Antiferromagneten im Rah-

⁷Die Änderung des Vorzeichens von t' ist äquivalent zum Übergang von Loch- zu Elektrondotierung und daher bei Halbfüllung für den Ordnungsparameter $m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$ als lokale Größe ohne Bedeutung

men der Rechengenauigkeit unverändert. Ebenso verringert sich der antiferromagnetische Ordnungsparameter nur unwesentlich von 0.81 auf 0.79. Die im Wesentlichen unveränderte antiferromagnetische Anordnung der Spins verhindert offensichtlich weiterhin ein Hüpfen zwischen übernächsten Gitterplätzen. Die größere Absenkung der kinetischen Energie sowie die höhere Doppelbesetzung im Paramagneten dagegen lassen auf zusätzliches Hüpfen zwischen übernächsten Plätzen schließen. Die diskutierte Asymmetrie zwischen $t' = 0.3$ und $t' = -0.3$ im dotierten Bereich zeigt sich hier in der Grundzustandsenergie und kinetischen Energie. Die erhöhte Stabilität antiferromagnetischer Ordnung in den elektrondotierten Kupraten spiegelt sich in der Energieabsenkung des Antiferromagneten für $t' = 0.3$ bei Dotierung wider (blaue Linie). Es ist $\mu_{\text{PM}} < \mu_{\text{AF}}$, und die Grundzustandsenergie der antiferromagnetischen Lösung ist im dargestellten μ -Bereich stets kleiner als die Grundzustandsenergie des Paramagneten. Ein negatives Next-Nearest-Neighbor-Hopping $t' = -0.3$ (rote Linie) führt dagegen qualitativ auf den gleichen Verlauf von E_0 und E_{kin} wie im Teilchen-Loch-symmetrischen Modell (einschließlich Phasenseparation, siehe Abb. 4.10). Die geringere Energiedifferenz $\Omega_{\text{PM}} - \Omega_{\text{AF}}$ bei Halbfüllung im Vergleich zu $t' = 0$ mag als Indiz dafür angesehen werden, dass hier eine Energieabsenkung durch antiferromagnetische Korrelationen weniger wichtig wird. Dies äußert sich dann in einem verkleinerten Koexistenzbereich Δn .

4.3.3 Clusterfüllung und Variationsparameter

In allen bislang vorgestellten Rechnungen wurde das Referenzsystem (d. h. der ($L_c=4$)-Cluster) bei Halbfüllung ausgewertet, wobei $N' = L_c$ für beliebiges chemisches Potenzial μ durch Optimierung der On-Site-Energie ε im Cluster realisiert wird (siehe Abschnitt 4.2). Ergänzend zu diesen Ergebnissen haben wir das Selbstenergiefunktional auch unter Verwendung dotierter Cluster $N' \neq L_c$ berechnet.

Obwohl die Elektronenzahl im Cluster nur wenige *diskrete* Werte annehmen kann, ist im Rahmen der VCA eine *kontinuierliche* Dotierung des Modellsystems als Funktion des chemischen Potenzials μ möglich. Eine Veränderung der Elektronenzahl im Referenzsystem durch Anpassung eines geeigneten Variationsparameters bedingt einen unstetigen Übergang in einen neuen Grundzustand. Als Konsequenz ergibt sich eine Unstetigkeit des Selbstenergiefunktionals als Funktion dieses Variationsparameters (vergl. z. B. Gl. 3.31). Die Teilchenzahl im Cluster wird daher fest vorgegeben. Wir haben dazu auch Rechnungen durchgeführt, die auf dem ($L_c=4$)-Cluster mit zwei bzw. drei Elektronen basieren. Wie sich dann allerdings herausstellt, lässt sich Halbfüllung im Modellsystem mit dotierten Clustern nicht geeignet beschreiben. So kann Halbfüllung für $t' = 0$ nicht mehr durch den Teilchen-Loch-symmetrischen Wert des chemischen Potenzials $\mu = U/2$ realisiert werden, desweiteren zeigt $n(\mu)$ keinen Teilchen-Loch-symmetrischen Verlauf.⁸ Durch die Verwendung von Bad-Plätzen wird eine verbesserte Beschreibung dotierter Systeme möglich. Dieser Aspekt wird in Kapitel 5 ausführlich behandelt.

Neben der Freiheit, andere Clusterfüllungen in den Rechnungen zu verwenden, können auch zusätzliche Variationsparameter in Betracht gezogen werden. In diesem Zusammenhang haben wir neben den Parametern ε und h auch das Hopping im Cluster variiert in der Erwartung, das ausgeschaltete Inter-Cluster-Hopping teilweise kompensieren zu können sowie eine verbesserte Näherung zu erhalten. Für den betrachteten Fall $U = 8$ treten allerdings Schwierigkeiten auf, die bei Halbfüllung bestimmte antiferromagnetische Lösung

⁸Eine vergleichbare Rechnung für den ($L_c=8a$)-Cluster mit einem Loch bzw. zwei Löchern zeigt ähnliche Abweichungen ($n > 1$ für $\mu = U/2$).

im dotierten Bereich weiter zu verfolgen. Im Paramagneten nimmt das optimale Hopping unverhältnismäßig große Werte an. Aus diesem Grund wurden nur die On-Site-Energie ε und das Weiss-Feld h in den vorgestellten VCA-Rechnungen berücksichtigt.

4.4 Einfluss von Clustergröße und Clustergeometrie

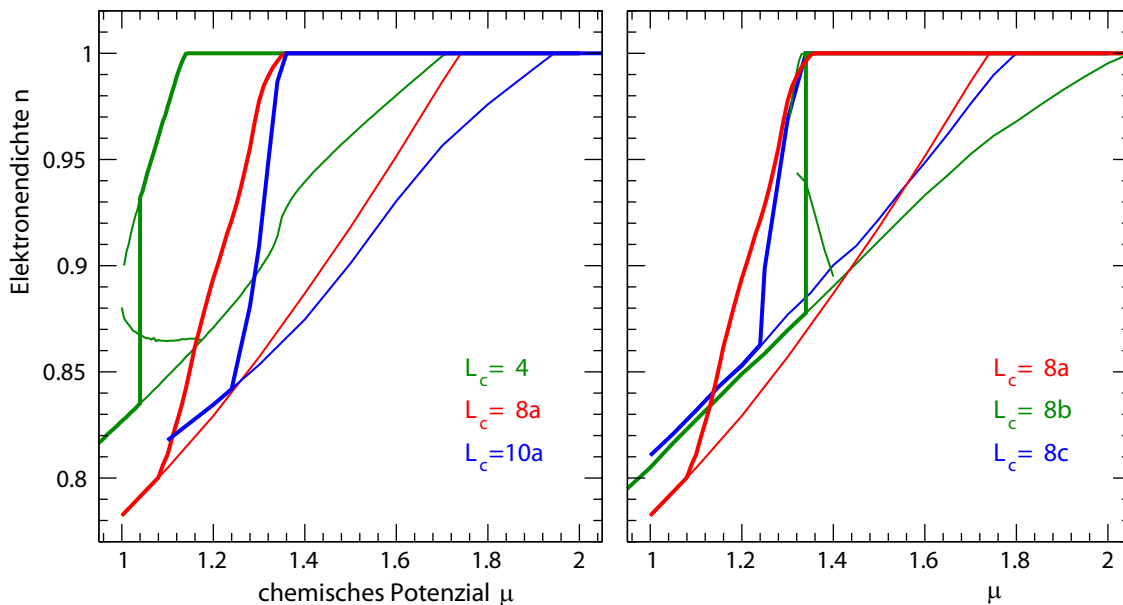


Abbildung 4.12: Abhängigkeit der Daten von Clustergröße (links) und Clustergeometrie (rechts) für ausgewählte Cluster ($U = 8$, $t' = 0$).

Unsere Analyse des $2D$ -Hubbard-Modells mit Hilfe des ($L_c=4$)-Clusters ergibt einen Mott-Heisenberg-Isolator als Grundzustand bei Halbfüllung für beliebige Wechselwirkung. Der antiferromagnetische Ordnungsparameter im Limes $U \rightarrow \infty$ zeigt mit $m \approx 0.88$ bereits eine deutliche Verbesserung gegenüber DMFT-Rechnungen mit $m = 1$. Ausgehend von Halbfüllung finden wir zunächst einen (kontinuierlichen) Phasenübergang in ein antiferromagnetisches Metall, ein weiterer Phasenübergang (erster Ordnung) in Verbindung mit Phasenseparation tritt bei größerer Dotierung auf. Um den Einfluss von Finite-Size-Effekten in unseren VCA-Rechnungen zu berücksichtigen, soll im Folgenden die Abhängigkeit der Resultate von Clustergröße und Clusterform untersucht werden. Konvergenz bzgl. der Modellgröße wird durch Verwendung von Gittern mit bis zu $N_{cl} = 50 \times 50$ (bzw. $N_{cl} = 100 \times 100$ mit $L_c = 4$) für ausgewählte Modellparameter überprüft. Bei der exakten Diagonalisierung der Cluster mit 8 bzw. 10 Plätzen muss zusätzlich die Konvergenz bzgl. der Anzahl der Lanczos-Iterationen M (siehe Kap. 3.3) beachtet werden. Ein Wert von $M = 100$ hat sich im Allgemeinen als ausreichend herausgestellt.

4.4.1 Bandlücke Δ und Phasenseparation

Der Einfluss der Clustergröße für ausgewählte Cluster mit $L_c = 4$ bis $L_c = 10$ ist in Abb. 4.12 für $U = 8$ dargestellt. Wir betrachten zunächst die Größe der Bandlücke in Abhängigkeit von der Clustergröße. Wie sich herausstellt, verkleinert sich das Gap Δ sowohl im Paramagneten als auch im Antiferromagneten mit zunehmender Clustergröße. Offenbar

wird durch Vergrößerung des Clusters eine bessere Beschreibung der niederenergetischen Anregungen im Ein-Teilchen-Spektrum ermöglicht. Die Abhängigkeit der Bandlücke von der Clustergröße tritt im Paramagneten stärker zum Vorschein als im Antiferromagneten. Dieses Resultat untermauert die Interpretation, dass räumliche Fluktuationen im Antiferromagneten eine geringere Bedeutung haben als im Paramagneten und bereits kleine Cluster eine gute Beschreibung des antiferromagnetischen Zustands liefern.

Neben der Abhängigkeit der Bandlücken Δ_{PM} und Δ_{AF} (d. h. der kritischen Werte der chemischen Potentiale μ_{PM} bzw. μ_{AF}) von der Clustergröße unterscheiden sich die in Abb. 4.12 dargestellten Resultate hauptsächlich dadurch, dass Phasenseparation für mittlere bis große Wechselwirkung nur unter Verwendung des ($L_c=4$)-Clusters zu beobachten ist. Die analogen Rechnungen mit Hilfe der Cluster $L_c = 8a$ und $L_c = 10a$ zeigen ebenfalls keine Phasenseparation. Der Fall $U = 8$ ist exemplarisch in Abb. 4.12 dargestellt, die Abwesenheit eines Koexistenzbereichs für unterschiedliche Wechselwirkung von $U = 8$ bis $U = 20$ kann durch weitere Rechnungen bestätigt werden. Der Bereich schwacher Wechselwirkung dagegen lässt keine klare Tendenz der Ergebnisse mit der Clustergröße erkennen. So ergibt die Auswertung mit $L_c = 8a$ für $U = 2$ einen phasenseparierten Zustand mit antiferromagnetischem Isolator, im Gegensatz dazu findet man unter Verwendung des ($L_c=4$)-Clusters eine stabile antiferromagnetische Lösung unabhängig von der betrachteten (Loch-)Dotierung (die Rechnung wurde durchgeführt bis $n \approx 0.5$). Eine vergleichbare Rechnung mit $L_c = 10a$ für $U = 4$ ergibt ebenfalls einen antiferromagnetischen Grundzustand ohne Auftreten von Phasenseparation. Auch für starke Wechselwirkung ($U = 50$) ergibt sich kein konsistentes Bild mehr. Während unter Verwendung des ($L_c=8a$)-Clusters eine stabile antiferromagnetische Lösung mit $m \approx 0.5$ für mehr als 10% Dotierung zu finden ist, ergibt die Rechnung mit $L_c = 4$ bereits für kleinere Dotierung einen Phasenübergang in den paramagnetischen Zustand. Die Daten für $L_c = 10a$ dagegen lassen einen Phasenübergang in ein paramagnetisches Metall vermuten. Der antiferromagnetische Ordnungsparameter m nimmt deutlich ab, bleibt allerdings endlich. Wegen der geringen Energiedifferenz zwischen Paramagnet und Antiferromagnet im Bereich starker Wechselwirkung ($J \rightarrow 0$) ist ein kleines Weiss-Feld ($h < 0.01$) bereits ausreichend, um einen Zustand mit antiferromagnetischer Ordnung zu erzeugen. Die numerische Auswertung für große U ist daher generell sehr instabil.

Neben der Abhängigkeit der Lösung von der Clustergröße darf auch der Einfluss der Clustergeometrie nicht vernachlässigt werden. Die Ergebnisse für $U = 8$ mit Nearest-Neighbor-Hopping sind in Abb. 4.12 (rechts) anhand der Cluster $L_c = 8a$ bis $L_c = 8c$ gegenübergestellt. Wie der Vergleich der Daten zeigt, wird die Bandlücke im Mott-Heisenberg-Isolator nur unwesentlich durch die Clusterform beeinflusst. Der Metall-Isolator-Übergang im Paramagneten sowie speziell die Existenz eines phasenseparierten Zustands reagieren dagegen sehr empfindlich auf die verschiedenen Clustergeometrien (d. h. hier zeigt sich eine vergleichbare Abhängigkeit der Daten wie von der Clustergröße). Besonders auffällig ist das Verhalten der Lösung bei Verwendung des ($L_c=8b$)-Clusters, nur hier zeigt sich ein Koexistenzbereich mit antiferromagnetischer und paramagnetischer Phase (möglicherweise ist die Ähnlichkeit zum ($L_c=4$)-Cluster entscheidend).

Als einheitliches Bild (unabhängig von der Wahl des Clusters) im Bereich mittlerer bis starker Wechselwirkung ($U = 8 - 20$) ergibt sich für $t' = 0$ der antiferromagnetische Mott-Heisenberg-Isolator bei Halbfüllung sowie ein Phasenübergang in ein antiferromagnetisches Metall. Ob ein weiterer Phasenübergang in ein paramagnetisches Metall als kontinuierlicher Phasenübergang auftritt oder im Zusammenhang mit Phasenseparation zu beobachten ist, hängt deutlich von der Clustergröße und Clustergeometrie ab. Die Daten unter Verwendung

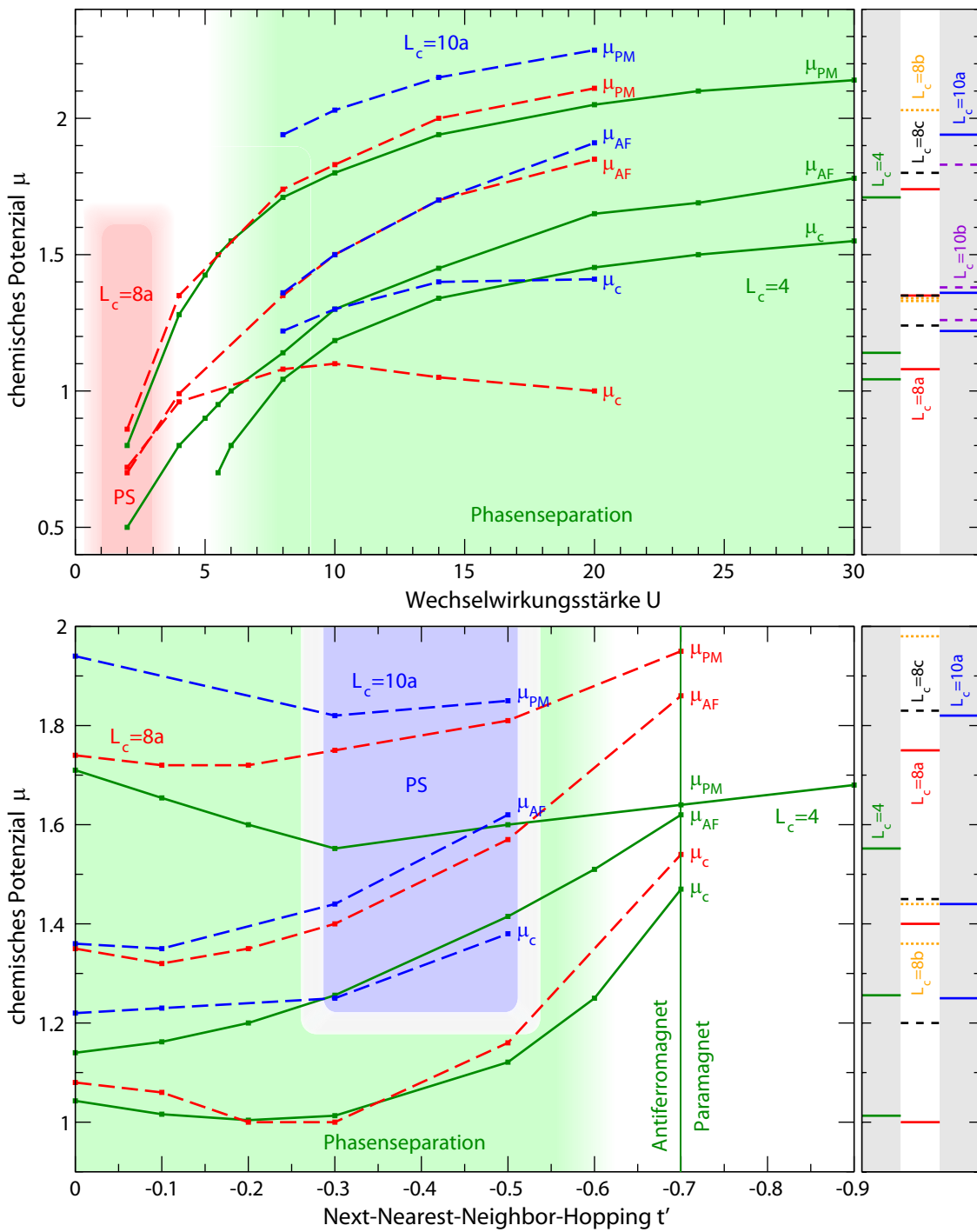


Abbildung 4.13: Verlauf der kritischen chemischen Potentiale μ_{PM} , μ_{AF} und μ_c als Funktion von U ($t'=0$, oben) und als Funktion von t' ($U=8$, unten). Der Parameterbereich, in dem Phasenseparation beobachtet wird, ist farblich hervorgehoben ($L_c=4$, grün; $L_c=8a$, rot; $L_c=10a$, blau). Eine detaillierte Gegenüberstellung der kritischen Werte für verschiedene Clustergrößen und Clustergeometrien ist für $U=8$, $t'=0$ und $U=8$, $t'=-0.3$ zu sehen (rechts). Zur Diskussion der Daten siehe Text.

	$L_c = 4$	$L_c = 8a$	$L_c = 8b$	$L_c = 8c$	$L_c = 10a$	$L_c = 10b$
$1 - 1/L_c$	0.75	0.88	0.88	0.88	0.90	0.90
$1 - B/(2L_c)$	0.50	0.56	0.63	0.63	0.60	0.65

Tabelle 4.1: Qualitätsfaktor für Finite-Size-Scaling mit und ohne Berücksichtigung der Clustergeometrie.

von Clustern mit 8 bzw. 10 Plätzen (mit Ausnahme des ($L_c=8b$)-Clusters) lassen einen kontinuierlichen Phasenübergang als wahrscheinlich erscheinen. Ein positiver Wert $t' = 0.3$ verhindert in jedem Fall das Auftreten eines Koexistenzbereichs, vielmehr wird dann die antiferromagnetische metallische Phase stabilisiert. Dagegen reagiert das Modellsystem auf negative Werte des Next-Nearest-Neighbor-Hoppings kritischer. Obwohl mit Hilfe des ($L_c=10a$)-Clusters keine Phasenseparation für $U = 8$ bei $t' = 0$ zu finden ist, kann durch Einschalten des Next-Nearest-Neighbor-Hoppings im Bereich $t' \approx -0.3$ bis $t' \approx -0.5$ ein Koexistenzbereich beobachtet werden (eine dritte Lösung wie in der Rechnung mit $L_c = 4$ in der Umgebung des Koexistenzbereichs deutet sich bereits für $t' = 0$ an). Die Daten für $t' = -0.7$ weisen auf die Abwesenheit eines phasenseparierten Zustands hin, allerdings wurden für diesen Parameterwert keine detaillierten Rechnungen mehr durchgeführt.

Eine Zusammenfassung unserer Daten ist in Abb. 4.13 mit Hilfe der kritischen chemischen Potentiale μ_{PM} , μ_{AF} und μ_c gezeigt. Der Parameterbereich, in dem Phasenseparation unter Verwendung des ($L_c=4$)-Clusters gefunden werden kann, ist farblich hervorgehoben. Es ist sowohl die Abhängigkeit von U für $t' = 0$ (Abb. 4.13, oben) als auch der Verlauf der kritischen chemischen Potentiale als Funktion von t' für $U = 8$ (Abb. 4.13, unten) dargestellt. Auffallend ist die bereits diskutierte gute Übereinstimmung von μ_{AF} für unterschiedliche Clustergrößen und Clustergeometrien sowohl als Funktion von U als auch in Abhängigkeit von t' , der Verlauf von μ_{PM} und μ_c ist zumindest qualitativ vergleichbar (der ($L_c=4$)-Cluster bildet eine Ausnahme).

4.4.2 Analyse der Finite-Size-Effekte

Exemplarisch haben wir das Modellsystem abhängig von der Wahl des Clusters besonders intensiv für die Parameterwerte $U = 8$, $t' = 0$ bzw. $U = 8$, $t' = -0.3$ untersucht (Abb. 4.13, rechts). Aufgrund der großen Streuung der Werte μ_{PM} , μ_{AF} bzw. μ_c ist ein Finite-Size-Scaling anhand der Clustergröße allein nicht möglich. Der Vorschlag von Sénéchal [31], anstelle einer Auftragung der Daten gegenüber der Clustergröße in der Form $1 - 1/L_c$ den Ausdruck $1 - B/(2L_c)$ (mit der Anzahl B der Verbindungen zwischen nächsten Nachbarn soll der Clustergeometrie Rechnung getragen werden) zu verwenden, lässt ebenfalls keine klare Tendenz erkennen. Für die Cluster $L_c = 4$, $L_c = 8b$ und $L_c = 10a$ kann zusätzlich die Größe Δn (siehe Abb. 4.5) für $U = 8$ und $t' = -0.3$ mit Finite-Size-Scaling ausgewertet werden, eine zuverlässige Aussage ist jedoch ebenfalls nicht möglich.

Die Qualitätsfaktoren $1 - 1/L_c$ und $1 - B/(2L_c)$ für die verwendeten Cluster sind in Tab. 4.1 zusammengestellt. Die günstigsten Werte unter Berücksichtigung der Clustergeometrie ergeben sich für $L_c = 8c$ und $L_c = 10b$, in Einklang mit der guten Übereinstimmung unserer VCA-Rechnungen für diese Cluster. Gemessen am Qualitätsfaktor $1 - B/(2L_c)$ ist der ($L_c=8c$)-Cluster sogar dem ($L_c=10a$)-Cluster zu bevorzugen. Allerdings ist auch darauf hinzuweisen, dass die Cluster $L_c = 8b$ und $L_c = 8c$ identische Werte für beide Qualitätsfaktoren liefern, obwohl eine deutliche Abweichung in den Ergebnissen zu verzeichnen

	$E_{0,\text{PM}} - E_{0,\text{AF}}$	$E_{\text{kin,PM}} - E_{\text{kin,AF}}$
$L_c = 4$	0.048	0.100
$L_c = 10a$	0.043	0.070
$L_c = 10b$	0.032	0.054

Tabelle 4.2: Differenz der Grundzustandsenergien ΔE_0 und kinetischen Energien ΔE_{kin} zwischen Paramagnet und Antiferromagnet bei Halbfüllung ($U = 8, t' = 0$) für ausgewählte Cluster.

ist.

Die Energiedifferenz zwischen Paramagnet und Antiferromagnet („Kondensationsenergie“) bei Halbfüllung ist in Tab. 4.2 aufgelistet. Es ist eine Abnahme der Energiedifferenz mit Verwendung eines größeren bzw. günstigeren Clusters (vergl. die Qualitätsfaktoren Tab. 4.1) zu erkennen. Da antiferromagnetische Korrelationen innerhalb des Clusters bereits exakt behandelt werden, erwartet man im Limes $L_c \rightarrow \infty$ nur noch eine Lösung vorzufinden. Die Energiedifferenz zwischen paramagnetischer und antiferromagnetischer Lösung verringert sich folglich mit Vergrößerung des Clusters (die Clustergeometrie ist natürlich zu berücksichtigen).

Abschließend soll der Einfluss der Clustergröße und Clustergeometrie auf Phasenseparation anhand der Ladungssuszeptibilität κ diskutiert werden. Eine Berechnung der Ladungssuszeptibilität kann mit Hilfe des Ausdrucks

$$\frac{\partial n}{\partial \mu} = \frac{1}{L} \frac{\partial}{\partial \mu} \sum_i \frac{\text{tr} \left[e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \hat{n}_i \right]}{\text{tr} e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})}} = \frac{\beta}{L} \sum_{ij} (\langle \hat{n}_i \hat{n}_j \rangle - \langle \hat{n}_i \rangle \langle \hat{n}_j \rangle) \quad (4.12)$$

erfolgen. Eine Betrachtung der Korrelationsfunktion

$$N(\mathbf{k}) = \langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \hat{n}_{-\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{L} \sum_{ij} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \langle \hat{n}_i \hat{n}_j \rangle \quad (4.13)$$

lässt erkennen, dass die Divergenz der Kompressibilität gleichbedeutend ist mit der Divergenz von $N(\mathbf{k} \rightarrow 0)$ [45]. Da folglich \mathbf{k} -Vektoren in einer Umgebung von $\mathbf{k} = 0$ zur Untersuchung von Phasenseparation entscheidend sind, sind Finite-Size-Effekte bei der Verwendung endlicher Cluster zu erwarten.

Mit Hilfe der VCA als Clusternäherung im Rahmen der SFT ist es uns zwar gelungen, Phasenübergänge im $2D$ -Hubbard-Modell in der Nähe von Halbfüllung zu untersuchen. Finite-Size-Effekte sowie der Einfluss der Clusterfüllung auf die Ergebnisse lassen eine eingehende Analyse verschiedener Referenzsysteme angebracht erscheinen. Da in $D = 2$ keine exakten Resultate zum Vergleich vorliegen, beschäftigen wir uns im folgenden Kapitel mit dem $1D$ -Hubbard-Modell. Neben des Einflusses der Clustergröße soll auch die Wahl der Variationsparameter genauer betrachtet werden, als neuer Aspekt im Zusammenhang mit Dotierung wird die Verwendung zusätzlicher (unkorrelierter) Bad-Plätze diskutiert.

Kapitel 5

Das 1D-Hubbard-Modell: Eine Analyse der Clusternäherungen

Die Verwendung von Clustermethoden basiert entscheidend auf der Idee, dass die Physik des Mott-Übergangs, oder zumindest die Physik des Mott-Isolators, neben lokalen (zeitlichen) Korrelationen durch die Effekte *kurzreichweitiger* Korrelationen dominiert wird, welche auf Clusterebene exakt behandelt werden. Da gerade diese nichtlokalen Korrelationen an Bedeutung gewinnen, wenn die Dimension des betrachteten Modells verringert wird, sind folglich die Anforderungen an Clustermethoden in $D = 1$ am größten. Im Idealfall, ausgehend vom (dynamischen) Mean-Field-Szenario, werden die wesentlichen Aspekte kurzreichweitiger Korrelationen bereits durch den kleinstmöglichen Cluster berücksichtigt, während der Übergang zu größeren Clustern nur qualitativ unbedeutende Verbesserungen liefert.¹ Da das eindimensionale Hubbard-Modell mit Hilfe des Bethe-Ansatzes [20] und der Density-Matrix Renormalization Group (DMRG) [23, 61] exakt lösbar ist, bietet es eine ideale Grundlage zur Überprüfung obiger Aussagen sowie zum Vergleichen verschiedener Clusternäherungen.

Unser Ziel ist es also, den durch Wechselwirkung und Bandfüllung getriebenen Metall-Isolator-Übergang des 1D-Hubbard-Modells im Rahmen der SFT mit Hilfe unterschiedlicher Referenzsysteme zu untersuchen. In Ergänzung zu den Rechnungen in $D = 2$ soll auch der Einfluss zusätzlich eingeführter (unkorrelierter) Bad-Plätze untersucht werden. Eine offensichtliche Frage in diesem Zusammenhang betrifft die Konvergenz der Lösung zum exakten Wert (Limes $L_c \rightarrow \infty$) mit der Clustergröße L_c . Abhängig von der Clustermethode und der betrachteten (physikalischen) Größe lässt sich eine exponentielle Abhängigkeit von L_c oder ein Potenzgesetz ableiten [62, 63, 64, 65]. Diese Überlegungen finden allerdings nur Anwendung im Limes großer Cluster, während für die praktische Auswertung die Qualität einer gegebenen Clusternäherung mit wenigen Clusterplätzen L_c wesentlich mehr Relevanz hat. Die Güte einer solchen Näherung lässt sich nur *a posteriori* abschätzen.

Es ist ebenfalls unklar, ob die Einführung von Bad-Plätzen Clusterverfahren effizienter macht, d. h. die Konvergenz zur exakten Lösung beschleunigt (siehe [28]). Insbesondere gewinnt dieser Aspekt wegen des exponentiellen Anwachsens des Hilbert-Raums mit zunehmender Anzahl von Bad-Plätzen an Bedeutung, gerade wenn Verfahren benutzt werden, die auf exakter Diagonalisierung basieren. Die Einführung von Bad-Plätzen ist allerdings

¹Als Beispiel sei hier der Einfluss räumlicher Korrelationen in $D = 2$ genannt, die bereits bei Verwendung des 2×2 -Clusters zu einer deutlichen Verringerung des antiferromagnetischen Ordnungsparameters gegenüber dem Mean-Field-Wert $m(U \rightarrow \infty) = 1$ geführt haben (siehe Kap. 4.1).

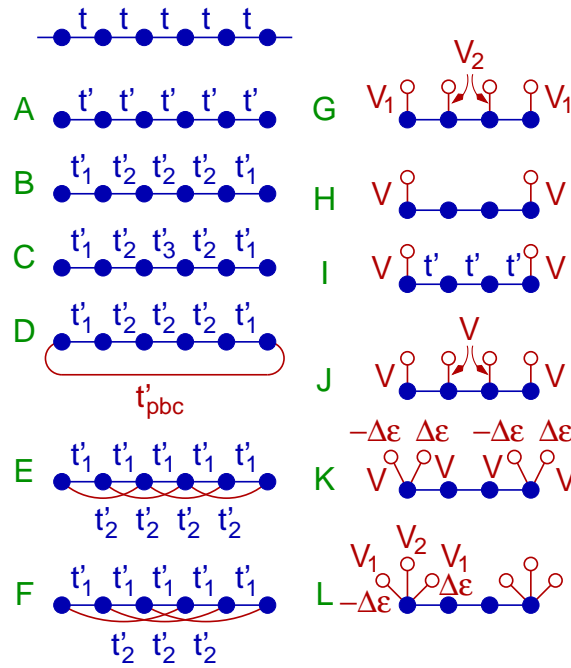


Abbildung 5.1: Ursprüngliches Modellsystem (1D-Hubbard-Modell mit Nearest-Neighbor-Hopping t) und die im Rahmen der SFT-Rechnungen verwendeten Referenzsysteme. Die jeweils betrachteten Variationsparameter sind angegeben, eine detaillierte Diskussion der einzelnen Referenzsysteme ist im Text zu finden.

nicht nur in Bezug auf die Konvergenzeigenschaften von Clusterverfahren interessant, ein wesentlicher Aspekt betrifft auch die Rolle der Bad-Plätze als Ladungsreservoirs.

Wir betrachten im Folgenden als Referenzsysteme identische Cluster mit L_c korrelierten Plätzen, allgemein definiert durch

$$\begin{aligned}
 \hat{H}' = & -t \sum_{i=2}^{L_c} \sum_{\sigma} \left(\hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i-1\sigma} + \text{H.c.} \right) \\
 & + (\varepsilon - \mu) \sum_{i=1}^{L_c} \sum_{\sigma} \hat{n}_{i\sigma} + U \sum_{i\sigma} \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \\
 & + \sum_{i=1}^{L_c} \sum_{\nu=2}^{n_s(i)} \sum_{\sigma} \left[\varepsilon_{i\nu} \hat{a}_{i\nu\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{i\nu\sigma} + \left(V_{i\nu} \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{i\nu\sigma} + \text{H.c.} \right) \right]. \quad (5.1)
 \end{aligned}$$

Dabei gibt $n_s(i) - 1$ die Anzahl der Bad-Plätze pro korreliertem Platz an, im Allgemeinen ist $n_s(i)$ vom betrachteten Gitterplatz abhängig. Die Operatoren \hat{a} bzw. \hat{a}^{\dagger} sind nur auf den Bad-Plätzen definiert. Ausgehend von dieser Definition des Clusters können eine Reihe unterschiedlicher Referenzsysteme durch die Wahl von L_c und $n_s(i)$ konstruiert werden. Die Anzahl der Variationsparameter wird üblicherweise auf wenige physikalisch motivierte Parameter eingeschränkt.

Die im folgenden Kapitel verwendeten Referenzsysteme sind in Abb. 5.1 aufgelistet. Wir beginnen unsere Rechnungen zunächst mit dem halbgefüllten 1D-Hubbard-Modell und gehen dann im weiteren Verlauf unserer Diskussion auf das dotierte System ein.

5.1 Mott-Isolator bei Halbfüllung

Ein entscheidender Vorteil der VCA liegt in der Flexibilität, Näherungen von unterschiedlicher Qualität und Komplexität durch entsprechende Wahl des Referenzsystems zu konstruieren. Das einfachste Referenzsystem in $D = 1$ besteht aus entkoppelten Clustern (Ketten) mit je L_c korrelierten Plätzen, für die nur das Intra-Cluster-Hopping t' (siehe Abb. 5.1, A) als Variationsparameter optimiert wird. Das Hopping wird unabhängig vom Clusterplatz zwischen allen benachbarten Plätzen identisch gewählt. Der Parameterraum ist somit eindimensional und ein Extremum in $\Omega_t(t') \equiv \Omega_t[\Sigma(t')]$ definiert die physikalische Selbstenergie innerhalb der Approximation. Es werden nur Cluster mit gerader Anzahl L_c an Plätzen betrachtet, um Kramers-Entartung des Grundzustands auszuschließen und Odd-Even-Effekte beim Vergleich verschiedener Clustergrößen zu vermeiden.

Ein weiterer Variationsparameter, der in Frage kommt, ist die On-Site-Energie ε . Wird die On-Site-Energie auf allen Clusterplätzen in gleicher Weise variiert, wirkt diese wie ein eigenes chemisches Potenzial für den Cluster. Dieser Variationsparameter ist entscheidend für die thermodynamische Konsistenz bei der Berechnung der Teilchendichte n (siehe Kap. 3.1.3). Die Untersuchung wird zunächst für den Mott-Isolator bei Halbfüllung ($\mu = U/2$) vorgenommen. Aufgrund von Teilchen-Loch-Symmetrie ist die On-Site-Energie als Variationsparameter durch den Wert im Modellsystem gegeben, d. h. im vorliegenden Fall durch $\varepsilon = 0$ (vergl. Kap. 4.1). Innerhalb der VCA-Rechnungen lässt sich dieses Ergebnis explizit reproduzieren. Wie sich herausstellt, besitzt $\Omega_t[\Sigma(\varepsilon)]$ immer ein Maximum bei $\varepsilon = 0$.

Zusätzliche symmetriebrechende (Weiss-)Felder, die an den lokalen Spin oder die lokale Ladungsdichte ankoppeln, werden nicht in Betracht gezogen. Da diese Kopplungen im Ein-Teilchen-Anteil des Hamiltonians enthalten sind, können sie im Prinzip als weitere Variationsparameter in Frage kommen [41]. Allerdings deutet ein endlicher Wert eines solchen optimierten Felds langreichweitige Spin- oder Ladungsordnung an, die im eindimensionalen Hubbard-Modell nicht vorhanden ist oder, z. B. im Fall von Ferromagnetismus, hier nicht betrachtet werden soll. In Bezug auf Antiferromagnetismus zeigt die VCA das korrekte Resultat ($m = 0$) für genügend große Cluster.

5.1.1 Optimierung der Hopping-Parameter: Grundzustandsenergie

Ein nichttriviales Ergebnis ($t' \neq t$) zeigt sich bei Optimierung des Nearest-Neighbor-Hoppings, wie Abb. 5.2 zu entnehmen ist. Die physikalische Motivation für die Optimierung von t' findet sich darin, dass das Ausschalten des Inter-Cluster-Hoppings (wodurch die approximierten (Cluster-)Selbstenergie bestimmt wird) teilweise durch Vergrößerung des Intra-Cluster-Hoppings kompensiert werden kann. Der Effekt kann in Abb. 5.2 tatsächlich beobachtet werden, das optimale Hopping t' ist größer als das physikalische Hopping t . Dieser Trend wird für verschiedene Clustergrößen und Wechselwirkungsstärken U gefunden. Der Effekt ist umso größer, je kleiner der Cluster gewählt wird. Desweiteren zeigt sich, dass für große Wechselwirkung (und der damit verbundenen stärkeren Lokalisierung der Elektronen) ein Ausschalten des Inter-Cluster-Hoppings einen geringeren Einfluss hat. Besonders deutlich macht sich daher die Näherung bei Verwendung des kleinsten Clusters ($L_c = 2$) und im Limes $U \rightarrow 0$ bemerkbar, zu erkennen an der starken Zunahme (mehr als 100%) von t' im Vergleich zu t .

Auf der anderen Seite ist sogar eine „grobe“ Näherung der Selbstenergie (gemessen an der starken Abweichung des Parameters t' von t) im Limes schwacher Kopplung irrelevant, da für $U = 0$ für die Selbstenergie $\Sigma(\omega) \equiv 0$ gilt. So gesehen ist es nicht überraschend,

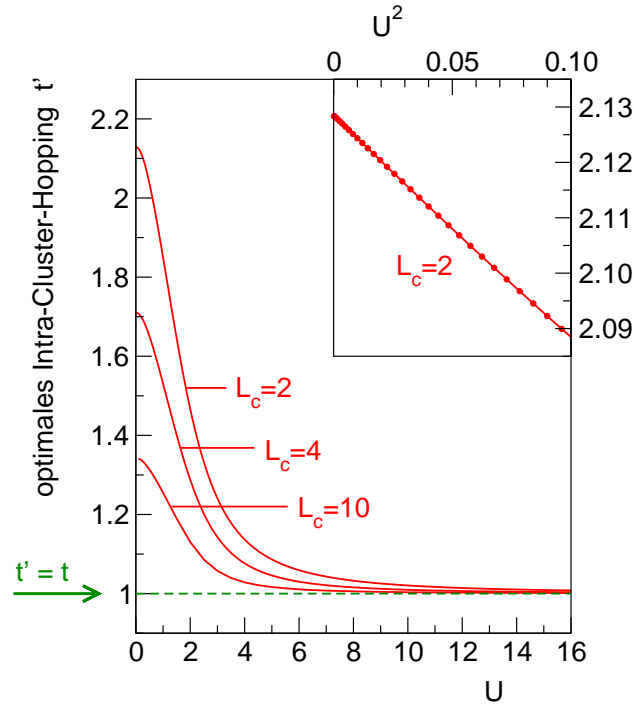


Abbildung 5.2: Abhängigkeit des optimalen Intra-Cluster-Hoppings t' für verschiedene Clustergrößen L_c . VCA-Rechnungen mit Hilfe des Referenzsystems Abb. 5.1, A bei Halbfüllung ($\mu = U/2$). Die Einheiten sind durch das physikalische Hopping $t = 1$ festgelegt. (Inset) Optimales t' als Funktion von U^2 für $U \rightarrow 0$.

dass die VCA im Grenzfall $U = 0$ das exakte Ergebnis liefert. Die approximierte Green-Funktion $\mathbf{G}(\omega) = (\mathbf{G}_0(\omega)^{-1} - \mathbf{\Sigma}(\omega))^{-1}$ wird daher ebenfalls exakt für $U = 0$, das Gleiche gilt für das großkanonische Potenzial Ω und die Grundzustandsenergie $E_0 = \Omega + \mu N$. Die Grundzustandsenergie als Funktion der Wechselwirkungsstärke ist in Abb. 5.3 dargestellt, das exakte Ergebnis des Bethe-Ansatzes (siehe Gl. 2.7) ist zum Vergleich angegeben. Sowohl die Rechnung unter Verwendung des kleinsten Clusters $L_c = 2$ als auch mit Hilfe des deutlich größeren Clusters $L_c = 10$ zeigen das korrekte Resultat für $U = 0$. Abweichungen sind für starke Wechselwirkung zu beobachten. Wie erwartet ergibt der ($L_c=10$)-Cluster die wesentlich bessere Näherung.

Abb. 5.4 zeigt im Detail, wie der Limes $U \rightarrow 0$ erreicht wird. Für große Wechselwirkung $U = 10$ hat die Funktion $\Omega_t(t')$ ein Minimum bei $t' \approx t$. Mit abnehmender Wechselwirkung weicht der Variationsparameter t' zunehmend vom physikalischen t ab. Gleichzeitig wird aber auch die Funktion $\Omega_t(t')$ immer flacher, und im Limes $U \rightarrow 0$ hat der Wert von t' keinerlei Bedeutung mehr, da für die Selbstenergie $\mathbf{\Sigma}(\omega) \equiv 0$ unabhängig von t' gilt.

Für endliche Wechselwirkung U bestimmt die Größe des Clusters die Qualität der Näherung. Die Abhängigkeit der Grundzustandsenergie E_0 von der Clustergröße für festes U ist in Abb. 5.5 zu sehen. Eine Darstellung von E_0 als Funktion von $1/L_c$ erlaubt die Extrapolation der Grundzustandsenergie für $1/L_c = 0$. Im Vergleich zur „direkten“ Clustermethode, bei der die Grundzustandsenergie des Modellsystems durch die Grundzustandsenergie einer endlichen Kette (offene Randbedingungen) genähert wird, zeigt die VCA-Rechnung eine deutliche Verbesserung. Das bedeutet eine schnellere Konvergenz zur Grundzustandsenergie mit zunehmender Clustergröße. Wie die Gegenüberstellung der Ergebnisse für $U = 4$

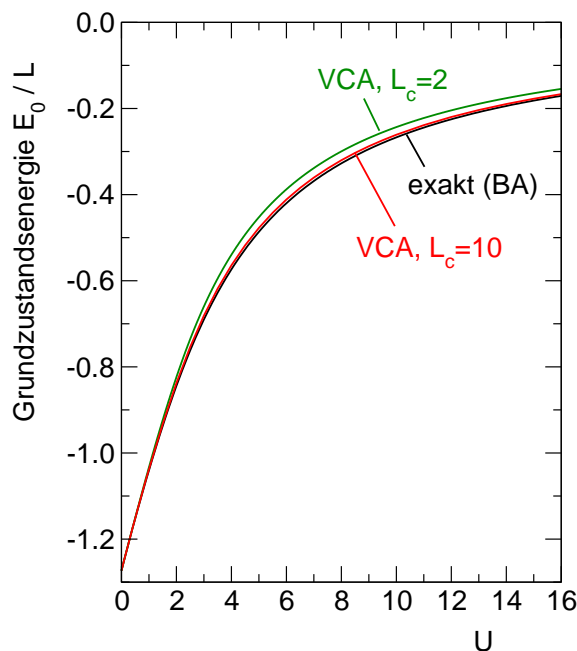


Abbildung 5.3: Grundzustandsenergie E_0 (pro Platz) als Funktion der Wechselwirkung U für Cluster mit $L_c = 2$ und $L_c = 10$ Plätzen (siehe Abb. 5.1, A). Die exakte Bethe-Ansatz-Lösung (Gl. 2.7) ist zum Vergleich dargestellt.

und $U = 8$ erkennen lässt, kommt dieser Vorteil stärker bei der Betrachtung schwacher Wechselwirkung zum Tragen. Während die VCA im Limes $U \rightarrow 0$ exakt wird, stellt die „direkte“ Clustermethode weiterhin eine Näherung dar.

Die CPT [30, 66] kann als Spezialfall der VCA angesehen werden, sofern als Referenzsystem entkoppelte Cluster verwendet werden, deren Ein-Teilchen-Parameter nicht optimiert werden, sondern auf die ursprünglichen Werte (des Modellsystems) gesetzt werden (siehe Kap. 3.1.1). Das beinhaltet allerdings auch als Einschränkung für die CPT, dass z. B. antiferromagnetische Ordnung in $D = 2$ nicht beschrieben werden kann. Wie Abb. 5.4 zu entnehmen ist, wird durch die Optimierung von t' Bindungsenergie gewonnen, d. h. $\Omega_{\mathbf{t}}(t') < \Omega_{\mathbf{t}}(t)$ für optimales t' . Das bedeutet eine Verbesserung unserer VCA-Rechnung gegenüber der CPT-Rechnung. Es ist allerdings zu bemerken, dass dieser Energiegewinn verhältnismäßig klein ist und auf der Skala in Abb. 5.5 kaum zu sehen wäre.

Es ist ebenfalls zu beachten, dass der Wert E_0 der VCA-Rechnung *a priori* keine obere Schranke für die Grundzustandsenergie E_0 darstellt, obwohl dieser in Abb. 5.5 immer über dem exakten Wert liegt [67]. In diesem Sinn ist die „direkte“ Clustermethode überlegen, da hier unter Bezugnahme auf das Ritzsche Variationsprinzip E_0 auf jeden Fall eine obere Schranke liefert. Dieser Umstand muss allerdings als genereller Nachteil variationeller Verfahren gesehen werden, die nicht vom Ritzschen Prinzip abgeleitet werden können.

5.1.2 Ein-Teilchen-Anregungen

Die VCA leitet sich von einem dynamischen Variationsprinzip ab, das auf der Ein-Teilchen-Selbstenergie als grundlegender Variabler basiert. Davon ausgehend ist zu vermuten, dass Ein-Teilchen-Anregungen im Rahmen der VCA deutlich besser vorhergesagt werden als mit Hilfe der „direkten“ Clustermethode. Um diese Vermutung zu untersuchen, wird die

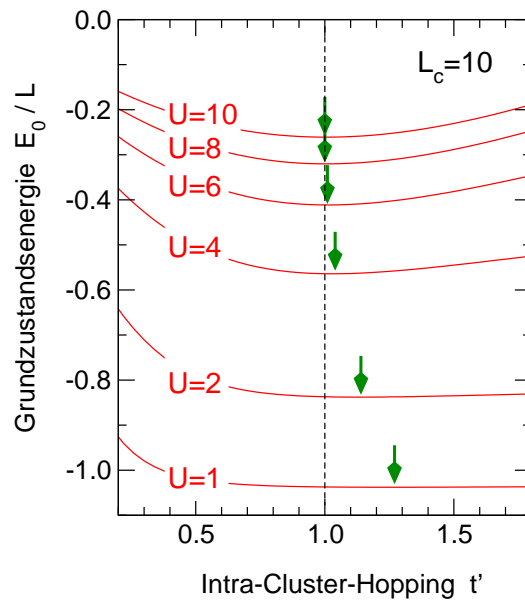


Abbildung 5.4: Darstellung der Grundzustandsenergie (pro Platz) als Funktion $E_0(t') = \Omega_t(t') + \mu N$ des Nearest-Neighbor-Hoppings t' für verschiedene Wechselwirkungsstärken U . Die optimalen Parameterwerte für t' sind durch Pfeile gekennzeichnet.

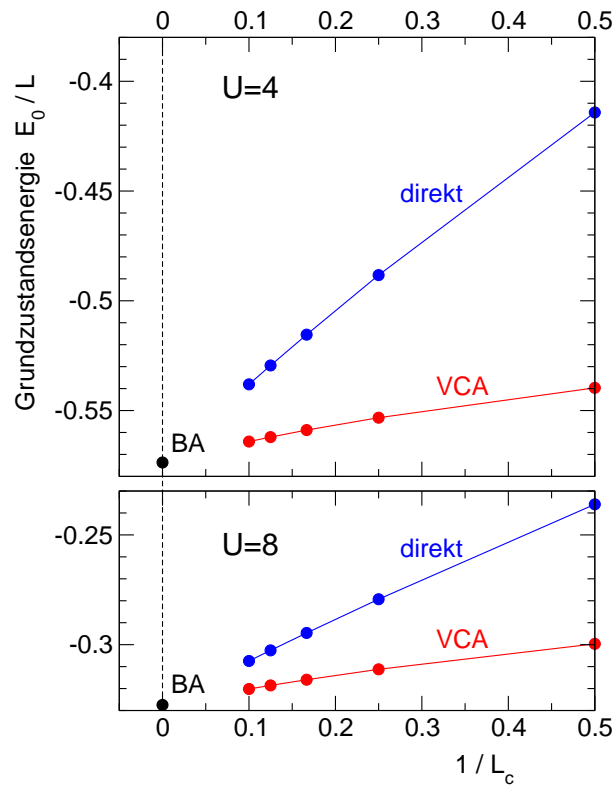


Abbildung 5.5: Grundzustandsenergie (pro Platz) unserer VCA-Rechnungen unter Verwendung unterschiedlicher Clustergrößen L_c als Funktion von $1/L_c$ im Vergleich mit exakter Bethe-Ansatz-Lösung und „direkter“ Clustermethode. Ergebnisse für $U = 4$ (oben) und $U = 8$ (unten).

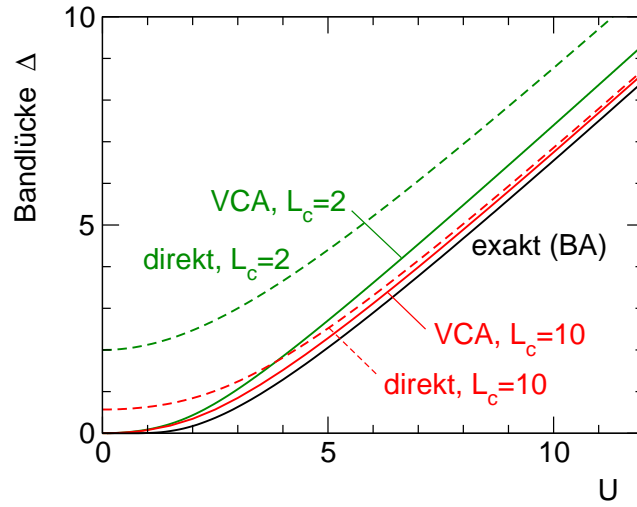


Abbildung 5.6: Darstellung des Gaps Δ im Ein-Teilchen-Anregungsspektrum als Funktion der Wechselwirkungsstärke U für Cluster mit $L_c = 2$ und $L_c = 10$ (Referenzsystem Abb. 5.1, A). Abgebildet sind die Ergebnisse der VCA-Rechnung im Vergleich mit der „direkten“ Clustermethode und dem exakten Ergebnis gemäß Gl. 2.8.

Bandlücke im Ein-Teilchen-Anregungsspektrum des Isolators betrachtet. Die exakte Abhängigkeit des Gaps Δ von der Wechselwirkung U ist durch Gl. 2.8 gegeben. Unter Verwendung der \mathbf{Q} -Matrizen sind die Pole der Green-Funktion mit endlichem Gewicht durch die Eigenwerte der Matrix \mathbf{M} festgelegt (siehe Gl. 3.34). Die Bandlücke wird definiert durch den Abstand zwischen dem Pol bei minimalem ω im IPES-Anteil und dem Pol bei maximalem ω im PES-Anteil des Spektrums. Die deutliche Verbesserung gegenüber der „direkten“ Clustermethode für die Cluster mit $L_c = 2$ als auch mit $L_c = 10$ kann Abb. 5.6 entnommen werden. Im Bereich mittlerer bis starker Wechselwirkung liegen die Ergebnisse unter Verwendung des ($L_c=10$)-Clusters nahe am exakten Wert für Δ . Bezieht man die Werte für $L_c = 2$ mit ein, so ist auch ein Finite-Size-Scaling denkbar. Für schwache Kopplung ($U \lesssim 2$) führt eine Vergrößerung des Clusters allerdings nicht weiter zu einer signifikanten Verbesserung der Resultate. Obwohl das Gap in unseren VCA-Rechnungen für $U \rightarrow 0$ gegen $\Delta = 0$ geht, wird der Wert von Δ im Vergleich zur exakten Bethe-Ansatz-Lösung deutlich überschätzt. Der relative Fehler zeigt sogar divergentes Verhalten für $U \rightarrow 0$.

Mit Hilfe des Insets in Abb. 5.2 soll das Verhalten in der Nähe des kritischen Punkts $U = 0$ genauer diskutiert werden. Das optimale Intra-Cluster-Hopping t' verhält sich für $U \rightarrow 0$ wie $t' = t'_0 + \text{const.} \times U^2 + \mathcal{O}(U^3)$ mit endlichem t'_0 . Daraus lässt sich schließen, dass Eigenenergien und Anregungsenergien sowie die Eigenzustände des Clusters und damit die spektralen Gewichte im Grenzfalle $U \rightarrow 0$ analytisch (für $L_c < \infty$) von U abhängen. Diese Eigenschaft überträgt sich auf die VCA-Green-Funktion $\mathbf{G}(\omega)$, da die Green-Funktion des Modellsystems durch die Cluster-Green-Funktion $\mathbf{G}'(\omega)$ in der Form $\mathbf{G}(\omega) = (\mathbf{G}'(\omega)^{-1} - (\mathbf{t} - \mathbf{t}'))^{-1}$ (Gl. 3.17) ausgedrückt werden kann. Aufgrund der (eingeschränkten) Translationsinvarianz bzgl. des Supergitters ist die Matrixinversion nur für Matrixblöcke endlicher Größe durchzuführen (siehe Kap. 3.1.2 und 3.2.3). Ein-Teilchen-Korrelationsfunktionen, die Grundzustandsenergie usw. hängen daher im Rahmen der VCA-Rechnungen für $U \rightarrow 0$ analytisch von U ab. Das Gleiche gilt für das Gap Δ im Ein-Teilchen-Anregungsspektrum, während sich die exakte Lösung für $U \rightarrow 0$ nicht analytisch als Funktion der Wechselwirkungsstärke verhält (siehe Gl. 2.8 und 2.9). Die Feststellung,

dass ein exaktes nichtanalytisches Verhalten mit Hilfe der VCA nicht reproduziert werden kann, muss als generelles Problem von Clustertechniken gesehen werden unabhängig von der speziellen Wahl einer Methode. Qualitative Änderungen an einem kritischen Punkt, die sich durch den Grenzübergang $L_c \rightarrow \infty$ ergeben, können daher allgemein durch Verfahren, die auf endlichen Clustern basieren, nicht erfasst werden.

5.1.3 Unabhängige Optimierung mehrerer Variationsparameter

Bislang haben wir in unseren Rechnungen die Optimierung auf einen einzigen Variationsparameter beschränkt. Die Verwendung weiterer Variationsparameter kann aus mehreren Gründen sinnvoll sein. Zum einen ist zu beachten, dass die optimale Selbstenergie, die durch im Ortsraum formulierte Clustermethoden bestimmt wird, nicht die volle Translationssymmetrie des ursprünglichen Gitters widerspiegelt und dass Finite-Size-Effekte am ausgeprägtesten am Clusterrand erwartet werden. Die Verwendung von Referenzsystemen mit platz- oder bindungsabhängigen Variationsparametern ist daher eine logische Konsequenz. Eine offensichtliche Wahl der Variationsparameter im Fall von Teilchen-Loch-Symmetrie ist durch das Referenzsystem in Abb. 5.1, B gegeben. Die Intra-Cluster-Hopping-Parameter am Rand des Clusters werden als unabhängige Variationsparameter optimiert. Im Referenzsystem Abb. 5.1, C werden weitere bzw. alle Hopping-Parameter unabhängig variiert.

In Abb. 5.7 sind die Ergebnisse für $U = 4$ dargestellt. Die Unterschiede zwischen den optimalen Werten der verschiedenen Hopping-Parameter sind kleiner als 10%. Am Clusterrand ist das Hopping erhöht, um die eingeschränkte Beweglichkeit der Elektronen durch das Ausschalten des Inter-Cluster-Hoppings zu kompensieren. Mit zunehmendem Abstand zum Clusterrand nimmt der optimale Wert der Hopping-Parameter rapide ab. Allgemein ist bereits der Wert des dritten Hopping-Parameters vergleichbar mit dem physikalischen Hopping t . Das Ergebnis unter Verwendung des ($L_c=10$)-Clusters mit unabhängiger Optimierung aller (fünf) verschiedenen Hopping-Parameter (orange Kreise in Abb. 5.7) zeigt geringfügige Oszillationen um den Mittelwert im Clusterinneren, vergleichbar mit Friedel-Oszillationen in der Nähe von Oberflächen.

Der (approximierte) Wert des großkanonischen Potentials Ω ist für den inhomogenen Fall niedriger als für den homogenen Fall (schwarze Kreise). Generell ist die Absenkung von Ω umso größer, je mehr Variationsparameter in Betracht gezogen werden. Allerdings ist der Energiegewinn durch Verwendung unabhängiger Hopping-Parameter deutlich geringer als die Energieabsenkung, die durch Vergrößerung des Clusters erreicht werden kann. Ebenfalls lässt sich nur eine unwesentliche Verbesserung für den Wert des Gaps Δ feststellen.

Die Hinzunahme eines weiteren Variationsparameters t_{pbc} , der die Kettenränder verbindet (Abb. 5.1, D), führt immer auf ein Minimum des großkanonischen Potentials für $t_{\text{pbc}} = 0$. Daraus ist zu schließen, dass offene Randbedingungen gegenüber periodischen Randbedingungen (d. h. $t_{\text{pbc}} = 1$) zu bevorzugen sind (siehe [28]).

Mit Hilfe des Referenzsystems Abb. 5.1, E lässt sich überprüfen, inwieweit sich magnetische Frustration im Referenzsystem ausbilden kann. Ein endliches Hopping t'_2 zwischen übernächsten Nachbarn führt im Limes $U \rightarrow \infty$ (Heisenberg-Modell) auf einen antiferromagnetischen Next-Nearest-Neighbor-Austausch J_2 (siehe Kap. 2.2.2) und damit zu einer Frustration der antiferromagnetischen (kurzreichweitigen) Ordnung in $D = 1$. Dadurch wäre zum Teil eine Kompensation magnetischer Eigenschaften möglich, die aus dem permanenten Mean-Field-Charakter der VCA resultieren. Andererseits würde dadurch die Teilchen-Loch-Symmetrie verletzt werden. Die explizite Rechnung zeigt jedoch, dass das großkanonische Potenzial einen Sattelpunkt mit $t'_2 = 0$ hat (es handelt sich um ein Mini-

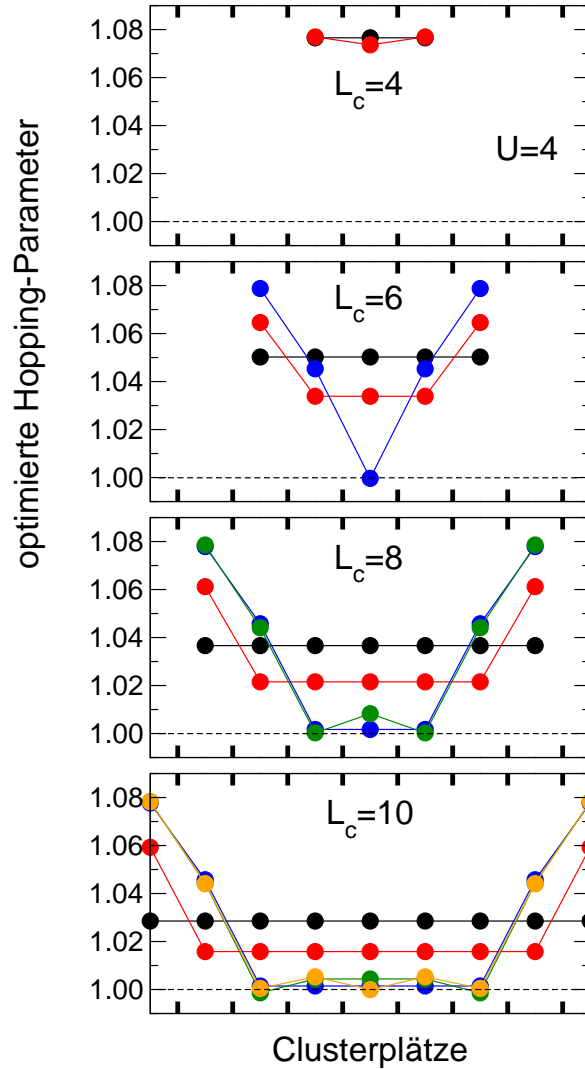


Abbildung 5.7: Optimale Hopping-Parameter für die Referenzsysteme Abb. 5.1, A, B und C für $U = 4$ und Clustergrößen von $L_c = 4$ bis $L_c = 10$ wie angegeben ($t = 1$ im Modellsystem). Optimierung eines einzigen Hopping-Parameters identisch für alle benachbarten Clusterplätze: A, schwarz. Zwei unabhängige Variationsparameter, das Nearest-Neighbor-Hopping an beiden Clusterrändern bzw. die identisch gewählten Hopping-Parameter im Clusterinneren: B, rot. Unabhängige Wahl der Hopping-Parameter t'_1 am Clusterrand, der Hopping-Parameter t'_2 und der Parameter im Clusterinneren t'_3 : C, blau. Unabhängige Optimierung von vier Hopping-Parametern: grün. Unabhängige Optimierung von fünf Hopping-Parametern (entspricht Referenzsystem C für $L_c = 10$, orange).

mum in Bezug auf t'_1 und ein Maximum in Bezug auf t'_2).

Ein Hopping auf den drittnächsten Gitterplatz erzeugt weder Frustration noch führt es zu einer Verletzung der Teilchen-Loch-Symmetrie. Die Optimierung eines Clusters mit sechs Plätzen für $U = 4$ (Referenzsystem 5.1, F) ergibt einen optimalen Wert des Nearest-Neighbor-Hoppings $t'_1 \approx 1.04$ sowie für das Third-Nearest-Neighbor-Hopping $t'_2 \approx -0.02$. Daraus ist ersichtlich, dass Hopping-Parameter, die im Modellsystem nicht vorhanden sind, als Variationsparameter im Referenzsystem dennoch einen endlichen Wert annehmen können. Der damit verbundene Energiegewinn ist allerdings vernachlässigbar. Folglich werden wir solche Variationsparameter im Folgenden nicht weiter berücksichtigen.

5.1.4 Bad-Plätze

Eine weitere Möglichkeit, die Anzahl der Variationsparameter zu erhöhen, besteht in der Einführung zusätzlicher unkorrelierter (Bad-)Plätze. Da auf diesen Bad-Plätzen keine Hubbard-Wechselwirkung existiert, bleibt der Wechselwirkungsanteil im Hamiltonian unverändert, eine notwendige Bedingung für ein zulässiges Referenzsystem im Rahmen der SFT (siehe Kap. 3.1.1). Die Selbstenergie $\Sigma_{ij}(\omega)$ bleibt weiterhin auf die korrelierten Plätze beschränkt. Wir betrachten Referenzsysteme, in denen alle oder einige korrelierte Plätze des ursprünglichen Gitters an Bad-Plätze mittels Hopping („Hybridisierung“) der Stärke V gekoppelt werden. Für jeden korrelierten Platz i können sowohl die Hopping-Parameter $V_{i\nu}$ als auch die On-Site-Energien $\varepsilon_{i\nu}$ der Bad-Plätze ($\nu = 2, \dots, n_s(i)$) als unabhängige Variationsparameter behandelt werden. Die Anzahl der Bad-Plätze, die an einen korrelierten Platz i koppeln, ist durch $n_s(i) - 1$ gegeben. Die Verwendung von Bad-Plätzen führt zu einer verbesserten Beschreibung der *zeitlichen* und nicht der *räumlichen* Freiheitsgrade. Im Spezialfall $L_c = 1$ erhält man als Näherung die DMFT, mit $L_c > 1$ die CDMFT, sofern $n_s(i) \rightarrow \infty$ (vergl. Kap. 3.1.1). Mittels exakter Diagonalisierung unter Verwendung von Lanczos sind Rechnungen allerdings nur für eine kleine Anzahl $n_s(i)$ von Bad-Plätzen möglich. Die Gesamtzahl der Plätze im Cluster (korrelierte und unkorrelierte Plätze) ist in unseren Rechnungen auf etwa zehn Plätze beschränkt.

Unter Ausnutzung von Teilchen-Loch-Symmetrie lässt sich die Anzahl der Variationsparameter, die unabhängig optimiert werden müssen, zum Teil beträchtlich reduzieren. Im Fall eines einzelnen Bad-Platzes ($n_s(i) = 2$) je korreliertem Platz ist die On-Site-Energie des Bad-Platzes durch $\varepsilon_{\text{bath}} = \mu = U/2$ gegeben und V ist der einzige freie Variationsparameter. Für $n_s(i) = 3$ ergibt sich $\varepsilon_{\text{bath}} = \mu \pm \Delta\varepsilon$ mit zusätzlichem Variationsparameter $\Delta\varepsilon$. Beide Bad-Plätze koppeln mit demselben Wert V für die Hybridisierung an den korrelierten Platz.

Im Rahmen von Clusternäherungen mit $L_c > 1$ sollten Bad-Plätze, die an nicht-äquivalente korrelierte Plätze ankoppeln, unabhängig voneinander optimiert werden. Es ist z. B. zu erwarten, dass Bad-Plätze am Clusterrand besser geeignet sind, das ausgeschaltete Inter-Cluster-Hopping zu kompensieren als Bad-Plätze im Clusterinneren. Diese Vermutung kann anhand des Referenzsystems 5.1, G überprüft werden. Die Hybridisierungen am Clusterrand (V_1) und im Clusterinneren (V_2) werden unabhängig voneinander optimiert. Abb. 5.8 zeigt die Ergebnisse für einen Cluster mit $L_c = 4$ Plätzen ($U = 4$). Sowohl die äußeren als auch die inneren Bad-Plätze koppeln an das Referenzsystem, damit verbunden ist eine Absenkung der Energie (im Vergleich zu $V_1 = V_2 = 0$). Es ist allerdings zu beachten, dass der Gewinn an Bindungsenergie durch die äußeren Bad-Plätze etwa eine Größenordnung über dem Energiegewinn durch die inneren Bad-Plätze liegt. Dementsprechend ist der optimale Wert der Hybridisierung am Clusterrand deutlich größer.

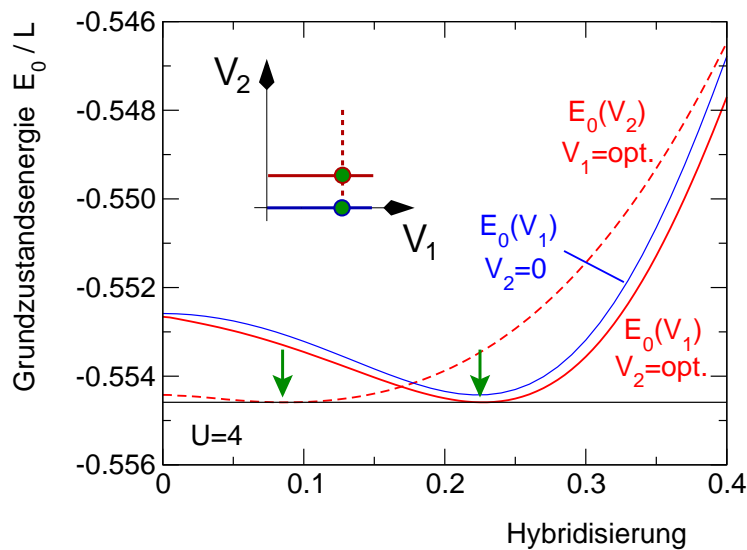


Abbildung 5.8: Darstellung der Grundzustandsenergie (pro Platz) als Funktion $E_0(V) = \Omega_t(V) + \mu N$ der Hybridisierung V für $U = 4$. Rechnung mit Referenzsystem Abb. 5.1, G (rote Linien); Abhängigkeit von $E_0(V_1)$ für optimales $V_2 = \text{opt.}$ (durchgezogene Linie) bzw. $E_0(V_2)$ für optimales $V_1 = \text{opt.}$ (gestrichelte Linie). Die entsprechenden Minima sind durch Pfeile gekennzeichnet. Rechnung mit Referenzsystem Abb. 5.1, H, d. h. $E_0(V_1)$ mit $V_2 = 0$ (blaue Linie).

Dieses Ergebnis legt nahe, Bad-Plätze, die an korrelierte Plätze im Clusterinneren an-koppeln, generell zu vernachlässigen, d. h. $V_2 = 0$ zu setzen bzw. Referenzsystem 5.1, H zu verwenden. Wie Abb. 5.8 zu entnehmen ist, liefert diese Vorgehensweise eine hervorragende Näherung. Ein Vergleich der Referenzsysteme 5.1, G und H, d. h. wir betrachten die Funktion $\Omega_t(V_1)$ für optimales V_2 bzw. $V_2 = 0$, ergibt nur einen geringfügigen Unterschied im großkanonischen Potenzial (optimales $\Omega_t(V_1)$). Das großkanonische Potenzial Ω ist für $V_2 = 0$ etwas größer, die optimale Hybridisierung V_1 ändert sich praktisch nicht.

Die Idee, Bad-Plätze nur am Clusterrand zu verwenden, wird in den Rechnungen in Abb. 5.9 konsequent weiterverfolgt (Referenzsystem Abb. 5.1, H). Für alle Clustergrößen von $L_c = 2$ bis $L_c = 8$ koppeln die Bad-Plätze mit endlicher Hybridisierung an die korrelierten Plätze (am Clusterrand) an und verursachen eine Absenkung des großkanonischen Potenzials. Für den Fall $L_c = 4$ und $U = 4$ (siehe Abb. 5.9) beträgt die Absenkung $\Delta\Omega/L \approx 0.002$. Für größere Wechselwirkung ist allgemein eine Verbesserung der Clusternäherungen zu beobachten. Entsprechend ist z. B. für $U = 8$ der Energiegewinn mit $\Delta\Omega/L \approx 0.0001$ etwa eine Größenordnung kleiner als im Fall $U = 4$. Aufgrund der Verwendung der \mathbf{Q} -Matrix-Methode bei der Auswertung des Selbstenergiefunktionals (siehe Kap. 3.2.1) ergeben sich keine numerischen Schwierigkeiten bei der Bestimmung derart kleiner Energiedifferenzen.

Wie sich herausstellt, ist der Gewinn an kinetischer Energie durch das Einführen von Bad-Plätzen (die ein Hüpfen von korrelierten Plätzen zum Bad und wieder zurück erlauben) größer als durch die Optimierung (und damit Vergrößerung) des Intra-Cluster-Hoppings t' . Dieses Resultat kann Abb. 5.9 entnommen werden. Zu betrachten sind die Rechnungen für das Referenzsystem I, bei dem die Hybridisierung am Clusterrand und das Intra-Cluster-Hopping gleichzeitig optimiert werden. Ein Vergleich der Referenzsysteme H und I zeigt,

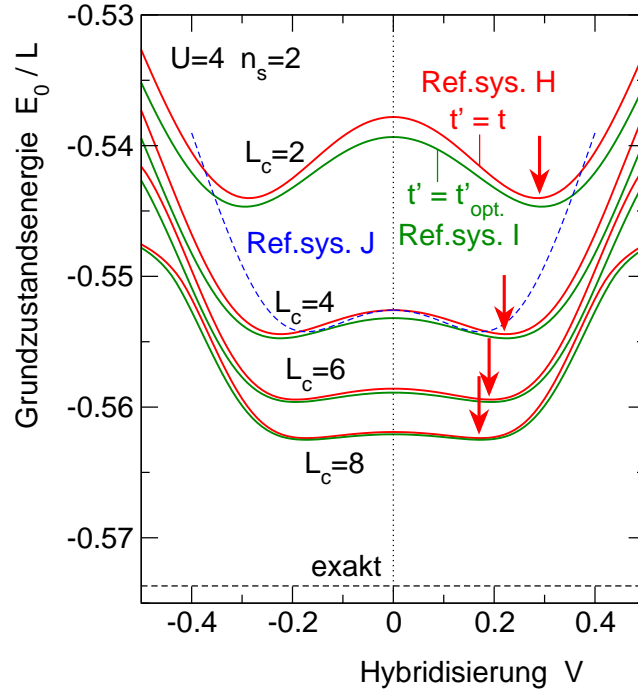


Abbildung 5.9: Darstellung der Grundzustandsenergie (pro Platz) als Funktion $E_0(V) = \Omega_t(V) + \mu N$ der Hybridisierung V für $U = 4$. Auswertung mit Referenzsystem Abb. 5.1, H für verschiedene Clustergrößen von $L_c = 2$ bis $L_c = 8$ (rote Linien). Zusätzliche Optimierung des Nearest-Neighbor-Hoppings (Referenzsystem Abb. 5.1, I) (grüne Linien). Minima sind durch Pfeile gekennzeichnet. Das exakte Bethe-Ansatz-Ergebnis für E_0 ist gestrichelt dargestellt.

dass unabhängig von der Clustergröße der Gewinn an Bindungsenergie durch das Anknüpfen von Bad-Plätzen deutlich größer ist.

Ergänzend zu den Rechnungen mit den Referenzsystemen H und I ist die Rechnung unter Verwendung des Referenzsystems J ($L_c = 4$) in Abb. 5.9 zu sehen. Das Referenzsystem J enthält einen Bad-Platz pro korreliertem Platz ($n_s = 2$), die Hybridisierung wird für jeden Platz identisch gewählt. Es wird also nur ein (globaler) Variationsparameter V optimiert. Gemessen am optimalen Wert des Selbstenergiefunktionals liefert dieses Referenzsystem ein schlechteres Resultat als die Referenzsysteme I und H, obwohl im Vergleich zu Referenzsystem H zwei zusätzliche Bad-Plätze berücksichtigt werden. Dadurch werden unsere bisherigen Ergebnisse untermauert, dass Bad-Plätze im Inneren der Kette ineffektiv sind.

Mit zunehmender Anzahl L_c an korrelierten Plätzen konvergiert der Wert des großkanonischen Potentials (z. B. unter Verwendung des Referenzsystems H) gegen den exakten Wert, wie Abb. 5.9 zu entnehmen ist. Die Hinzunahme von Bad-Plätzen dagegen zeigt kaum eine Verbesserung der Konvergenz. Unabhängig von der Clustergröße L_c stellt sich die Energieabsenkung durch Hinzufügen von zwei Bad-Plätzen als deutlich geringer heraus als der Energiegewinn, der durch Vergrößerung des Clusters um zwei korrelierte Plätze erzielt werden kann. Dieser Effekt zeigt sich sogar, wenn weitere Bad-Plätze in Betracht gezogen werden. Die wesentliche Verbesserung bei der Berechnung des großkanonischen Potentials wird daher durch die Anzahl der korrelierten Plätze bestimmt. Solange also das

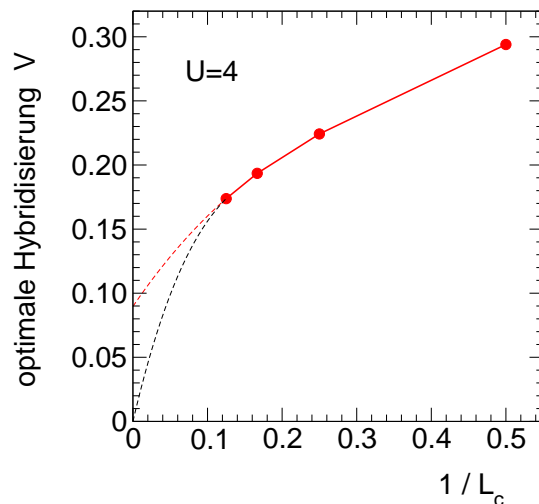


Abbildung 5.10: Optimale Werte der Hybridisierung aus Abb. 5.9 als Funktion der inversen Clustergröße $1/L_c$. Mögliche Extrapolationen des Limes $L_c \rightarrow \infty$ sind gestrichelt dargestellt.

großkanonische Potenzial oder die Grundzustandsenergie betrachtet werden sollen, ist die Verwendung von Bad-Plätzen eher ineffektiv.

Ein Abkoppeln der Bad-Plätze ($V \rightarrow 0$) im Limes $L_c \rightarrow \infty$ in der Clustermittte ist physikalisch plausibel und deutet sich bereits in den Ergebnissen in Abb. 5.8 für das Referenzsystem G an. Ob Bad-Plätze von den korrelierten Plätzen am Clusterrand ebenfalls abkoppeln, ist dagegen nicht eindeutig zu beantworten. Abb. 5.10 zeigt das optimale V für Bad-Plätze am Clusterrand als Funktion der inversen Clustergröße. Eine einfache Extrapolation unter Verwendung eines kubischen Splines zeigt, dass die Resultate sowohl mit einem endlichen Wert für V (rote Kurve) als auch mit $V = 0$ im Limes $L_c \rightarrow \infty$ verträglich sind. Die Ergebnisse aus Abb. 5.9 lassen erkennen, dass ein Minimum in $\Omega_t(t')/L$ für jede Clustergröße L_c existiert. Ein endlicher Wert V für das Minimum im Limes $L_c \rightarrow \infty$ impliziert, dass das Selbstenergiefunktional als Funktion von V konstant sein muss, zumindest innerhalb eines endlichen Bereichs um $V = 0$.

5.1.5 Einfluss von Bad-Plätzen auf dynamische Größen

Während Bad-Plätze von untergeordneter Bedeutung sind, sofern statische Größen (wie z. B. die Grundzustandsenergie) betrachtet werden, spielen sie eine entscheidende Rolle im Zusammenhang mit dynamischen Größen (speziell dem Gap Δ im Ein-Teilchen-Anregungsspektrum). Diese Eigenschaft soll im Folgenden untersucht werden. Wie bereits diskutiert, versagen Clustertechniken in der Nähe des kritischen Punkts $U = 0$. Jenseits des kritischen Punkts kann die Berechnung der Bandlücke dennoch als strenger Test für die Clustermethode dienen.

Tab. 5.1 zeigt die Ergebnisse für die Bandlücke für mittlere Wechselwirkung $U = 4$, berechnet mit Hilfe unterschiedlicher Methoden. Die Auswertung von Gl. 2.8 ergibt das exakte Ergebnis $\Delta = 1.287$. Ein metallischer Zustand mit $\Delta = 0$ wird durch statische Mean-Field-Theorie vorhergesagt sowie, für $U = 4$, ebenfalls durch Dynamical-Single-Site-Näherungen (DIA [12] und DMFT, vergl. Kap. 3.1.1). Andererseits liefert bereits der einfachste Cluster mit $L_c = 2$ und $n_s = 1$ (d. h. ohne Bad-Plätze) einen endlichen Wert für Δ , allerdings

	Bandlücke Δ
exakt, [21] Gl. 2.8	1.287
DMFT	0.0
VCA, A, $L_c = 2$	1.846
VCA, A, $L_c = 10$	1.516
VCA, C, $L_c = 10$	1.518
VCA, H, $L_c = 2, n_s = 2$	0.238
VCA, H, $L_c = 4, n_s = 2$ (Clusterrand)	0.079
VCA, L, $L_c = 2, n_s = 4$	0.009
VCA, K, $L_c = 2, n_s = 3$	1.181
VCA, K, $L_c = 4, n_s = 3$ (Clusterrand)	1.213
CDMFT [68]	1.14

Tabelle 5.1: Das Gap Δ im Ein-Teilchen-Anregungsspektrum für $U = 4$ berechnet mit Hilfe verschiedener Referenzsysteme (siehe Abb. 5.1) im Rahmen der SFT. Es gilt $t = 1$. Die CDMFT-Rechnung wurde mit $L_c = 2$ und $n_s = 3$ durchgeführt [68].

wird Δ deutlich überschätzt. Eine Verbesserung zeigt sich mit zunehmender Clustergröße, dennoch wird das Gap selbst bei Rechnungen mit $L_c = 10$ noch um ca. 18% überschätzt (siehe auch Abb. 5.6). Dieses Ergebnis bleibt auch bei unabhängiger Optimierung aller fünf Hopping-Parameter im Wesentlichen unverändert (Tab. 5.1, VCA für Referenzsystem C).

Mit der Einführung von Bad-Plätzen verändert sich die Situation deutlich. Unter Verwendung von Referenzsystem H, d. h. $L_c = 2$ korrelierte Plätze mit je einem Bad-Platz ($n_s = 2$), ergibt sich ein wesentlich zu kleiner Wert für die Bandlücke. Dieses Ergebnis verschlechtert sich sogar mit Übergang zu $L_c = 4$ und je einem Bad-Platz an den Clusterrändern, d. h. das Gap schließt sich nahezu. Daraus ist zu schließen, dass der ($n_s=2$)-Cluster zwar in Bezug auf die Grundzustandsenergie eine Verbesserung darstellt, aber offensichtlich ungeeignet zur Beschreibung der Bandlücke ist.

Ein zusätzlicher Bad-Platz (Referenzsystem K, $n_s = 3$) und $L_c = 2$ führt zu einer weiteren, aber vernachlässigbaren Absenkung der Grundzustandsenergie. Der Wert des Gaps liegt dagegen bereits nahe am exakten Resultat (ca. 8% zu niedrig). Durch Übergang zum Cluster mit $L_c = 4$ korrelierten Plätzen kann die Bestimmung von Δ weiter verbessert werden, d. h. das Gap wird nur noch um 6% unterschätzt. Mit einem dritten Bad-Platz an jedem Clusterrand ($n_s = 4$, Referenzsystem L) schließt sich die Bandlücke wieder nahezu. Offensichtlich handelt es sich hierbei um einen Odd-Even-Effekt bezogen auf die Anzahl der Bad-Plätze und eine zuverlässige Bestimmung des Gaps erfordert eine gerade Anzahl von Bad-Plätzen (d. h. n_s ungerade). Das zeigt, dass die Verwendung von Bad-Plätzen von entscheidender Bedeutung für die Bestimmung der Ein-Teilchen-Anregungen und der Bandlücke ist.

Mit Hilfe des Referenzsystems K mit $L_c = 4$ und $n_s = 3$ wurde Δ zusätzlich für verschiedene Werte von U berechnet. Die Abweichung vom exakten Resultat nimmt mit zunehmender Wechselwirkungsstärke ab. Für $U = 6$ beträgt sie noch 1.7%, für $U = 8$ nur noch 0.3%. Die Größe der Bandlücke wird jeweils unterschätzt. Im Bereich schwacher Wechselwirkung sind die Abweichungen größer (10% für $U = 3$ und 7% für $U = 2$). Im Vergleich mit den CDMFT-Resultaten [68] handelt es sich dennoch um eine beacht-

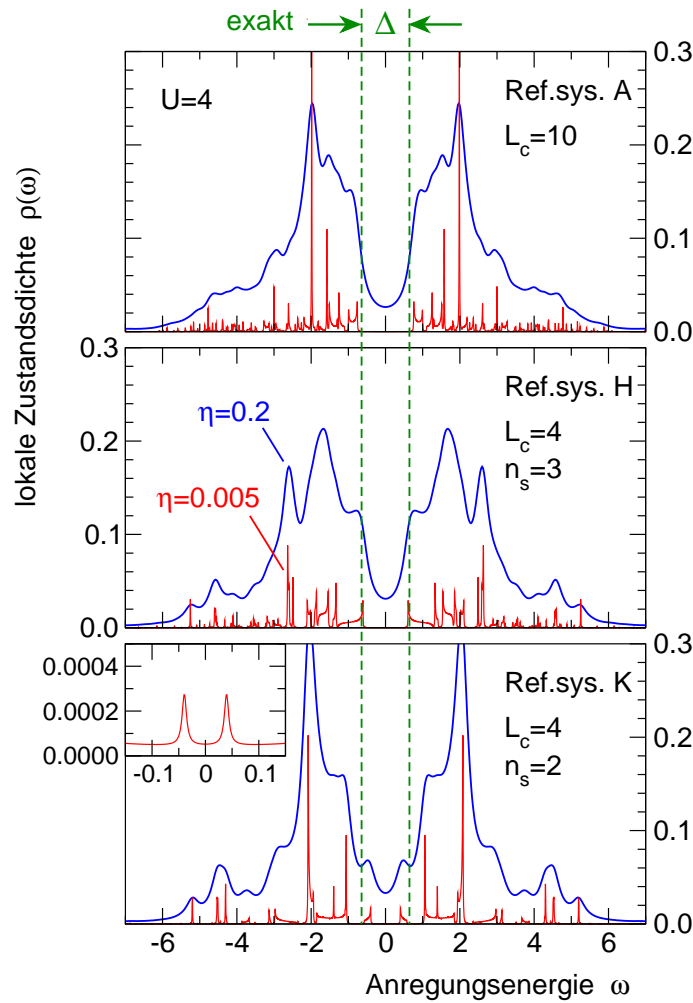


Abbildung 5.11: Lokale Zustandsdichte ($\rho(\omega) := A_{ii}(\omega)$, siehe Gl. 3.15) berechnet für den mittleren Clusterplatz unter Verwendung unterschiedlicher Referenzsysteme für $U = 4$. Zur Darstellung wurden zwei verschiedene Werte für die Lorentz-Verbreiterung η gewählt. Die Ergebnisse für $\eta = 0.005$ wurden mit dem Faktor $1/20$ skaliert. Die exakte Bandlücke ist durch gestrichelte Linien gekennzeichnet.

liche Verbesserung. Als Clustermethode ist die VCA nicht in der Lage, das exponentielle Verhalten der Bandlücke in der Nähe des kritischen Punkts $U = 0$ wiederzugeben und *überschätzt* die Größe des Gaps schließlich mit einem relativen Fehler von ca. 340% für $U = 1$ als typisches Beispiel (der exakte Wert der Bandlücke ist hier $\Delta = 0.005$).

Um den Ursprung des Odd-Even-Effekts bezogen auf die Größe der Bandlücke zu untersuchen, betrachten wir die wechselwirkende lokale Zustandsdichte (LDOS), die in Abb. 5.11 für $U = 4$ dargestellt ist. Die Zustandsdichte wird aus dem Imaginärteil der lokalen Green-Funktion des Modellsystems berechnet (siehe Gl. 3.15), die (im Gegensatz zu DMFT oder CDMFT) nicht mit der Cluster-Green-Funktion übereinstimmt. Da die Aufteilung des Gitters in Cluster notwendigerweise die Translationssymmetrie bricht, wird die LDOS für den mittleren Clusterplatz berechnet (hier ist die schnellste Konvergenz im Limes $L_c \rightarrow \infty$ zu erwarten). Die LDOS setzt sich zusammen aus einer großen, aber endlichen Anzahl von δ -Peaks mit unterschiedlichen Gewichten. Diese Struktur resultiert aus dem endlichdimen-

sionalen Hilbert-Raum des Clusters und der damit verbundenen diskreten Polstruktur der Selbstenergie. Eine Glättung der LDOS ist daher nur durch eine künstliche Verbreiterung der δ -Peaks möglich. In Abb. 5.11 wird eine Lorentz-Verbreiterung mit vergleichsweise großem $\eta = 0.2$ (blaue Linien) verwendet, während die Größe der Bandlücke (welche mit $\eta = 0$ bestimmt wurde) mit hoher Genauigkeit aus den Spektren mit $\eta = 0.005$ (rote Linien) abgelesen werden kann.

Der Vergleich der Spektren für die unterschiedlichen Referenzsysteme zeigt in allen Fällen die gleiche übergeordnete Struktur der LDOS, allerdings sind auch signifikante Finite-Size-Effekte zu erkennen. Letztere verhindern eine zuverlässige Vorhersage der genauen Form der Zustandsdichte. Während man erwartet, dass die LDOS am besten durch den ($L_c=10$)-Cluster (ohne Bad-Plätze; Abb. 5.11, oben) wiedergegeben wird, zeigt die vorangestellte Diskussion dagegen, dass die Bandlücke durch den ($L_c=4$)-Cluster mit $n_s = 3$ wesentlich genauer beschrieben werden kann (Abb. 5.11, Mitte). Betrachtet man die Ergebnisse für $\eta = 0.005$, sind Abweichungen vom exakten Resultat auf der verwendeten Skala für diesen Cluster kaum auszumachen. Im Gegensatz dazu zeigt die LDOS für den ($L_c=4$)-Cluster mit $n_s = 2$ (Abb. 5.11, unten) deutlich spektrales Gewicht für wesentlich kleinere Frequenzen, d. h. nahezu in der Mitte des exakten Gaps (siehe auch Abb. 5.11, Inset). Obwohl dieses spektrale Gewicht relativ klein ist, hat es signifikanten Einfluss auf die Eigenschaften des Modellsystems. Dies wird daraus ersichtlich, dass bereits eine Verschiebung des chemischen Potentials um $\Delta\mu = 0.04$ weg vom Teilchen-Loch-symmetrischen Wert $\mu = U/2$ ausreicht, um einen metallischen Zustand zu erzeugen.

Warum die Näherung unter Verwendung des ($L_c=4$)-Clusters mit $n_s = 2$ bei der Beschreibung der Bandlücke versagt, lässt sich verstehen, indem man (ad hoc) das Intra-Cluster-Hopping im Referenzsystem von $t' = t$ auf $t' = 0$ reduziert. Daraus resultiert eine LDOS bestehend aus unterem und oberem Hubbard-Band sowie einem Quasiteilchen-Peak bei $\omega = 0$ (vergl. Abb. 2.3). Diese Zustandsdichte ist typisch für das Hubbard-Modell bei Halbfüllung im Rahmen der Dynamical-Impurity-(Mean-Field-)Näherung ($L_c = 1$). Das spektrale Gewicht in Abb. 5.11 (unten), das für den deutlich zu geringen Wert von Δ für $n_s = 2$ (ungerade Anzahl von Bad-Plätzen) verantwortlich ist, geht stetig in den Quasiteilchen-Peak der metallischen Zustandsdichte des Mean-Field-Szenarios über. Diese metallische LDOS bei Halbfüllung wird im Rahmen der Dynamical Impurity Approximation immer durch eine *ungerade* Anzahl von Bad-Plätzen erzeugt. Die Niveaus der Bad-Plätze sind symmetrisch um die Fermi-Energie μ verteilt, die On-Site-Energie eines einzelnen Bad-Platzes stimmt mit der Fermi-Energie überein. Mit abnehmender und schließlich verschwindender Hybridisierung koppelt der einzelne Bad-Platz mit On-Site-Energie μ beim Übergang zum Mott-Isolator mit zunehmendem U vom Referenzsystem ab. Der Mott-Isolator wird somit durch eine *gerade* Anzahl von Bad-Plätzen charakterisiert. Das Vorhandensein bzw. das Fehlen spektralen Gewichts bei niedrigen Energien (annähernd in der Mitte der exakten Bandlücke) kann daher als Überbleibsel des Niederfrequenzverhaltens der metallischen bzw. isolierenden Mean-Field-Lösung interpretiert werden. Als Konsequenz erfordert eine angemessene Beschreibung des Mott-Isolators sowie der Bandlücke eine gerade Anzahl von Bad-Plätzen je korreliertem Platz, auch im Rahmen von Clusternäherungen ($L_c > 1$).

Wir wollen abschließend die von uns berechnete lokale Green-Funktion (auf der imaginären Achse) mit den Daten von Hafermann *et al.* (siehe [69]) für $U = 6$ vergleichen. Abb. 5.12 zeigt die VCA-Ergebnisse für den ($L_c=2$)-Cluster mit $n_s = 3$ lokalen Freiheitsgraden je korreliertem Platz. Wir stellen unsere Rechnung den im Prinzip exakten DDMRG-Daten gegenüber. Ähnlich wie für CDMFT (mit $L_c = 2$) mit Weak-Coupling Continuous-Time

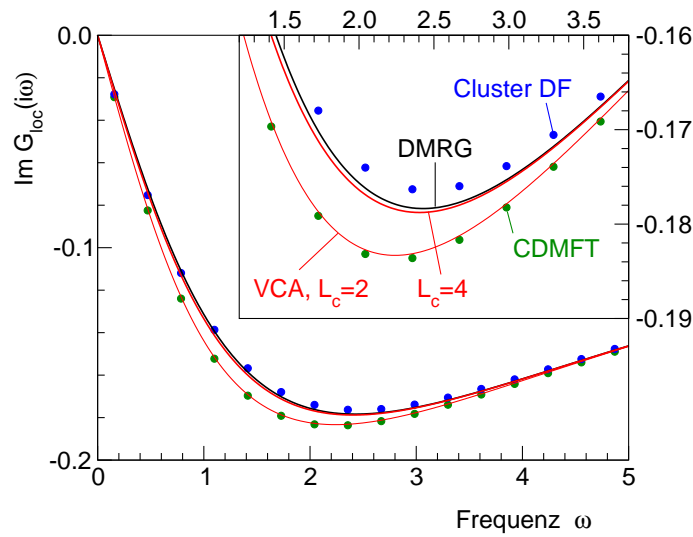


Abbildung 5.12: Lokale Green-Funktion als Funktion der Matsubara-Frequenzen für $U = 6$. Als Referenzsysteme wurden der ($L_c=2$)-Cluster mit $n_s = 3$ und der ($L_c=4$)-Cluster mit $n_s = 3$ verwendet (rote durchgezogene Linien). Wir vergleichen mit DDMRG-Daten (schwarze durchgezogene Linie), mit ($L_c=2$)-CDMFT-Rechnungen für endliche Temperatur ($\beta = 20$) und $L_c = 2$ Cluster Dual Fermion Theory (Cluster DF, $\beta = 20$) entnommen aus [69].

Quantum Monte Carlo bei endlicher Temperatur ($\beta = 1/T = 20$) zeigt sich nur eine marginale Verbesserung. Es ist jedoch anzumerken, dass die VCA-Rechnungen numerisch deutlich weniger aufwändig sind. Der Cluster Dual Fermion Approach für $L_c = 2$ (und $\beta = 20$) liefert ein wesentlich besseres Ergebnis und liegt nahe am DMRG-Resultat. Weitere Verbesserungen sind unter Verwendung größerer Cluster möglich. VCA-Rechnungen für den ($L_c=4$)-Cluster mit $n_s = 3$, d. h. mit zwei zusätzlichen korrelierten Plätzen, sind kaum noch von den DMRG-Daten zu unterscheiden.

5.2 Füllungsabhängiger Mott-Übergang

Um unsere Untersuchung der unterschiedlichen Clusternäherungen zu vervollständigen, betrachten wir im Folgenden die metallische Phase jenseits von Halbfüllung sowie den füllungsabhängigen Mott-Übergang. Die metallische Phase ist durch eine endliche Kompressibilität κ (Gl. 2.10) charakterisiert. Mit Variation des chemischen Potentials μ bei festem U und der dadurch bedingten Änderung der Elektronendichte (Füllung) ist eine Divergenz der Kompressibilität $\kappa \rightarrow \infty$ für $n \rightarrow 1$ beim Übergang zum Mott-Isolator $n = 1$ zu beobachten (siehe Gl. 2.11).

Eine Näherung, die auf Clustern mit endlicher (und kleiner) Anzahl an Freiheitsgraden basiert, bedingt notwendigerweise eine stark eingeschränkte Beschreibung der niederenergetischen Physik. Es ist daher anzunehmen, dass sich die Behandlung eines metallischen Zustands (d. h. Anregungsenergien bei $w = 0$) im Rahmen der VCA als schwieriger gestaltet als die Berechnung des Mott-Isolators. Andererseits vernachlässigt obige Argumentation die Tatsache, dass die Einschränkungen in der Energieauflösung zumindest teilweise durch die Optimierung der Clusterparameter kompensiert werden können. Dieser Effekt ist bekannt sowohl aus DMFT-ED-Rechnungen [70] als auch aus Dynamical Impurity Approximations

[12], in denen die Quasiteilchenresonanz unter Verwendung nur weniger Bad-Plätze aufgelöst werden kann. Zumindest unter technischen Gesichtspunkten sind die VCA-Rechnungen im metallischen Zustand schwieriger als im Isolator, da aufgrund fehlender Teilchen-Loch-Symmetrie eine größere Anzahl an Variationsparametern optimiert werden muss.

5.2.1 Variation der On-Site-Energien

Gerade bei der Untersuchung des füllungsabhängigen Mott-Übergangs ist es wichtig, im Rahmen der VCA-Rechnung thermodynamische Konsistenz bzgl. der Elektronendichte sicherzustellen. Das bedeutet, dass sowohl die Berechnung der Füllung mittels der (approximierten) Zustandsdichte

$$\rho_{i\sigma}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{ii\sigma}(\omega + i0^+) \quad (5.2)$$

als

$$n = \frac{1}{L} \sum_{i\sigma} \int_{-\infty}^0 d\omega \rho_{i\sigma}(\omega) \quad (5.3)$$

als auch unter Verwendung des (approximierten) großkanonischen Potentials gemäß

$$n = -\frac{1}{L} \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \quad (5.4)$$

übereinstimmende Resultate liefern müssen (siehe Kap. 3.1.3). Aus diesem Grund ist eine globale Optimierung der On-Site-Energie ε auf allen Clusterplätzen (entspricht einer Verschiebung des chemischen Potentials im Referenzsystem) bei der Betrachtung dotierter Systeme wesentlich. Es ist zu beachten, dass im Fall von Teilchen-Loch-Symmetrie $\varepsilon = 0$ bereits festgelegt ist (vergl. Kap. 4.1). Bei der Berechnung des lochdotierten Systems findet sich ein Maximum des Selbstenergiefunktionals als Funktion von ε dagegen für $\varepsilon \neq 0$.

Das Ein-Teilchen-Anregungsspektrum kann mit großer Genauigkeit mittels DDMRG [23] oder QMC-Rechnungen [71, 72] bestimmt werden. Die wesentlichen Bestandteile des Spektrums, einschließlich der stärker ausgeprägten Spinon- und Holon-Bänder, sind bereits mit Hilfe endlicher Ketten (z. B. $L_c = 10$) zugänglich, u. a. im Rahmen von CPT-Rechnungen [30] (d. h. VCA ohne Parameteroptimierung). Selbst für Cluster mit $L_c = 2$ und $n_s - 1 = 2$ zusätzlichen Bad-Plätzen je korreliertem Platz ist das berechnete Spektrum in Bezug auf die globale Struktur in sehr guter Übereinstimmung mit den genaueren DMRG-Daten, wie durch Capone *et al.* [73] demonstriert wurde.

In den folgenden Rechnungen konzentrieren wir uns auf einen weiteren Aspekt, der entscheidend für jede Clustermethode ist. Der Sachverhalt ist in Abb. 5.13 für einen einzelnen Cluster (ohne selbstkonsistente Einbettung in ein Gitter) dargestellt. Aufgrund der U(1)-Symmetrie des großkanonischen Hamilton-Operators des Clusters ist die Teilchenzahl N_c im Grundzustand eine Erhaltungsgröße, die abhängig vom Wert des chemischen Potentials μ die Werte $N_c = 0$ bis $N_c = 2L_c$ annehmen kann. Folglich kann die Füllung $n_c = N_c/L_c$ als Funktion von μ nur diskrete Werte annehmen und zeigt Unstetigkeiten bei den entsprechenden kritischen Werten $\mu_{c,i}$ des chemischen Potentials. Wie durch Abb. 5.13 gezeigt wird, handelt es sich hierbei um einen deutlichen Finite-Size-Effekt, der nicht akzeptabel ist, wenn man am füllungsabhängigen Mott-Übergang im thermodynamischen Limes interessiert ist.

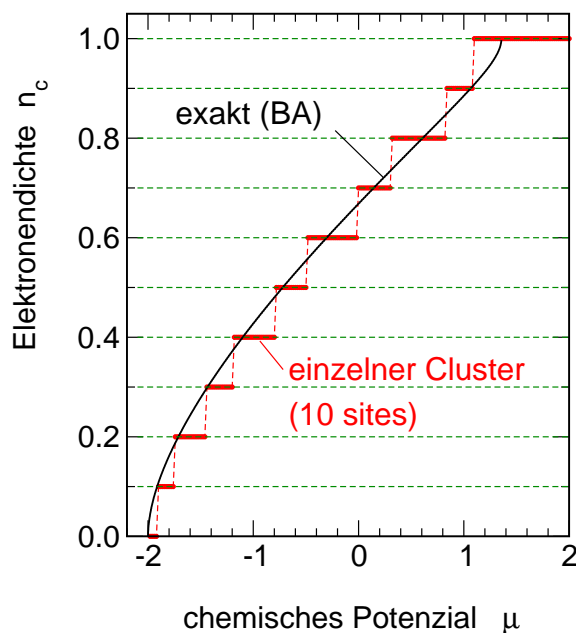


Abbildung 5.13: Elektronendichte $n_c = N_c/L_c$ als Funktion des chemischen Potentials für eine Kette mit $L_c = 10$ Plätzen (offene Randbedingungen) im Vergleich mit dem exakten Ergebnis für $L_c \rightarrow \infty$ aus [22].

Wir wir bereits bei der Untersuchung des Hubbard-Modells in $D = 2$ gesehen haben, ist eine kontinuierliche Dotierung (als Funktion von μ) unter Verwendung endlicher Cluster im Rahmen der VCA möglich (Kap. 4). Es bleibt die Frage, wie zuverlässig eine solche Vorhersage der Füllung $n(\mu)$ im Rahmen verschiedener Clusternäherungen ist, ob z. B. die Divergenz in der Kompressibilität für $\delta \rightarrow 0$ beschrieben werden kann.

Durch Verwendung eines unendlichen Systems entkoppelter Cluster sowie durch Wiedereinführung des Inter-Cluster-Hoppings in niedrigster nichttrivialer Ordnung liefert die CPT Ergebnisse im thermodynamischen Limes. Folglich ist zu erwarten, dass bereits die CPT im Prinzip einen kontinuierlichen Verlauf der Füllung in Abhängigkeit von μ zeigen kann. Wie in Abb. 5.14 zu sehen ist, ergibt sich in CPT in der Tat ein metallischer Zustand mit einer Kompressibilität κ , die für alle μ endlich ist (außer an den kritischen Werten $\mu = \mu_{c,i}$ des einzelnen Clusters). Dieses Ergebnis stellt eine wesentliche Verbesserung der CPT gegenüber direkter Diagonalisierung ($\kappa \equiv 0$ außer für $\mu = \mu_{c,i}$) dar. Als entscheidender Nachteil der CPT zeigen sich (endliche) Sprünge an den kritischen Werten $\mu = \mu_{c,i}$. Diese Unstetigkeiten resultieren aus der (unstetigen) Änderung des Clustergrundzustands an jedem $\mu = \mu_{c,i}$, woraus sich eine unstetige Änderung der Cluster-Green-Funktion $\mathbf{G}'(\omega)$ und damit der CPT-Green-Funktion $\mathbf{G}_{\text{CPT}}(\omega)$ (siehe Gl. 3.16) ergibt. Gemäß Gl. 5.3 überträgt sich diese Unstetigkeit letztlich auch auf die Teilchenzahl.

Im Wesentlichen der gleiche Effekt tritt auf, wenn die Teilchenzahl als Ableitung des großkanonischen Potentials nach μ gemäß Gl. 5.4 berechnet wird (siehe auch Gl. 3.31 oder Gl. 3.37). Die Gegenüberstellung der Teilchendichten in Abb. 5.14, die gemäß Gl. 5.3 bzw. Gl. 5.4 berechnet wurden, zeigen deutlich die thermodynamische Inkonsistenz der CPT-Rechnungen. Der Vergleich mit den exakten Resultaten aus dem Bethe-Ansatz lässt erkennen, dass die Berechnung der Füllung mit Hilfe der Zustandsdichte bei Verwendung der CPT klar zu bevorzugen ist.

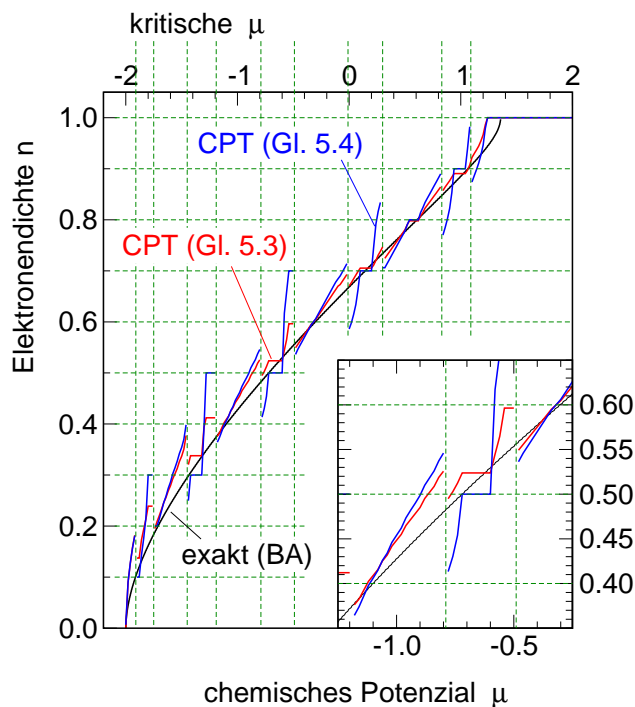


Abbildung 5.14: Elektronendichte n aus CPT-Rechnungen ($L_c = 10$) als Funktion von μ . Die Füllung wurde sowohl mit Hilfe von Gl. 5.3 durch Integration über die Zustandsdichte bestimmt (rote Linie) als auch durch Ableitung des großkanonischen Potentials nach μ (Gl. 5.4, blaue Linie). Die exakte Bethe-Ansatz-Lösung (BA) ist zum Vergleich mit angegeben. Horizontale gestrichelte Linien kennzeichnen die Clusterfüllungen, vertikale gestrichelte Linien markieren die kritischen chemischen Potentiale, an denen sich der Clustergrundzustand ändert.

Aus obigen Betrachtungen wird klar, dass die reine CPT den füllungsabhängigen Mott-Übergang nicht beschreiben kann und eindeutig Probleme bei der Berechnung der Elektronendichte n in Abhängigkeit vom chemischen Potenzial μ zeigt. Beschränkt man sich allerdings auf eine diskrete Anzahl von Clusterfüllungen N_c , erhält man durchaus zufriedenstellende Ergebnisse. Entspricht die Füllung der CPT-Rechnung der Dichte im Cluster, so liegt der zugehörige Wert des chemischen Potentials nahe am exakten μ , wie Abb. 5.14 zu entnehmen ist. In diesem Fall ergeben beide Rechnungen (Gl. 5.3 bzw. Gl. 5.4) nahezu übereinstimmende Ergebnisse für n (siehe Abb. 5.14, Inset für $n = 0.4$ und $n = 0.6$). Dennoch treten auch für Elektronendichten, die im Cluster realisiert werden können, Probleme auf. So kann z. B. dem Wert $n = 0.5$ kein eindeutiges chemisches Potenzial zugeordnet werden und für die Kompressibilität gilt $\kappa \equiv 0$ in einem endlichen μ -Intervall (Abb. 5.14, Inset).

Die Verwendung der VCA als Clustermethode ändert die Situation grundlegend. Das einfachste Referenzsystem besteht aus einer Kette unabhängiger Cluster (ohne Bad-Plätze) mit globalem Shift der On-Site-Energie ε als einzigem Variationsparameter, um die thermodynamische Konsistenz zu gewährleisten (siehe Abb. 5.15). Die zugehörigen Ergebnisse für verschiedene Clustergrößen L_c sind in Abb. 5.16 dargestellt.

Abgesehen von der thermodynamischen Konsistenz besteht der eigentliche Unterschied zur CPT-Rechnung darin, dass die Füllung als *stetige* Funktion von μ im gesamten Be-

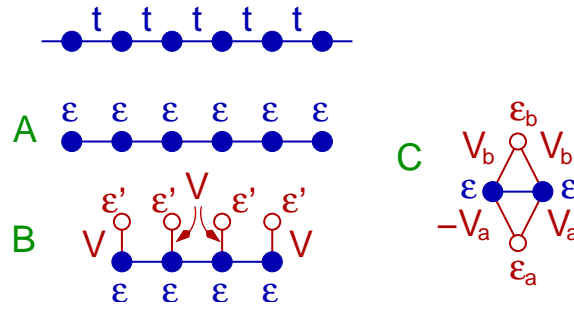


Abbildung 5.15: Ursprüngliches Modellsystem und verschiedene Referenzsysteme mit zugehörigen Variationsparametern. Erläuterungen siehe Text.

reich von $\mu = -2$ (leeres Band) bis $\mu = \mu_c$ (Halbfüllung) berechnet werden kann (was durch Verwendung der Cluster mit $L_c = 2$ bis $L_c = 10$ überprüft wurde). Wie sich herausstellt gleicht der optimale Wert von ε die Abweichung des chemischen Potentials vom Teilchen-Loch-symmetrischen Wert $U/2$ im Cluster (teilweise) aus. Für den Grundzustand im Cluster gilt daher (wegen des Mott-Hubbard-Gaps) immer $N_c = L_c$. Der Clustergrundzustand, die optimale Selbstenergie als auch die Füllung im Modellsystem sind folglich stetige Funktionen des chemischen Potentials μ . Diese Eigenschaft ist bis $\mu = -2$ erfüllt, wenn auch für die Elektronendichte im Rahmen dieser Clusternäherung nicht notwendigerweise $n(\mu = -2) = 0$ gilt.

Abb. 5.16 zeigt den kritischen Bereich in der Nähe von Halbfüllung. Wie sich herausstellt, nimmt der kritische Wert des chemischen Potentials μ_c , an dem der Metall-Isolator-Übergang stattfindet, mit der Clustergröße zu und konvergiert zum exakten Ergebnis. Allerdings ist die Konvergenz mit der Clustergröße relativ langsam. Zudem ist aus den Daten nicht ersichtlich, ob eine Divergenz in der Kompressibilität im Limes $L_c \rightarrow \infty$ zu beobachten ist. Immerhin nimmt die Steigung von $n(\mu)$ (d. h. κ) für $n \rightarrow 1$ mit zunehmender Clustergröße L_c ab. Dieses Verhalten mag damit erklärt werden, dass selbst im Limes $L_c \rightarrow \infty$ und mit optimierten Clusterparametern die (Test-)Selbstenergie durch den ($N_c=L_c$)-Unterraum bestimmt wird und folglich die Physik des metallischen Zustands nur unzureichend beschreiben kann.

Daraus ist zu schließen, dass als Preis für den stetigen Verlauf der Teilchendichte als Funktion von μ der Grundzustand im Cluster auf Halbfüllung festgelegt ist. Dieser Umstand gewinnt mit zunehmender Lochdotierung immer mehr an Bedeutung. Das Inset, Abb. 5.16 verdeutlicht diesen Punkt für $L_c = 4$. Für die Rechnung mit $N_c = L_c = 4$ stimmt die Elektronendichte n nur in der Nähe von Halbfüllung mit dem exakten Ergebnis gut überein. In der Nähe von Viertelfüllung dagegen kann ein deutlich besseres Ergebnis erzielt werden, wenn die VCA-Rechnung mit einem Clustergrundzustand $N_c = 2 = L_c/2$ (Viertelfüllung im Cluster) durchgeführt wird, was physikalisch plausibel erscheint.

5.2.2 Bad-Plätze als Ladungsreservoirs

Wie bereits die Rechnungen bei Halbfüllung gezeigt haben, kann die Verwendung von Bad-Plätzen eine Clusternäherung entscheidend verbessern. Bad-Plätze gewinnen umso mehr bei der Untersuchung metallischer Zustände an Bedeutung, da sie hier zusätzlich als Ladungsreservoirs dienen. Mit Änderung des chemischen Potentials oder eines anderen physikalischen Parameters kann die Elektronendichte auf den korrelierten Plätzen kontinuierlich variiert werden, indem die Ladung von oder zu den Bad-Plätzen im Referenzsystem

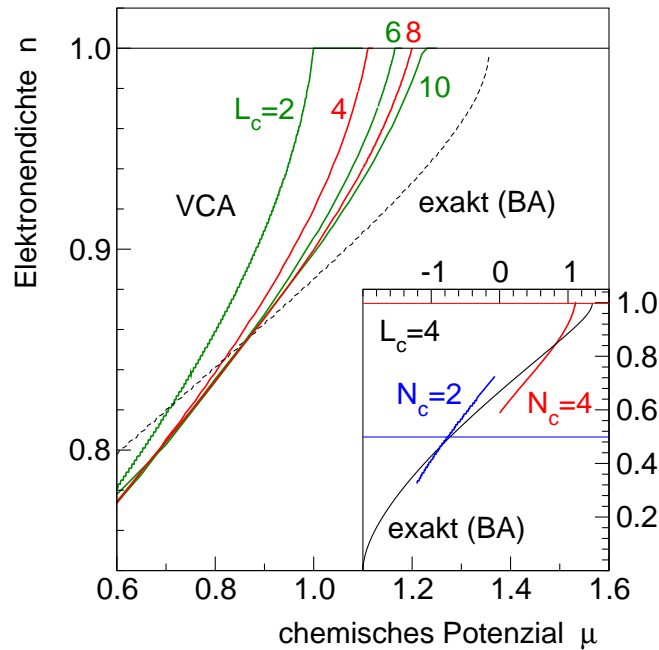


Abbildung 5.16: Elektronendichte n als Funktion des chemischen Potentials μ in der Nähe von Halbfüllung für $U = 4$. VCA-Rechnungen mit Referenzsystem Abb. 5.15, A für unterschiedliche Clustergrößen L_c . Für den Clustergrundzustand gilt unabhängig von der Clustergröße $N_c = L_c$. Inset: $n(\mu)$ im gesamten μ -Bereich, Rechnungen für $L_c = 4$ mit Clustergrundzustand $N_c = L_c$ und $N_c = L_c/2$.

fließt.

Im Gegensatz zur (Cellular) DMFT weicht die Füllung n im Modellsystem (berechnet aus der approximierten VCA-Green-Funktion, Gl. 3.14) im Allgemeinen von der Elektronendichte n' auf den korrelierten Plätzen im Referenzsystem ab. Erfahrungsgemäß sind die Abweichungen allerdings gering, so dass $n \approx n'$ gilt. Das bedeutet, dass Elektronendichten auf den korrelierten Plätzen von $n = 0$ bis $n = 1$ (Halbfüllung) realisiert werden können, indem ein stets halbgefülltes Referenzsystem betrachtet wird. Dazu muss mindestens ein Bad-Platz pro korreliertem Platz ($n_s = 2$) existieren. Nimmt man als Beispiel einen Cluster mit $L_c = 2$ korrelierten Plätzen und $n_s - 1 = 1$ Bad-Platz je korreliertem Platz, so enthält das Referenzsystem insgesamt $L' = 4$ Plätze. Für Teilchen-Loch-symmetrische Parameter liegt der Grundzustand des Clusters im $(N'_{\text{tot}}=4)$ -Unterraum und Symmetrieargumente ergeben $n' = 1$ auf den korrelierten Plätzen und $n'_{\text{bath}} = 1$ auf den Bad-Plätzen. Dieser Fall entspricht Halbfüllung $n = 1$ im Modellsystem. Dotierung $n < 1$ bedeutet $n' \approx n < 1$ und $n'_{\text{bath}} > 1$, so dass weiterhin $n' + n'_{\text{bath}} = 2$ gilt, d. h. der Clustergrundzustand liegt bei Halbfüllung. Im Limes $n \rightarrow 0$ ist die gesamte Ladung $N'_{\text{tot}} = 4$ im Wesentlichen auf die Bad-Plätze verteilt, d. h. $n' \rightarrow 0$ und $n'_{\text{bath}} \rightarrow 2$. Analoge Argumente gelten für $n > 1$. Diese Methode verspricht folglich einen stetigen Verlauf aller betrachteten Größen in Abhängigkeit vom chemischen Potenzial μ . Der Grundzustand im Cluster bleibt dabei im $(N'_{\text{tot}}=L')$ -Unterraum, während die physikalischen Eigenschaften des Modells durch die Dichte auf den korrelierten Plätzen $n' \approx n$ bestimmt werden.

Es ist uns nicht gelungen, eine Lösung im Rahmen der VCA-Rechnungen (d. h. einen stationären Punkt des Selbstenergiefunktional) unter Verwendung von zwei Bad-Plätzen je korreliertem Platz ($n_s = 3$) zu finden. Wie sich aus der Diskussion für Halbfüllung her-

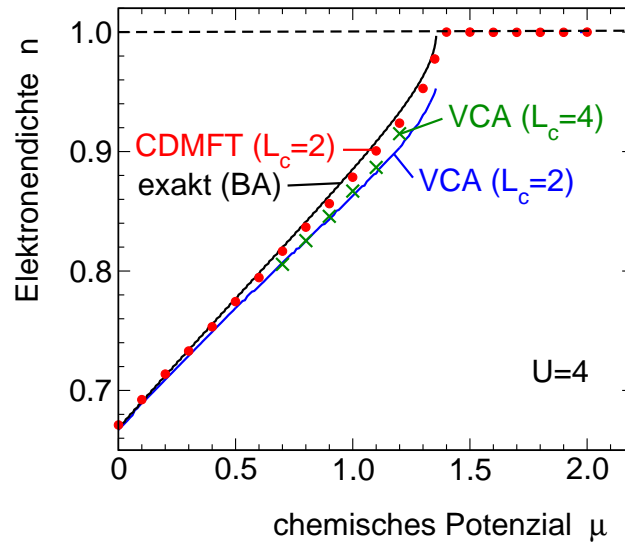


Abbildung 5.17: Elektronendichte n als Funktion des chemischen Potentials μ in der Nähe von Halbfüllung für $U = 4$. VCA-Rechnung mit Referenzsystem Abb. 5.15, B und $L_c = 2$ bzw. $L_c = 4$. Zum Vergleich sind die exakte Bethe-Ansatz-Lösung und die CDMFT-Rechnung aus [73] dargestellt.

ausgestellt hat, erwartet man bei Verwendung von Referenzsystemen mit gerader Anzahl an Bad-Plätzen je korreliertem Platz eine gute Beschreibung des Mott-Isolators, nicht aber des Metalls. Folglich konzentrieren wir uns für die Untersuchung des dotierten Systems auf Referenzsysteme mit $n_s = 2$. Der Einfachheit halber koppeln wir je einen Bad-Platz an jeden korrelierten Platz und nehmen an, die Hybridisierung V sei unabhängig vom Gitterplatz. Als weitere Variationsparameter werden die On-Site-Energien ε auf den korrelierten Plätzen und ε' auf den Bad-Plätzen betrachtet, die ebenfalls als platzunabhängig angenommen werden. Das entsprechende Referenzsystem ist in Abb. 5.15, B dargestellt.

Numerische Ergebnisse für die Cluster mit $L_c = 2$ und $L_c = 4$ korrelierten Plätzen sind in Abb. 5.17 zu finden. Unabhängig von der Clustergröße zeigt sich eine hervorragende Übereinstimmung mit dem exakten Resultat für Füllungen kleiner als $n \sim 0.75$. Allerdings liefern die VCA-Rechnungen mit Bad-Plätzen auch für größere Elektronendichten überzeugende Daten und zeigen eine beachtliche Verbesserung sowohl im Vergleich mit der CPT (Abb. 5.14) als auch mit unseren VCA-Rechnungen ohne Bad-Plätze (Abb. 5.16). Das kritische chemische Potenzial μ_c für den Mott-Metall-Isolator-Übergang wird etwas überschätzt, allerdings ist der Fehler hier deutlich geringer als die Unterschätzung für VCA-Rechnungen ohne Bad-Plätze. Von größerem Interesse ist jedoch, dass der Ansatz mit Bad-Plätzen die Divergenz der Kompressibilität offensichtlich korrekt wiedergibt. Ungünstigerweise hat es sich als numerisch äußerst schwierig herausgestellt, den stationären Punkt in der Nähe von Halbfüllung als Funktion von μ zu verfolgen. Die CDMFT-Daten von Capone *et al.* [73], die ebenfalls in Abb. 5.17 zu sehen sind, liegen etwas näher am exakten $n(\mu)$.

Durch die Anzahl L_c und $n_s - 1$ der korrelierten Plätze und der Bad-Plätze ist das Referenzsystem nicht eindeutig festgelegt. Verschiedene Referenzsysteme können dadurch erzeugt werden, dass die Bad-Plätze in unterschiedlicher Weise an die korrelierten Plätze angekoppelt werden. Das Referenzsystem Abb. 5.15, C z. B. wird charakterisiert durch $L_c = 2$ und $n_s = 2$, spannt aber (sofern alle Ein-Teilchen-Parameter unabhängig voneinander

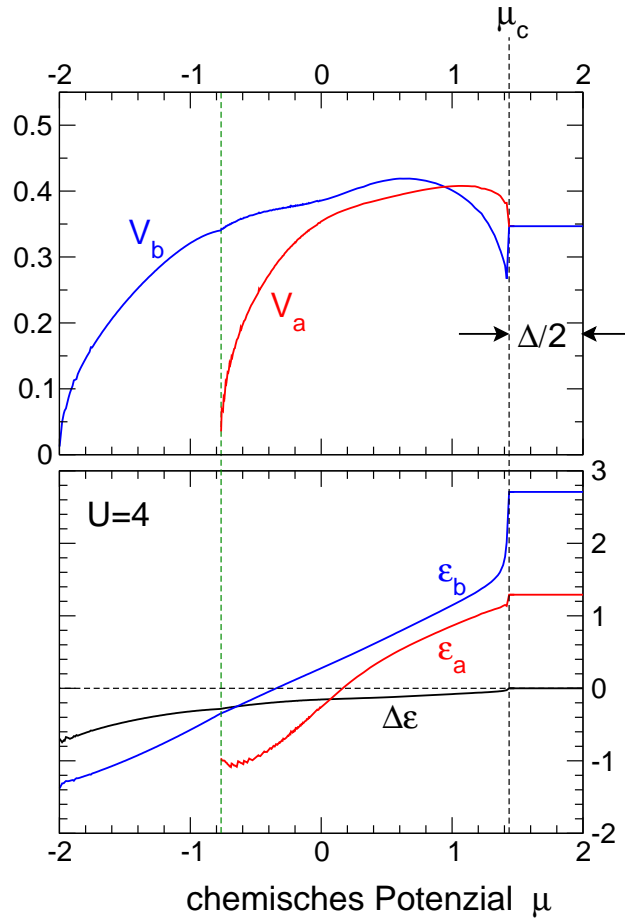


Abbildung 5.18: Verlauf der optimalen Variationsparameter (Referenzsystem Abb. 5.15, C) als Funktion des chemischen Potentials μ für $U = 4$. $\Delta\epsilon$ bezeichnet einen globalen Shift aller Ein-Teilchen-Energien (ϵ , ϵ_a und ϵ_b).

variiert werden) einen anderen Raum \mathcal{S} für Test-Selbstenergien auf als Referenzsystem B (mit $L_c = 2$). Im Limes $n_s \rightarrow \infty$, d. h. im Fall der CDMFT, spielen die verschiedenen Möglichkeiten, wie die Bad-Plätze an die korrelierten Plätze angekoppelt werden, keine Rolle mehr. Die unterschiedlichen Darstellungen können durch unitäre Transformationen aufeinander abgebildet werden und spannen dadurch denselben Raum für die Selbstenergie auf. Das gilt jedoch nicht für endliche (kleine) n_s . Wie im Folgenden gezeigt wird, liefern die Referenzsysteme Abb. 5.15, B und C ähnliche Ergebnisse für die metallische Phase, Referenzsystem Abb. 5.15, C bietet jedoch eine deutlich bessere Beschreibung des Mott-Isolators.

Jeder Bad-Platz im Referenzsystem C koppelt an beide korrelierten Plätze mittels der Hybridisierungen V_1 und V_2 an. Die Forderung, dass die Selbstenergie invariant unter Vertauschung der korrelierten Plätze bleibt, führt auf die Bedingung $V_1 = \pm V_2$. Die beiden Bad-Plätze werden durch die Parameter $V_1 = -V_2 \equiv V_a$ bzw. $V_1 = V_2 \equiv V_b$ beschrieben. Nur so kann die Teilchen-Loch-Symmetrie im Referenzsystem für $\mu = U/2$ erfüllt werden. Als Konsequenz sind insgesamt fünf Variationsparameter zu optimieren, V_a und V_b , die On-Site-Energien der Bad-Plätze ϵ_a und ϵ_b , sowie ein globaler Shift aller On-Site-Energien (also einschließlich der korrelierten Plätze) $\Delta\epsilon$.

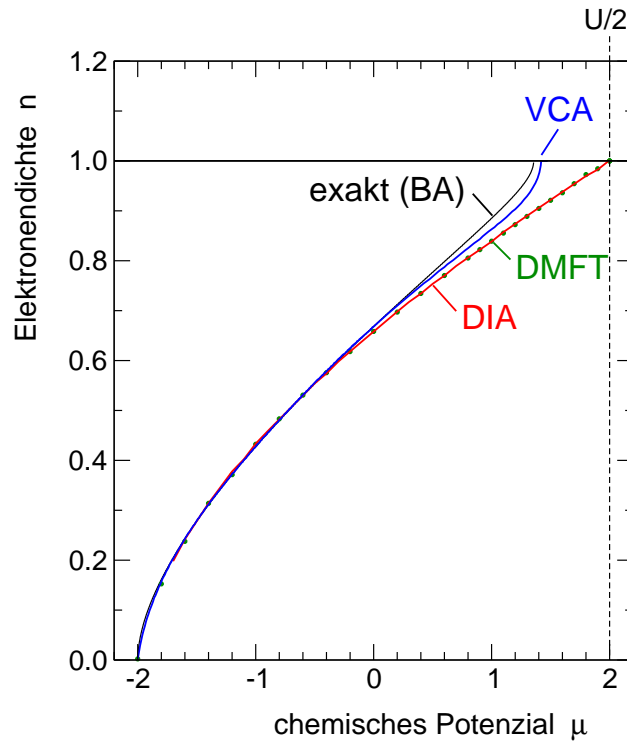


Abbildung 5.19: Elektronendichte n als Funktion des chemischen Potentials für $U = 4$ (Referenzsystem Abb. 5.15, C) im Vergleich mit der exakten Bethe-Ansatz-Lösung, mit der DMFT-Rechnung aus [73] und mit der Two-Site Dynamical Impurity Approximation (DIA).

Abb. 5.18 zeigt die optimalen Werte aller Variationsparameter als Funktion des chemischen Potentials μ . Bei Halbfüllung im Mott-Isolator, d. h. für $\mu > \mu_c$, sind die Parameter unabhängig von μ . Für den globalen Shift der On-Site-Energien gilt $\Delta\varepsilon = 0$, weiterhin ist $V_a = V_b$ und $\varepsilon_a + \varepsilon_b = U$. Am Teilchen-Loch-symmetrischen Punkt $\mu = U/2$ sind diese Einschränkungen durch Symmetrieüberlegungen festgelegt und werden offensichtlich im Rahmen der Näherung erfüllt. Die Parameter zeigen einen stetigen Verlauf als Funktion von μ außer an $\mu = \mu_c \approx 1.42$, d. h. am Metall-Isolator-Übergang. Mit abnehmendem μ verringern sich die On-Site-Energien auf den Bad-Plätzen, was in einer entsprechenden Zunahme der Elektronendichte n' resultiert und damit eine Abnahme der Füllung n auf den korrelierten Plätzen bedingt. Das Referenzsystem bleibt im gesamten μ -Bereich halbgefüllt. Bei $\mu \approx -0.76$ verschwindet die Hybridisierung des Bad-Platzes „a“, d. h. der Bad-Platz koppelt ab. Dieser Bad-Platz ist wegen $\varepsilon_a + \Delta\varepsilon < \mu$ vollbesetzt. Für kleinere Werte von μ besteht das verbleibende Referenzsystem demnach aus den beiden korrelierten Plätzen und nur noch einem Bad-Platz mit einer Gesamtzahl an Elektronen $N'_{\text{tot}} = 2$. Bei $\mu \rightarrow -2$ koppelt schließlich auch der zweite Bad-Platz „b“ ab ($V_b \rightarrow 0$). Dieser enthält die beiden restlichen Elektronen, so dass für die beiden korrelierten Plätze und damit das Modellsystem $n \rightarrow 0$ gilt. Damit erfüllen die Bad-Plätze ihre Funktion als Ladungsreservoirs.

Die sich daraus ergebende Abhängigkeit der Elektronendichte als Funktion von μ ist in Abb. 5.19 zu finden. Die Übereinstimmung mit dem exakten Ergebnis des Bethe-Ansatzes ist hervorragend für kleine und mittlere Füllungen. Geringfügige Abweichungen sind ab $n > 0.8$ zu beobachten. Dennoch wird das Verhalten von $n(\mu)$ qualitativ richtig wiederge-

geben, einschließlich der Divergenz in der Kompressibilität am Metall-Isolator-Übergang. Ein Vergleich mit den Daten unter Verwendung von Referenzsystem Abb. 5.15, B lässt auf der Skala von Abb. 5.19 kaum Unterschiede erkennen.

Das kritische chemische Potenzial ergibt sich aus der VCA-Rechnung (Referenzsystem Abb. 5.15, C) zu $\mu_c \approx 1.42$. Dieses Resultat lässt sich vergleichen mit der Größe für die Bandlücke (bei Verwendung desselben Referenzsystems) $\Delta = 1.128$, die bei Halbfüllung aus der LDOS abgelesen werden kann. Mit Hilfe der Beziehung

$$\Delta = 2(U/2 - \mu_c) \quad (5.5)$$

folgt daraus für das kritische chemische Potenzial $\mu_c = 1.436$. Die geringfügige Abweichung der beiden Ergebnisse ist sehr wahrscheinlich auf numerische Schwierigkeiten bei der Bestimmung des stationären Punkts in der metallischen Phase nahe am Metall-Isolator-Übergang zurückzuführen. Der Wert des Gaps ist in guter Übereinstimmung mit dem Ergebnis unter Verwendung von Referenzsystem Abb. 5.1, K mit $L_c = 2$. Daraus ist zu schließen, dass mit Hilfe von Referenzsystem Abb. 5.15, C (im Gegensatz zu Referenzsystem B) nicht nur die metallische Phase für beliebige Füllungen gut beschrieben wird, sondern zusätzlich auch der Mott-Isolator. Bedenkt man die geringe Größe dieses Clusters, ist das ein überraschend gutes und zufriedenstellendes Ergebnis.

In Abb. 5.19 sind ebenfalls die Daten aus Single-Site-DMFT-Rechnungen enthalten. Während die Mean-Field-Theorie in der Nähe von Halbfüllung versagt, ist für Elektronendichten kleiner als $n \approx 0.6$ kaum eine Abweichung vom exakten Ergebnis erkennbar. Es ist bemerkenswert, dass selbst die einfachste Dynamical Impurity Approximation (DIA) im Rahmen der SFT (d. h. ein Referenzsystem bestehend aus nur einem korrelierten Platz und einem Bad-Platz, $L_c = 1$, $n_s = 2$) das volle DMFT-Resultat *quantitativ* reproduzieren kann. Die entsprechenden Kurven $n(\mu)$ für DMFT und DIA sind auf der Skala der Abb. 5.19 nicht zu unterscheiden.

Unsere Resultate sind in guter Übereinstimmung mit den CDMFT-Rechnungen von Koch *et al.* für den Mott-Übergang im 1D-Hubbard-Modell [74]. Die systematische Untersuchung der Konvergenz der Elektronendichte n in CDMFT mit der Anzahl der korrelierten Plätze bzw. der Bad-Plätze lässt erwarten, dass die Selbstenergie in der Nähe des Metall-Isolator-Übergangs eine starke \mathbf{k} -Abhängigkeit besitzt. Die Konvergenz mit der Anzahl der korrelierten Plätze im kritischen Bereich wird dadurch deutlich langsamer. Andererseits zeigt bereits ein Cluster mit zwei korrelierten Plätzen eine deutliche Verbesserung gegenüber der DMFT-Rechnung. Unsere VCA-Rechnungen für $L_c = 2$ und $L_c = 4$ ($n_s = 2$) in Abb. 5.17 nahe am kritischen Wert μ_c bestätigen diese Beobachtungen.

5.3 Auswahlkriterien für Referenzsysteme

Die Konvergenz charakteristischer Größen des Mott-Isolators bei Halbfüllung wird hauptsächlich durch die Anzahl der korrelierten Plätze bestimmt. So lässt sich der Mott-Isolator für Teilchen-Loch-Symmetrie bereits gut durch Cluster mit wenigen korrelierten Plätzen beschreiben, für die ausschließlich das Intra-Cluster-Hopping als Variationsparameter optimiert wird. Gemessen an der Grundzustandsenergie wird durch diese Optimierung allerdings eine nur unbedeutende Verbesserung im Vergleich mit der CPT (VCA ohne Parameteroptimierung) erzielt. Auch die unabhängige Optimierung weiterer oder sogar aller Intra-Cluster-Nearest-Neighbor-Hopping-Parameter ergibt nur einen kleinen Energiegewinn verglichen mit der Energieabsenkung, die durch Vergrößerung des Clusters erzielt

werden kann. Mit zunehmendem Abstand vom Clusterrand konvergieren die optimalen Hopping-Parameter in diesem Fall schnell zum „physikalischen“ Wert. Hopping-Parameter, die die Kettenränder miteinander verbinden, verschwinden am stationären Punkt (d. h. das System bevorzugt offene Randbedingungen). Das Gleiche gilt für Hopping-Parameter, die eine Verletzung der Teilchen-Loch-Symmetrie bedingen würden, wie z. B. Next-Nearest-Neighbor-Hopping.

Typisch für Cluster-Mean-Field-Näherungen ist die Verbesserung der Ergebnisse (Grundzustandsenergie und Bandlücke) mit zunehmender Wechselwirkung, da räumliche Fluktuationen an Bedeutung verlieren. Die Daten für mittlere und starke Kopplung resultieren aus Rechnungen, für die die Variationsparameter im Referenzsystem nach Optimierung nahe an den entsprechenden Werten des Modellsystems liegen. Dagegen sind große Abweichungen der Variationsparameter (mehr als 100%) vom Modellsystem offensichtlich günstig, um die Physik im Bereich schwacher Wechselwirkung zu beschreiben.

Die zusätzliche Verwendung einer unendlichen oder großen Anzahl von Bad-Plätzen erscheint unnötig. Einige *wenige* Bad-Plätze können die Ergebnisse allerdings deutlich verbessern. Die Rechnungen haben gezeigt, dass die Bad-Plätze bevorzugt an korrelierte Plätze am Rand des Clusters ankoppeln, während die Hybridisierung zu Plätzen im Clusterinneren nahezu verschwindet. Diese Beobachtung ist konsistent mit den Auswahlregeln für CDMFT-Rechnungen, nach denen das Bad nur an die Clusteroberfläche ankoppelt [74]. Wie sich herausgestellt hat, resultiert aus der Verwendung von Bad-Plätzen generell eine verbesserte Grundzustandsenergie, die Konvergenz zum exakten Ergebnis wird durch Bad-Plätze jedoch kaum beschleunigt. Es ist vielmehr wesentlich effektiver, anstelle zusätzlicher Bad-Plätze weitere korrelierte Plätze zu verwenden, sofern man an der Grundzustandsenergie interessiert ist. Dagegen haben Bad-Plätze bei der Bestimmung des Gaps Δ im Ein-Teilchen-Anregungsspektrum einen markanten Einfluss auf die Größe der Bandlücke, wodurch die Bedeutung lokaler Korrelationen für das Ein-Teilchen-Spektrum untermauert wird. Referenzsysteme mit gerader Anzahl an Bad-Plätzen je korreliertem Platz (am Clusterrand) sind in diesem Fall Clustern ohne Bad-Plätze, aber mit entsprechend größerer Anzahl an korrelierten Plätzen überlegen.

Insbesondere bei der Untersuchung dotierter Systeme (füllungsabhängiger Mott-Übergang, metallische Phase abseits von Halbfüllung) sind Bad-Plätze als Ladungsreservoirs von entscheidender Bedeutung. Bereits ohne Verwendung von Bad-Plätzen, nur unter Variation einer globalen On-Site-Energie, ergibt sich ein kontinuierlicher Verlauf der Elektronendichte n als Funktion des chemischen Potentials μ . Obwohl dieses Ergebnis eine klare Verbesserung gegenüber direkten Clustermethoden und CPT-Rechnungen darstellt, besteht das Hauptproblem weiterhin darin, dass die Teilchenzahl im Cluster konstant bleibt. Ausgehend von einem halbgefüllten Cluster werden die Ergebnisse somit immer weniger zuverlässig, je stärker das Modellsystem dotiert wird. Andererseits lässt sich dieser Nachteil durch Verwendung eines Referenzsystems, das mindestens einen Bad-Platz pro korreliertem Platz enthält ($n_s \geq 2$), beheben. Während die Gesamtzahl der Elektronen im Cluster konstant bleibt (Halbfüllung $N'_{\text{tot}} = L'$), kann die Elektronendichte auf den *korrelierten* Plätzen und entsprechend die Füllung im Modellsystem kontinuierlich im gesamten μ -Bereich variiert werden.

Diese Methode funktioniert für Cluster mit L_c korrelierten Plätzen und $n_s - 1 = 1$ zusätzlichen Bad-Platz pro korreliertem Platz in einem weiten Dotierungsbereich. Hervorragende Übereinstimmung mit dem exakten Bethe-Ansatz-Ergebnis $n(\mu)$ zeigt sich für Füllungen kleiner als $n \approx 0.75$. In der Nähe von Halbfüllung liefert die VCA weiterhin qualitativ zufriedenstellende Ergebnisse, vergleichbar mit CDMFT, überschätzt das kritische

chemische Potenzial allerdings leicht. Beim Übergang zu Halbfüllung $n \rightarrow 1$ ergeben sich numerische Schwierigkeiten, die Divergenz in der Kompressibilität ist aber klar erkennbar. Als besonders geeignet hat sich der Cluster aus Abb. 5.15, C ($L_c = 2$ und $n_s = 2$) herausgestellt, der sowohl eine gute Beschreibung der metallischen Phase als auch des Mott-Isolators erlaubt.

Unsere Analyse der Clustermethoden macht deutlich, dass eine angemessene Untersuchung des zweidimensionalen Hubbard-Modells abseits von Halbfüllung im Rahmen der VCA die Verwendung von Bad-Plätzen voraussetzt. Ergänzend zu den Rechnungen aus Kap. 4 werden wir uns daher im Folgenden auf Cluster mit Bad-Freiheitsgraden als Referenzsystem konzentrieren.

Kapitel 6

2D-Hubbard-Modell: Variational Cluster Approach mit Bad-Plätzen

In Analogie zu Kap. 4 beschreiben wir das Referenzsystem in der Form $\hat{H}' = \hat{H}'_{\text{fix}} + \hat{H}'_{\text{var}}$. Wir verwenden $L_c = 4$ und $n_s = 2$, d. h. wir koppeln an jeden korrelierten Platz des 2×2 -Clusters je einen Bad-Platz an. Unser Referenzsystem lässt sich somit durch

$$\begin{aligned}
 \hat{H}'_{\text{fix}} &= -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} - \mu \sum_{i\sigma} (\hat{n}_{i\sigma} + \hat{n}_{b,i\sigma}) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \\
 \hat{H}'_{\text{var}} &= \varepsilon \sum_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma} + h \sum_i \eta_i (\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}) \\
 &\quad + \varepsilon_b \sum_{i\sigma} \hat{n}_{b,i\sigma} + h_b \sum_i \eta_i (\hat{n}_{b,i\uparrow} - \hat{n}_{b,i\downarrow}) \\
 &\quad + \sum_{i\sigma} \left(V_{\eta_i \cdot \sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{a}_{i\sigma} + \text{H.c.} \right)
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

darstellen mit der Abkürzung $\eta_i = e^{i\mathbf{Q}r_i}$ ($\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$). In Ergänzung zu den Variationsparametern ε und h aus Gl. 4.1 betrachten wir die On-Site-Energie ε_b und ein antiferromagnetisches Feld h_b auf den Bad-Plätzen sowie die (spinabhängige) Hybridisierung V_\uparrow bzw. V_\downarrow (siehe Abb. 6.1). Ohne zusätzliche Randbedingungen sind folglich sechs unabhängige Parameter zu optimieren.

6.1 Teilchen-Loch-Symmetrie

Wir betrachten zunächst wieder das halbgefüllte 2D-Hubbard-Modell am Teilchen-Lochsymmetrischen Punkt $\mu = U/2$ (d. h. ausschließlich Nearest-Neighbor-Hopping). Als Konsequenz lässt sich die Anzahl unabhängiger Variationsparameter reduzieren. Es folgt die bekannte Bedingung $\varepsilon = 0$ für die korrelierten Plätze und zusätzlich $\varepsilon_b = \mu$ sowie $V_\uparrow = V_\downarrow = V$ unter Berücksichtigung der Bad-Plätze. Zu optimieren sind daher nur noch die antiferromagnetischen Felder h auf den korrelierten Plätzen bzw. h_b auf den Bad-Plätzen und die Hybridisierung V . In den Rechnungen wird ein halbgefüllter Cluster verwendet.

6.1.1 Antiferromagnetischer Grundzustand

Obwohl im Prinzip alle Ein-Teilchen-Parameter des Referenzsystems unabhängig voneinander zu optimieren sind, zahlt sich der damit verbundene numerische Aufwand nicht

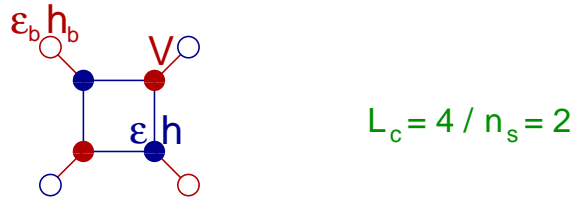


Abbildung 6.1: Referenzsystem $L_c = 4/n_s = 2$ (d. h. 2×2 -Cluster mit je einem Bad-Platz je korreliertem Platz) mit Variationsparametern. Details siehe Text.

notwendigerweise aus. Vielmehr haben unsere Rechnungen gezeigt, dass die Betrachtung einiger weniger Variationsparameter oftmals ausreicht, um zufriedenstellende Ergebnisse zu erzielen (siehe z. B. die unabhängige Optimierung aller Hopping-Parameter in Kap. 5.1.3). Welche der Parameter h , h_b und V entscheidend für die Qualität der Lösung sind, soll daher im Folgenden untersucht werden.

Wahl der Variationsparameter

Der Verlauf der optimalen Variationsparameter als Funktion von U ist in Abb. 6.2 zu sehen. Während die Hybridisierung V in allen unseren Rechnungen als Variationsparameter berücksichtigt wird, haben wir sowohl eine unabhängige Optimierung von h und h_b durchgeführt als auch die Fälle $h = 0$ bzw. $h_b = 0$ mit h_b bzw. h als einzigem Variationsparameter neben V betrachtet. Der zugehörige antiferromagnetische Ordnungsparameter m als Funktion der Wechselwirkung ist in Abb. 6.3 dargestellt.

Wie sich herausstellt, liefern die unabhängige Optimierung der Felder h und h_b sowie die Optimierung von h_b mit $h = 0$ praktisch übereinstimmende Werte für den Ordnungsparameter (Abb. 6.3). Durchgezogene und gestrichelte blaue Kurven liegen aufeinander. Ebenfalls zeigt sich ein vergleichbarer Verlauf des optimalen Werts der Hybridisierung V als Funktion von U (Abb. 6.2), insbesondere für große Wechselwirkung. Anhand von Abb. 6.2 ist bei Variation des Weiss-Felds auf den korrelierten Plätzen $h(U \rightarrow \infty) = 0$ zu erwarten, wodurch sich die gute Übereinstimmung der Daten erklärt. Im Bereich schwacher Wechselwirkung (hier $U < 4$) können bei unabhängiger Optimierung von h und h_b drei Lösungen gefunden werden. Allerdings ist es nicht gelungen, diese Ergebnisse konsistent mit der in Abb. 6.2 dargestellten Lösung für $U \geq 4$ zu verbinden, weswegen nur die Daten ab $U = 4$ gezeigt werden.¹ Eine Optimierung des antiferromagnetischen Felds h ausschließlich auf den korrelierten Plätzen ($h_b = 0$) führt im Gegensatz zu obigen Resultaten mit Variation von h_b auf ein deutlich schlechteres Ergebnis für den Ordnungsparameter m . Insbesondere lässt sich aus Abb. 6.3 (Inset) der Wert $m(U \rightarrow \infty) = 1$ ablesen, d. h. es kann keine Verbesserung gegenüber Mean-Field-Rechnungen erzielt werden.

Diese Ergebnisse legen nahe, $h = 0$ zu verwenden und nur das antiferromagnetische Feld h_b auf den Bad-Plätzen zu optimieren. Ein Vergleich mit CDMFT bestärkt diese Vorgehensweise. Wie sich zeigen lässt, gilt in CDMFT exakt $h = 0$ [32], d. h. die antiferromagnetische Ordnung wird nur durch das Bad stabilisiert. Bemerkenswerterweise ist offensichtlich ein einzelner Bad-Platz je korreliertem Platz im Rahmen der VCA ausreichend, um dieses Ergebnis in guter Näherung zu reproduzieren.

Für $U = 8$ findet sich als optimaler Wert des antiferromagnetischen Felds auf den korre-

¹Für $U \geq 4$ lässt sich neben der in Abb. 6.2 angegebenen Lösung eine weitere Lösung finden. Aufgrund des unerwartet großen Werts von $|h|$ (wir finden $|h| > 1$) wird diese Lösung verworfen und nicht dargestellt.

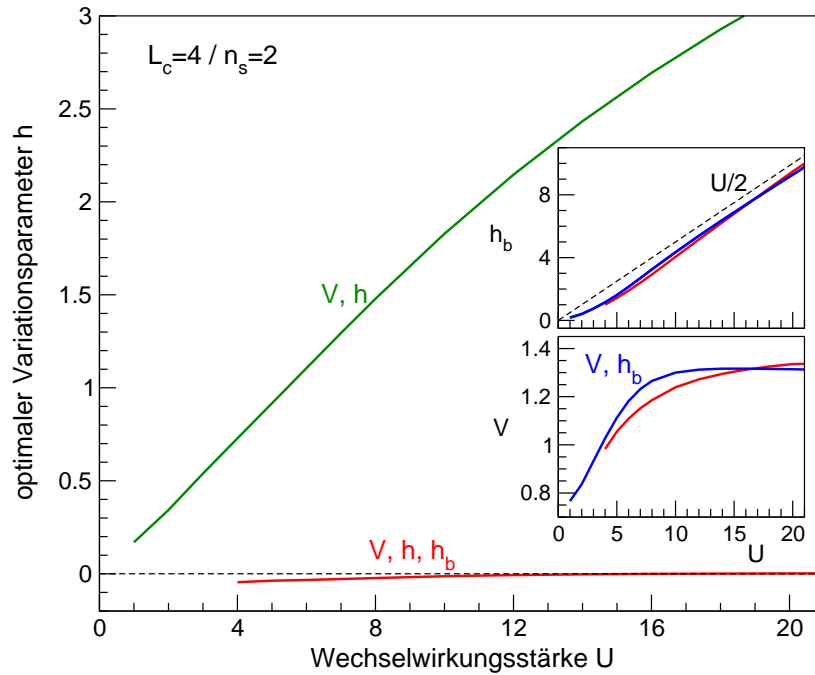


Abbildung 6.2: Verlauf der optimalen Variationsparameter V , h und h_b als Funktion der Wechselwirkung U für Referenzsystem Abb. 6.1. Sofern h bzw. h_b nicht als Variationsparameter berücksichtigt wurde, gilt $h = 0$ bzw. $h_b = 0$. $N_{cl} = 20 \times 20$.

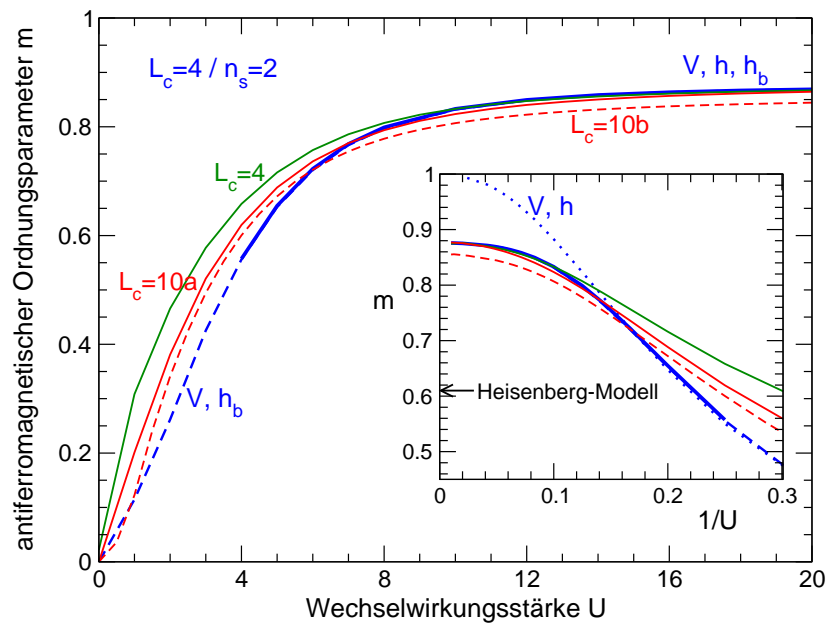


Abbildung 6.3: Antiferromagnetischer Ordnungsparameter m als Funktion der Wechselwirkung U für ausgewählte Referenzsysteme. Das Inset zeigt das Verhalten für $U \rightarrow \infty$, der exakte Wert $m \approx 0.61$ [25] ist zum Vergleich angegeben. $N_{cl} = 20 \times 20$.

lierten Plätzen $h = -0.023$ bei gleichzeitiger Optimierung von h und h_b (die vergleichbare Rechnung ohne Bad-Plätze ($L_c = 4$, Abb. 4.1) ergibt $h = 0.196$). Geben wir $h = 0$ vor, so ändern sich die optimalen Werte der Variationsparameter h_b von 2.93 auf 3.26 bzw. V von 1.19 auf 1.27. Durch die entsprechende Verschiebung der optimalen Ein-Teilchen-Parameter der Bad-Plätze kann offensichtlich der Einfluss des Weiss-Felds h auf den korrelierten Plätzen (teilweise) berücksichtigt werden. Der antiferromagnetische Ordnungsparameter bleibt praktisch unverändert ($m = 0.80$), allerdings erweist sich dieser ohnehin als äußerst robust gegenüber Veränderungen der Clustergröße oder Clustergeometrie (siehe Abb. 6.3). Geringe Unterschiede der Lösungen mit unabhängiger Optimierung von h bzw. mit $h = 0$ zeigen sich allerdings z. B. in der Größe der Bandlücke. Der Wert des Gaps ändert sich von $\Delta = 4.281$ auf $\Delta = 4.356$.

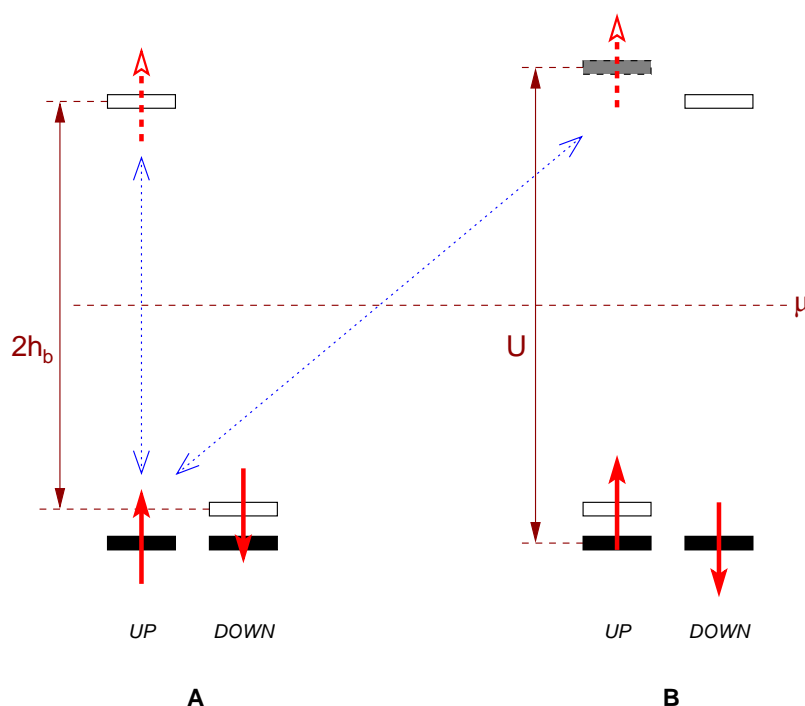


Abbildung 6.4: Schematische Darstellung des antiferromagnetischen Felds h_b auf den Bad-Plätzen. Diskussion siehe Text.

Interessant ist der Verlauf des optimalen antiferromagnetischen Felds h_b als Funktion der Wechselwirkung (siehe Abb. 6.2, Inset). Wie die Daten erkennen lassen, gilt im Limes starker Wechselwirkung $h_b \approx \mu = U/2$. Abb. 6.4 veranschaulicht die Situation für zwei benachbarte Gitterplätze A und B . Dargestellt sind die Ein-Teilchen-Niveaus für Spin- \uparrow bzw. Spin- \downarrow der korrelierten Plätze (schwarz) und der Bad-Plätze (weiß), wir nehmen $h = 0$ an. Doppelbesetzung eines korrelierten Platzes bedingt aufgrund der lokalen Coulomb-Wechselwirkung ein um U verschobenes Energieniveau (grau). Wir gehen davon aus, dass der (korrelierte) Gitterplatz A mit einem \uparrow -Elektron besetzt ist, der entsprechende Bad-Platz enthält ein \downarrow -Elektron (dargestellt durch rote Pfeile). Wie Abb. 6.4 erkennen lässt, sind die Ein-Teilchen-Niveaus der beiden Elektronen wegen $h_b \approx \mu$ in etwa identisch. Unter diesem Gesichtspunkt ist ein Hüpfen des \uparrow -Elektrons auf dem korrelierten Platz bei A auf den Bad-Platz bei A vergleichbar mit dem Hüpfen auf den benachbarten korrelierten Platz bei B (blaue Linien), denn die zu überwindende potentielle Energie ist nahezu gleich. (Eine

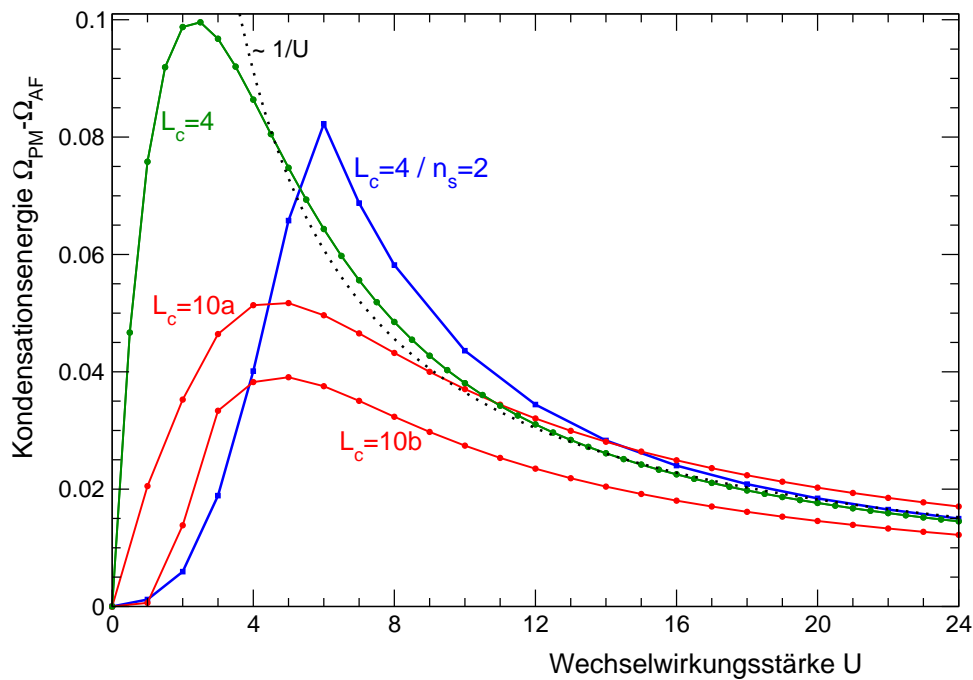


Abbildung 6.5: Energiedifferenz $\Delta\Omega = \Omega_{\text{PM}} - \Omega_{\text{AF}}$ zwischen paramagnetischer und antiferromagnetischer Lösung in Abhängigkeit von U . Unabhängig vom Referenzsystem zeigt sich das erwartete $1/U$ -Verhalten für starke Wechselwirkung (vergleiche mit gepunkteter Linie). $N_{\text{cl}} = 20 \times 20$.

analoge Betrachtung des \downarrow -Elektrons ergibt die gleiche Symmetrie zwischen korrelierten Plätzen und Bad-Plätzen in Bezug auf deren Energieniveaus für $h_b \approx \mu$.)

Mit deutlicher Vergrößerung des antiferromagnetischen Felds h_b (bei gleichbleibendem Wert der Hybridisierung V) darf der Einfluss der Bad-Plätze mehr und mehr vernachlässigt werden. Im Limes $h_b \rightarrow \infty$ finden wir ein vollbesetztes sowie ein unbesetztes Niveau für jeden Bad-Platz. Der energetisch große Abstand zu den Niveaus der korrelierten Plätze erlaubt es, die Bad-Plätze unabhängig von den korrelierten Plätzen zu betrachten. Der gedankliche (da keine Optimierung) Grenzfall $h_b \rightarrow \infty$ ist offensichtlich identisch zur Rechnung ohne Bad-Plätze (d. h. $L_c = 4$, Abb. 4.1). Eine starke Verringerung von h_b dagegen führt im Limes $h_b \rightarrow 0$ dazu, dass die beiden Elektronen (mit Spin- \uparrow und Spin- \downarrow) pro Gitterplatz gleichmäßig auf die (vier) Niveaus des korrelierten Platzes und des Bad-Platzes verteilt werden. Antiferromagnetische Ordnung kann dadurch nicht beschrieben werden.

Die Betrachtung der beiden Grenzfälle $h_b \rightarrow 0$ bzw. $h_b \rightarrow \infty$ liefert keine strenge Begründung für den gefundenen Wert $h_b \approx \mu$, veranschaulicht aber die Wirkung des antiferromagnetischen Felds h_b auf die *korrelierten* Plätze. Berücksichtigt man zusätzlich die Symmetrie zwischen korrelierten Plätzen und Bad-Plätzen in Bezug auf deren Energieniveaus für $h_b \approx \mu$ (Abb. 6.4), so erscheint das Ergebnis zumindest plausibel.

Vergleich mit ausgewählten Referenzsystemen

Eine Gegenüberstellung der VCA-Rechnungen für ausgewählte Cluster ist in Abb. 6.5 anhand der Energiedifferenz $\Delta\Omega = \Omega_{\text{PM}} - \Omega_{\text{AF}}$ als Funktion der Wechselwirkung zu sehen. Wie in Kap. 4.1 diskutiert wurde, berücksichtigt $\Delta\Omega$ nur den Anteil antiferromagnetischer

Kopplungen zwischen den Clustern. Unabhängig von der Wahl des Referenzsystems ergibt sich ein antiferromagnetischer Grundzustand für alle $U > 0$. Unter der Annahme, dass die Energiedifferenz zwischen Paramagnet und Antiferromagnet als Maß für die Energieanregungen dienen kann, die die antiferromagnetische Ordnung zerstören, ist ein Vergleich von $\Delta\Omega$ mit der Néel-Temperatur T_N aus DCA-Rechnungen möglich. Wir haben T_N bereits in Kap. 4.3 als Maß für die Stärke antiferromagnetischer Korrelationen herangezogen – mit dem Hinweis, dass der Wert von T_N aus DCA-Rechnungen in $D = 2$ diejenige Temperatur beschreibt, ab der antiferromagnetische Korrelationen die Cluster Grenzen überschreiten. Da der Anteil der Entropie zwischen Paramagnet und Antiferromagnet für endliche Temperaturen in $\Delta\Omega$ unberücksichtigt bleibt, kann der Vergleich mit T_N nur als Indiz für die Qualität der VCA-Rechnung gewertet werden. Mit Hilfe der DCA lässt sich das Maximum der Néel-Temperatur T_N bei $3W/4 = 6$ [55] finden und stimmt damit mit dem Maximum in der Energiedifferenz $\Delta\Omega$ unserer VCA-Rechnung mit Bad-Plätzen ($L_c = 4/n_s = 2$) überein. Die entsprechende Rechnung ohne Bad-Plätze ($L_c = 4$) zeigt eine deutliche Verschiebung des Maximums in Richtung kleinerer Wechselwirkung. Auch die beiden Cluster mit $L_c = 10$ Gitterplätzen liefern ein Maximum bei $U < 3W/4$.

Im Gegensatz zur Rechnung ohne Bad-Plätze mit $L_c = 4$ führt die Verwendung von Bad-Plätzen auf einen Verlauf der Energiedifferenz $\Delta\Omega$, der mit dem erwarteten exponentiellen Verhalten für $U \rightarrow 0$ (siehe Gl. 2.17, Größe der Bandlücke) kompatibel ist. Ebenso lassen sich die Ergebnisse der VCA-Rechnung mit Hilfe des ($L_c=10b$)-Clusters für schwache Wechselwirkung als exponentielles Verhalten interpretieren (die analoge Rechnung mit $L_c = 10a$ zeigt keinen exponentiellen Verlauf von $\Delta\Omega$). Da die VCA im Limes $U \rightarrow 0$ exakt wird, ist die Ursache der abweichenden Resultate in der endlichen Modellgröße zu vermuten. Wie wir schon in Kap. 4.1 erwähnt haben, kann die Perfect-Nesting-Bedingung Gl. 2.16 nur im Idealfall unendlicher Systemgröße exakt erfüllt werden. Eine Untersuchung des antiferromagnetischen Ordnungsparameters des Hubbard-Modells in $D = 3$ für kleine Wechselwirkung U mit Hilfe der Two-Site Dynamical Impurity Approximation zeigt eine starke Abhängigkeit der Lösung von der Modellgröße (siehe [42], Abb. 4.14). Die Aufteilung des Referenzsystems in entkoppelte Cluster führt zudem zu einer Verletzung der Translationssymmetrie und ein wohldefinierter \mathbf{k} -Raum existiert nicht mehr. Der Grenzfall starker Wechselwirkung scheint dagegen eher unkritisch, unsere VCA-Rechnungen zeigen unabhängig vom verwendeten Referenzsystem das erwartete $1/U$ -Verhalten (Abb. 6.5).

Der Einfluss des Referenzsystems auf den antiferromagnetischen Ordnungsparameter m ist Abb. 6.3 zu entnehmen. Gemessen am Wert $m(U \rightarrow \infty) \approx 0.86$ liefert der ($L_c=10b$)-Cluster das beste Ergebnis (Abb. 6.3, Inset). Allerdings ist die Verbesserung gegenüber dem Wert $m \approx 0.88$ der übrigen Cluster (einschließlich des Clusters mit Bad-Plätzen, $L_c = 4/n_s = 2$) unbedeutend im Vergleich zum exakten Ergebnis $m \approx 0.61$. Wie bereits erwähnt zeigt sich ein deutlich abweichendes Verhalten für den ($L_c=4/n_s=2$)-Cluster, sofern nur das Weiss-Feld h auf den korrelierten Plätzen optimiert wird ($h_b = 0$). In diesem Fall reproduziert die VCA-Rechnung das Mean-Field-Ergebnis $m = 1$.

6.1.2 Paramagnet: Mott-Hubbard-Übergang in $D = 2$

Unabhängig vom antiferromagnetischen Grundzustand existiert im Rahmen der (Cluster-) Mean-Field-Rechnungen eine paramagnetische Lösung. Diese paramagnetische Phase des halbgefüllten Hubbard-Modells ist in $D = \infty$ gekennzeichnet durch das Auftreten eines Koexistenzbereichs $U_{c1}(T) < U < U_{c2}(T)$ für Temperaturen T unterhalb eines kritischen Werts T_c . Die Phasengrenze $U_c(T)$ bestimmt sich aus dem Vergleich der freien Energien

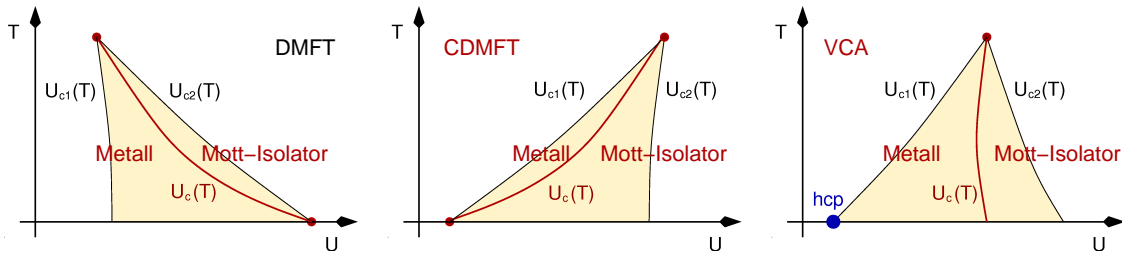


Abbildung 6.6: Schematische Darstellung des Koexistenzbereichs (gelb) der paramagnetischen metallischen und isolierenden Lösung im Hubbard-Modell bei Halbfüllung. Der Phasenübergang (erster Ordnung) ist durch $U_c(T)$ bestimmt (rote Linie). (links) DMFT-Szenario: Die Phasengrenze $U_c(T)$ endet in den kritischen Punkten (rot) $U_c(T_c)$ und $U_c(0) = U_{c2}$ (kontinuierliche Phasenübergänge). (Mitte) Mögliches Phasendiagramm in CDMFT mit $U_c(0) = U_{c1}$. (rechts) Abwesenheit eines kritischen Punkts im Rahmen unserer VCA-Rechnungen (Referenzsystem Abb. 6.1) für $T = 0$. Es existiert ein *Hidden Critical Point* (blau) bei U_{c1} mit kontinuierlichem Metall-Isolator-Übergang innerhalb einer metastabilen Phase.

der beiden Lösungen und führt auf einen Phasenübergang erster Ordnung für $T < T_c$. Ein Phasenübergang zweiter Ordnung tritt am kritischen Punkt $U_c(T_c)$ auf. Für Temperaturen $T > T_c$ findet sich keine scharfe Phasengrenze mehr (Crossover). Da der Einfluss nicht-lokaler magnetischer Korrelationen auf Ein-Teilchen-Anregungen im Rahmen von DMFT vernachlässigt wird, zeigt der paramagnetische Mott-Isolator eine makroskopische Grundzustandsentropie $S = L \ln 2$. Dieses Mean-Field-Artefakt hat entscheidenden Einfluss auf das Phasendiagramm: Für endliche Temperaturen $T > 0$ stabilisiert der große Wert der Entropie den Mott-Isolator gegenüber der metallischen Lösung (siehe Abb. 6.6, links). Folglich nimmt der Wert $U_c(T)$ mit abnehmender Temperatur $T < T_c$ zu. Als Konsequenz ergibt sich ein weiterer Phasenübergang zweiter Ordnung am kritischen Punkt $U_c(0) = U_{c2}(0)$. Für $T = 0$ ist die metallische Lösung stabil im gesamten Koexistenzbereich.

Im Gegensatz zum reinen Mean-Field-Szenario können im Rahmen von Clustererweiterungen der DMFT *kurzreichweitige* antiferromagnetische Korrelationen berücksichtigt werden, wodurch die 2^L -fache Grundzustandsentartung des Mott-Isolators aufgehoben wird. Ein mögliches Phasendiagramm ist in Abb. 6.6 (Mitte) skizziert, bei dem, abweichend vom DMFT-Phasendiagramm, die metallische Lösung für große Temperaturen stabilisiert wird. Die Phasengrenze $U_c(T)$ nimmt mit abnehmender Temperatur ab und endet in dem kritischen Punkt $U_c(0) = U_{c1}(0)$ (Phasenübergang zweiter Ordnung). Für $T = 0$ ist jetzt der Isolator im gesamten Koexistenzbereich stabil. (Die Darstellung des Phasendiagramms Abb. 6.6 (Mitte) folgt dem Vorschlag von Park *et al.* [75] aus der Analyse ihrer CDMFT-Rechnungen (2×2 -Cluster) zum 2D-Hubbard-Modell.)

Unsere ($T=0$)-VCA-Rechnungen mit dem ($L_c=4/n_s=2$)-Cluster deuten eine weitere Möglichkeit für das Phasendiagramm an. Wir finden einen Koexistenzbereich $U_{c1} < U < U_{c2}$, in dem sowohl eine metallische als auch eine isolierende Lösung für $T = 0$ existiert. Der Endpunkt $U_c(0)$ der Phasengrenze $U_c(T)$ fällt in unseren VCA-Rechnungen weder mit U_{c1} noch mit U_{c2} zusammen, so dass der Mott-Metall-Isolator-Übergang auch für $T = 0$ ein Phasenübergang erster Ordnung bleibt (siehe Abb. 6.6, rechts). Daraus lässt sich weiterhin auf eine dritte (thermodynamisch instabile) Lösung innerhalb des Koexistenzbereichs schließen. Unter Einbeziehung dieses metastabilen Zustands findet sich ein kontinuierlicher Phasenübergang vom Isolator zum Metall für $U_{\text{hcp}}=U_{c1}(T = 0)$. Mit abnehmender

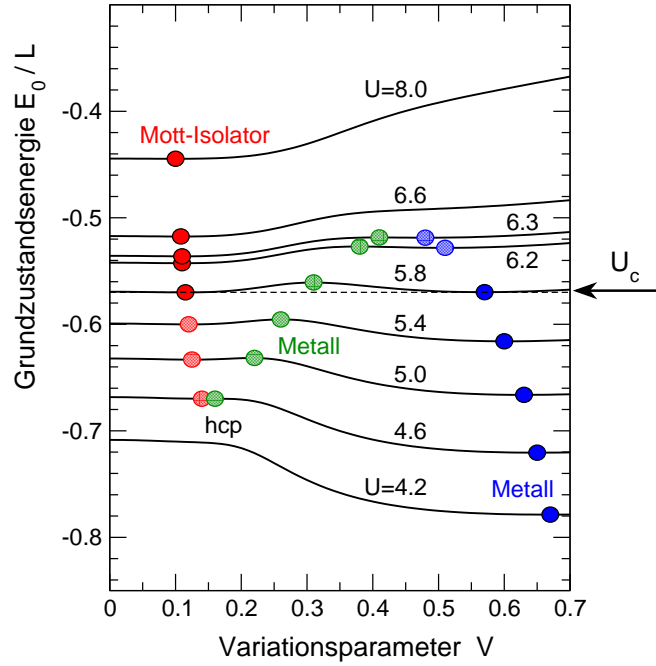


Abbildung 6.7: Darstellung der Grundzustandsenergie (pro Platz) als Funktion $E_0(V) = \Omega_t(V) + \mu N$ für unterschiedliche Wechselwirkung U bei Halbfüllung. Stationäre Punkte sind durch Kreise gekennzeichnet. Gefüllte Kreise markieren die stabile metallische (blau) bzw. isolierende (rot) Lösung, metastabile Phasen sind durch schraffierte Kreise dargestellt. Ein Phasenübergang erster Ordnung ist bei U_c (Pfeil) zu beobachten. Die dritte (metastabile) metallische Lösung (grün) ermöglicht einen kontinuierlichen Übergang vom Metall zum Isolator am Hidden Critical Point (hcp).

Wechselwirkung ist ein stetiger Verlauf des Quasiteilchengewichts (\mathbf{K} -Vektor $(\pi, 0)$ des *Clusters*) und der Zustandsdichte $\rho(\omega = 0)$ zu beobachten, beide Größen verschwinden an U_{hcp} . Das Szenario eines kontinuierlichen Phasenübergangs ist allerdings auf die instabile Lösung beschränkt und wird folglich nicht realisiert („Hidden Critical Point“).

Zur Untersuchung des paramagnetischen Zustands mit Hilfe des Clusters Abb. 6.1 betrachten wir die Hybridisierung V als Variationsparameter ($h = 0$, $h_b = 0$; $\varepsilon = 0$, $\varepsilon_b = \mu$ wegen Teilchen-Loch-Symmetrie). Die Ergebnisse sind in Abb. 6.7 dargestellt. Für $U < U_{c2} \approx 6.35$ lässt sich eine metallische Lösung mit vergleichsweise großem optimalen V finden, die optimale Hybridisierung nimmt mit zunehmender Wechselwirkung U ab. Für $U > U_{c1} \approx 4.6$ existiert eine Lösung mit deutlich kleinerem optimalen Wert der Hybridisierung sowie weniger starker Abhängigkeit von U . Diese Lösung beschreibt eine isolierende Phase, wie aus Abb. 6.8 anhand der lokalen Green-Funktion $G_{ii}(i\omega)$ und der Selbstenergie $\Sigma_{\mathbf{K}}(i\omega)$ für $U = 5.8$ (innerhalb des Koexistenzbereichs $U_{c1} < U < U_{c2}$) zu erkennen ist. $\Sigma_{\mathbf{K}}(i\omega)$ ergibt sich durch Fourier-Transformation der Selbstenergie $\Sigma(i\omega)$ bzgl. des *Clusters* mit den vier \mathbf{K} -Vektoren $(0, 0)$, $(\pi, 0)$, $(0, \pi)$ und (π, π) . Aufgrund der Teilchen-Loch-Symmetrie gilt für den Imaginärteil der Selbstenergie $\text{Im}\Sigma_{(0,0)}(i\omega) = \text{Im}\Sigma_{(\pi,\pi)}(i\omega)$. Wie aus unseren Daten hervorgeht ist die Selbstenergie analytisch für $\mathbf{K} = (0, 0)$, während sie für $\mathbf{K} = (\pi, 0)$ einen Pol bei $\omega = 0$ entwickelt (Abb. 6.8, rechts). Daraus resultiert ein verschwindender Wert der lokalen Green-Funktion $G_{ii}(i\omega)$ im Limes $\omega \rightarrow 0$ in der isolierenden Phase. Qualitativ das gleiche Verhalten zeigen die CDMFT-Rechnungen von Park

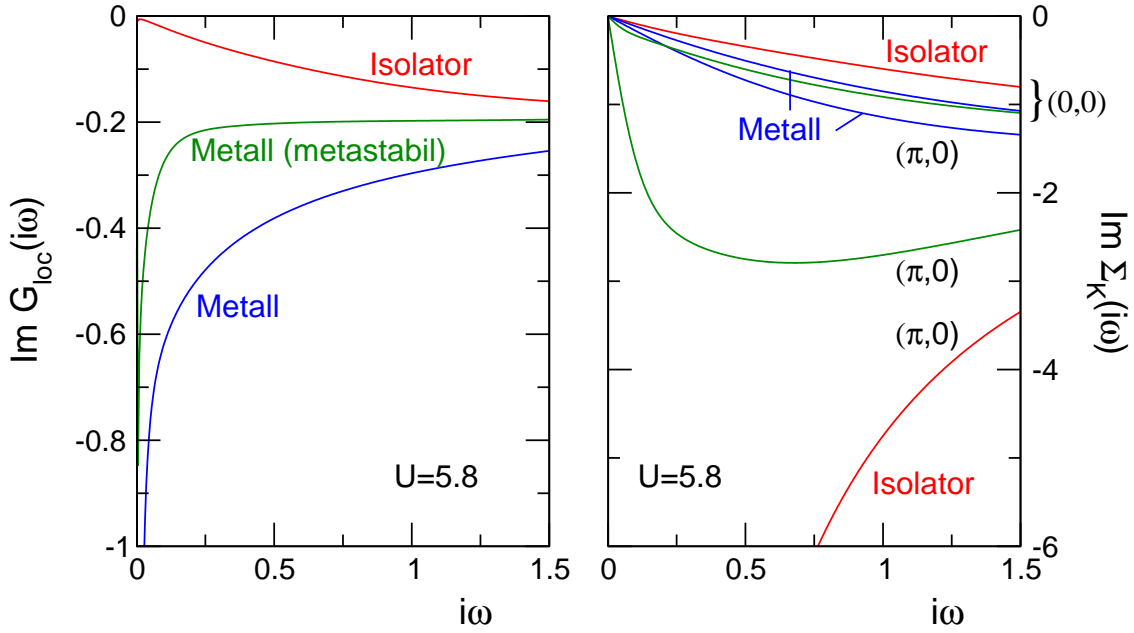


Abbildung 6.8: Imaginärteil der lokalen Green-Funktion $G_{\text{loc}}(i\omega) := G_{ii}(i\omega)$ (links) und der Selbstenergie $\Sigma_{\mathbf{K}}(i\omega)$ für $\mathbf{K} = (0,0)$ und $\mathbf{K} = (\pi,0)$ (rechts) innerhalb des Koexistenzbereichs ($U = 5.8$). Farbliche Kennzeichnung der Lösungen wie in Abb. 6.7.

et al. [75] für endliche Temperaturen T . Die metallische Lösung für $U = 5.8$ ist dagegen durch einen endlichen Wert der Green-Funktion $G_{ii}(i\omega)$ sowie eine analytische Selbstenergie $\Sigma_{\mathbf{K}}(i\omega)$ für $\omega \rightarrow 0$ charakterisiert, die Abhängigkeit von \mathbf{K} ist deutlich geringer als in der isolierenden Phase.

Durch Vergleich der Grundzustandsenergien der verschiedenen Lösungen ergibt sich ein Phasenübergang erster Ordnung vom Metall zum Isolator bei $U_c \approx 5.79$. Die kritische Wechselwirkung U_c im Rahmen unserer Clusternäherung ist wesentlich geringer als der entsprechende Wert in DMFT. Die Werte $U_c^{\text{(DMFT)}} \approx 11$ [76] und $U_c^{\text{(DMFT)}} \approx 12$ [77] stimmen gut mit unserem Mean-Field-Ergebnis $U_c^{\text{(DIA)}} \approx 11.3$ (Two-Site DIA) im Rahmen der SFT überein. Bereits die Two-Site DIA als einfache Mean-Field-Approximation ist in der Lage, das DMFT-Szenario (Abb. 6.6, links) zu reproduzieren, einschließlich der diskutierten makroskopischen Grundzustandsentropie [12]. Im Gegensatz dazu ergibt unsere Clusternäherung (Referenzsystem Abb. 6.1) (sowohl für das Metall als auch) für den Mott-Isolator eine Grundzustandsentropie $S = 0$ und führt damit auf ein abweichendes Phasendiagramm mit Phasenübergang erster Ordnung für $T = 0$. Dieses Resultat ist konsistent mit CDMFT (Continuous Time Quantum Monte Carlo) [75], sofern wir von einer Verbreiterung des Koexistenzbereichs für niedrige Temperaturen T ausgehen.

Aus Abb. 6.7 ist die Existenz einer weiteren dritten Lösung (grün dargestellt) innerhalb der Koexistenzbereiche zu erkennen, die die metallische Phase mit dem Isolator stetig verbindet. Wegen der höheren Grundzustandsenergie handelt es sich hierbei allerdings um einen metastabilen Zustand. Wie sowohl anhand des endlichen Quasiteilchengewichts als auch aus der endlichen Zustandsdichte für $\omega = 0$ folgt (siehe Abb. 6.9), handelt es sich bei dieser dritten Lösung um eine metallische Phase im *gesamten* Koexistenzbereich. Folglich finden wir einen kritischen Punkt U_{c1} mit einem *kontinuierlichen* Metall-Isolator-Übergang (allerdings innerhalb der thermodynamisch instabilen Lösung), der bereits erwähnte Hid-

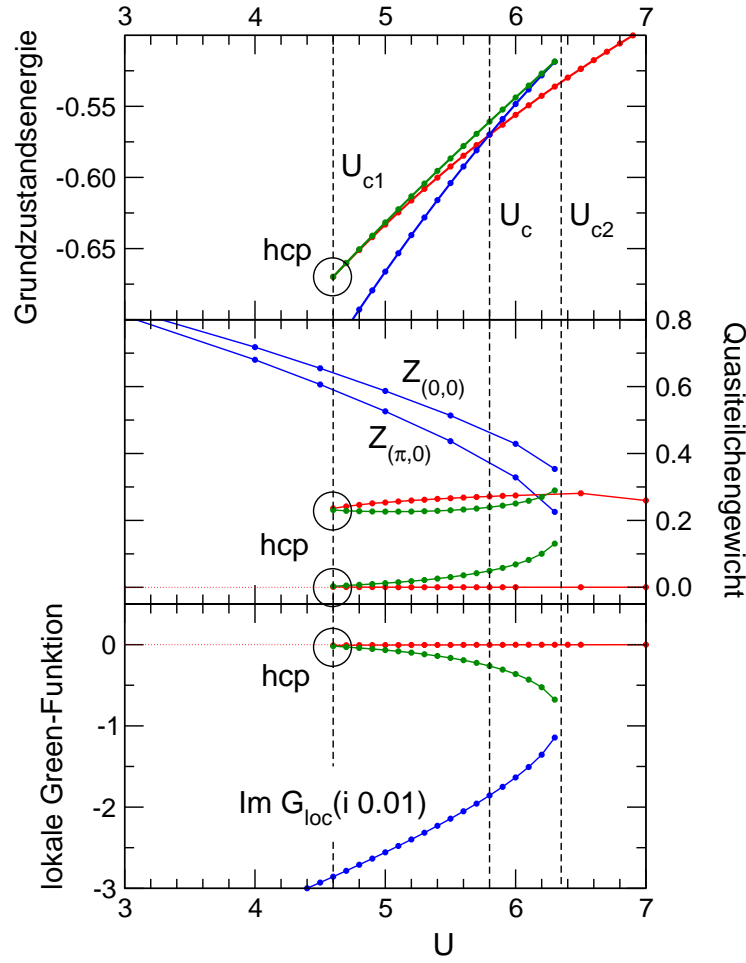


Abbildung 6.9: Imaginärteil der lokalen Green-Funktion $\text{Im } G_{ii}(i0.01)$, Quasiteilchengewicht $Z_{\mathbf{K}} = 1/(1 - \partial\Sigma_{\mathbf{K}}(0)/\partial\omega)$ und Grundzustandsenergie E_0 als Funktionen der Wechselwirkung U .

den Critical Point. Der dritte stationäre Punkt erinnert an die dritte Lösung, die in DMFT für endliche Temperaturen gefunden werden kann [78] und ebenfalls eine kontinuierliche Verbindung zwischen der metallischen und der isolierenden Phase ermöglicht.

Abb. 6.10 zeigt die („lokale“) Zustandsdichte $A_{\mathbf{K}}(\omega)$ für die vier \mathbf{K} -Punkte des Clusters im Metall (oben) und im Isolator (unten) für $U = 5.8$ nahe des Mott-Übergangs. Die Zustandsdichte ist durch

$$A_{\mathbf{K}}(\omega) = \frac{1}{L_c} \sum_{ab} e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b)} A_{\mathbf{R}_i + \mathbf{r}_a, \mathbf{R}_i + \mathbf{r}_b}(\omega) \quad (6.2)$$

definiert, die Vektoren \mathbf{R} und \mathbf{r} sind wie in Abb. 3.2 zu verstehen. Formal ist unsere Clusterapproximation des *Ein-Band*-Hubbard-Modells identisch mit einer dynamischen Mean-Field-Betrachtung des *Vier-Band*-Hubbard-Modells, die \mathbf{K} -Vektoren können den vier Orbitalen zugeordnet werden. Ein Übergang vom Metall zum Isolator am Hidden Critical Point U_{c1} tritt (im Sinne dieser Interpretation) gleichzeitig in allen vier Bändern auf (vergl. Abb. 6.10). Für $\mathbf{K} = (\pi, 0)$ und $\mathbf{K} = (0, \pi)$ ist der Phasenübergang vergleichbar mit einem Mott-Hubbard-Metall-Isolator-Übergang. Aufgrund der Asymmetrie der Zustands-

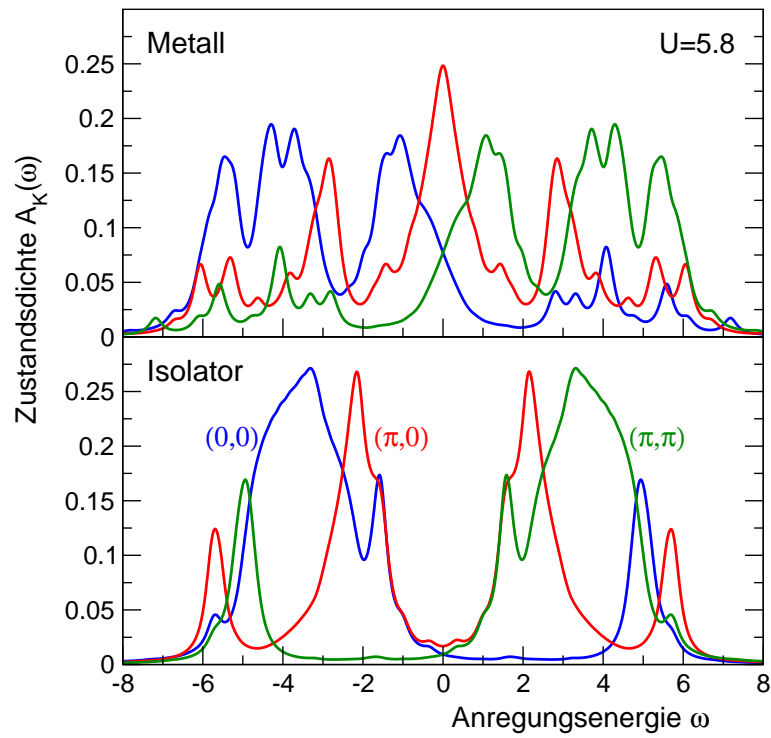


Abbildung 6.10: \mathbf{K} -abhängige Zustandsdichte $A_{\mathbf{K}}(\omega)$ (Gl. 6.2) für die paramagnetische metallische (oben) und die isolierende Phase (unten) für $U = 5.8$ in der Nähe des Mott-Übergangs. Zur Darstellung wurde eine Lorentz-Verbreiterung $\eta = 0.2$ gewählt. Es ist $A_{(\pi,0)}(\omega) = A_{(0,\pi)}(\omega)$.

dichte $A_{\mathbf{K}}(\omega)$ lässt sich der Phasenübergang für $\mathbf{K} = (0, 0)$ und $\mathbf{K} = (\pi, \pi)$ weder als Mott-Hubbard-Übergang (keine Teilchen-Loch-Symmetrie) noch als Phasenübergang vom Metall in einen Bandisolator (das $(0, 0)$ -Band ist nicht voll besetzt, das (π, π) -Band ist nicht leer) auffassen.

Unabhängige Optimierung weiterer Variationsparameter

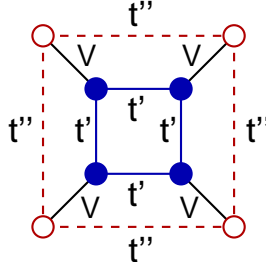


Abbildung 6.11: Referenzsystem mit $L_c = 4$ korrelierten Plätzen (gefüllte blaue Kreise) und $n_s - 1 = 1$ Bad-Platz (rote Kreise) je korreliertem Platz. Neben der Hybridisierung V werden das Hopping t' zwischen den korrelierten Plätzen sowie das Hopping t'' zwischen den Bad-Plätzen als Variationsparameter betrachtet.

Neben der Hybridisierung V können weitere Ein-Teilchen-Parameter wie das Hopping zwischen den korrelierten Plätzen t' oder zwischen den Bad-Plätzen t'' (siehe Abb. 6.11) als Variationsparameter in Betracht gezogen werden. Während bei Verwendung einer endlichen Anzahl an Bad-Plätzen $n_s - 1$ durch Optimierung von t'' der Raum \mathcal{S} der Test-Selbstenergien vergrößert werden kann, ist der Limes $n_s \rightarrow \infty$ (kontinuierliches Bad) äquivalent zur CDMFT. Unterschiedliche Darstellungen des kontinuierlichen Bads können durch unitäre Transformationen aufeinander abgebildet werden, so dass eine Kopplung t'' zwischen Bad-Plätzen, die an unterschiedliche korrelierte Plätze gebunden sind, unnötig wird.

Für den optimalen Wert t''_{opt} des Hoppings zwischen den Bad-Plätzen finden wir $|t''_{\text{opt}}| < 1/25$ im betrachteten Bereich der Wechselwirkungsstärke U . Die Optimierung des Hoppings zwischen den korrelierten Plätzen $t'_{\text{opt}} = t + \Delta t'_{\text{opt}}$ führt auf einen positiven Wert $\Delta t'_{\text{opt}} < t/10$. Ein wesentlich größerer Wert für $\Delta t'_{\text{opt}}$ ergibt sich nur im Limes $U \rightarrow 0$. Die Beschreibung delokalierter Elektronen im Bereich schwacher Wechselwirkung erfordert eine Vergrößerung des Intra-Cluster-Hoppings, um das Ausschalten des Inter-Cluster-Hoppings durch die Clusternäherung (teilweise) zu kompensieren (vergl. Kap. 5.1.1). Im Limes $n_s \rightarrow \infty$ (CDMFT) gilt dagegen $t'_{\text{opt}} = t$ [32].

Wie unsere Rechnungen zeigen, ist die Optimierung von t' und t'' unbedeutend im Vergleich zur Variation der Hybridisierung V . Eine eindimensionale Optimierung von V mit $t' = t$ und $t'' = 0$ zeigt Abweichungen der optimalen Hybridisierung von weniger als 1% verglichen mit der unabhängigen Optimierung aller drei Parameter. Der kritische Wert U_c ändert sich um weniger als 0.1%, die Änderung der Grundzustandsenergie ist vernachlässigbar.

Zusätzliche Bad-Plätze

Während dynamische Mean-Field-Methoden oft einen geeigneten Ausgangspunkt zur Beschreibung der grundlegenden Physik des Mott-Übergangs bieten, führt insbesondere die

makroskopische Grundzustandsentartung im Mott-Isolator zu einer Stabilisierung der isolierenden Lösung für endliche Temperaturen (siehe Abb. 6.6, links). Dies ist für endliche Dimensionen als ein Mean-Field-Artefakt zu sehen und kann durch unseren Cluster-(Mean-Field-)Ansatz behoben werden. Im Unterschied zu DMFT zeigen die VCA-Rechnungen ($L_c = 4$, $n_s = 2$) einen Phasenübergang erster Ordnung auch für $T = 0$. Ein kontinuierlicher Phasenübergang bei U_{hcp} (Abb. 6.6, rechts) wird nur innerhalb einer metastabilen Phase beobachtet und ist folglich nicht realisiert.

Durch Hinzunahme eines weiteren Bad-Platzes je korreliertem Platz (d. h. VCA mit $L_c = 4$, $n_s = 3$) finden Tremblay *et al.* [79] für $T = 0$ ebenfalls einen Phasenübergang erster Ordnung. Der Koexistenzbereich ($U_{c1} = 5.25$, $U_{c2} = 6.37$) ist kleiner als in der analogen Rechnung mit $n_s = 2$. Der Vergleich mit den auf $T = 0$ extrapolierten CDMFT-Werten von Park *et al.* [75] deutet auf eine schnelle Konvergenz mit zunehmender Anzahl an Bad-Plätzen hin. Darüberhinaus liegt der kritische Wert $U_c = 5.5$ für den Metall-Isolator-Übergang jetzt deutlich näher an U_{c1} . Unsere Ergebnisse in $D = 1$ zeigen allerdings auch, dass eine geeignete Beschreibung des Mott-Isolators eine gerade Anzahl an Bad-Plätzen (n_s ungerade) voraussetzt, während der metallische Zustand durch eine ungerade Anzahl an Bad-Plätzen beschrieben werden kann (siehe Kap. 5.1.5). Als mögliche Konsequenz wird sich der Abstand $U_c - U_{c1}$ bei Verwendung eines dritten Bad-Platzes ($n_s = 4$) wieder etwas vergrößern, da ein metallischer Zustand nach obiger Argumentation hier favorisiert wird. Die bereits gute quantitative Übereinstimmung mit CDMFT bei Verwendung von zwei Bad-Plätzen lässt aber nur geringe Änderungen bei Hinzunahme weiterer Bad-Plätze vermuten. Die Resultate deuten daher darauf hin, dass der Mott-Metall-Isolator-Übergang auch im Limes $n_s \rightarrow \infty$ als Phasenübergang erster Ordnung auftritt.

6.2 Dotierung des Mott-Isolators

Wie wir in Kap. 5 anhand des eindimensionalen Hubbard-Modells gezeigt haben, spielen Bad-Plätze nicht nur in Bezug auf dynamische Größen (wie dem Gap Δ im Ein-Teilchen-Anregungsspektrum) eine wesentliche Rolle, sondern sind vor allem bei der Untersuchung von dotierten Systemen als Ladungsreservoirs entscheidend. Unter Verwendung des Referenzsystems Abb. 6.1 soll daher im Folgenden das 2D-Hubbard-Modell abseits von Halbfüllung ($n < 1$) betrachtet werden.

6.2.1 Paramagnetischer Metall-Isolator-Übergang

Abb. 6.12 zeigt den Verlauf der optimalen Variationsparameter ε auf den korrelierten Plätzen, ε_b auf den Bad-Plätzen und die Hybridisierung V als Funktion des chemischen Potentials μ . Die dargestellten Ergebnisse beschreiben die paramagnetische Phase für $U = 8$ mit Nearest-Neighbor-Hopping $t = 1$. Die zugehörige Elektronendichte $n(\mu)$ ist Abb. 6.13 zu entnehmen. Es ist uns nicht gelungen, die metallische Lösung in der Nähe des Metall-Isolator-Übergangs bis Halbfüllung zu verfolgen. Stationäre Punkte können bis ca. 5% Dotierung gefunden werden. Die analoge Rechnung mit Next-Nearest-Neighbor-Hopping $t' = -0.3$ führt auf ein vergleichbares Ergebnis.

Numerische Schwierigkeiten in der Nähe von Halbfüllung bei Verwendung eines Referenzsystems mit Bad-Plätzen sind bereits bei der Untersuchung des 1D-Hubbard-Modells aufgetreten (siehe Kap. 5.2.2). Während die optimalen Werte der Variationsparameter ε und ε_b in der Nähe von Halbfüllung kein kritisches Verhalten erkennen lassen, zeigt die Hybridisierung V eine starke Abhängigkeit vom chemischen Potenzial μ . Gemäß Abb. 6.12

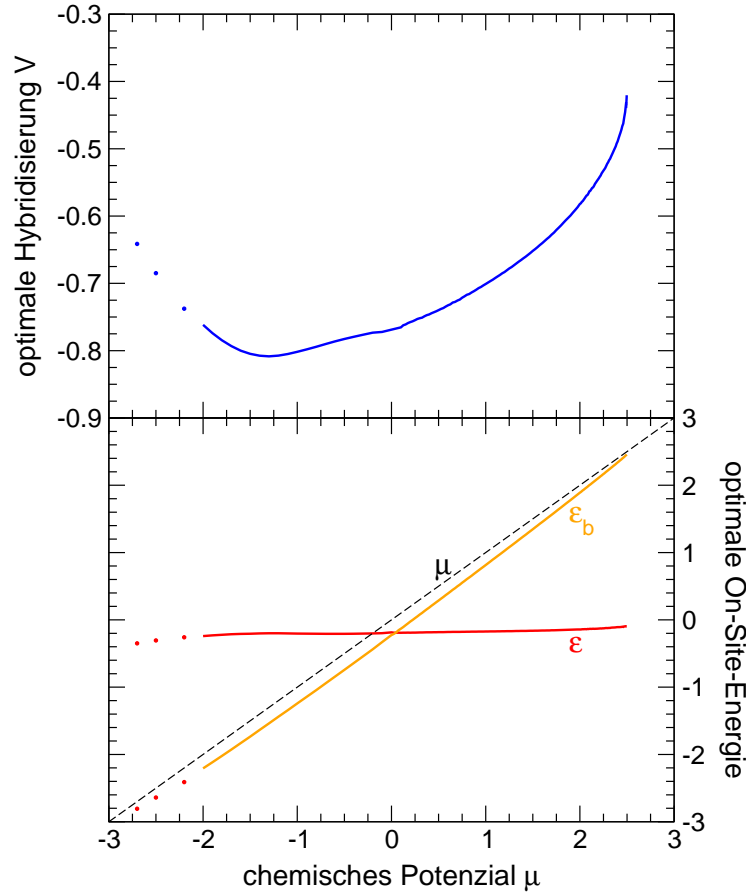


Abbildung 6.12: Optimale Variationsparameter ε auf den korrelierten Plätzen, ε_b auf den Bad-Plätzen und Hybridisierung V als Funktion des chemischen Potentials μ für $U = 8$ und Nearest-Neighbor-Hopping $t = 1$. VCA-Rechnung unter Verwendung von Referenzsystem Abb. 6.1 ($N_{cl} = 20 \times 20$).

ist kein stetiger Verlauf der optimalen Variationsparameter am Metall-Isolator-Übergang zu erwarten, die Teilchen-Loch-symmetrischen Werte liegen bei $\varepsilon = 0$ und $\varepsilon_b = \mu = 4$ sowie $V = 0.11$. Es ist zu beachten, dass die Verwendung eines Referenzsystems mit $n_s - 1 = 1$ Bad-Platz je korreliertem Platz (wie in $D = 1$) eine nahezu verschwindende Bandlücke Δ vorhersagt, so dass eine isolierende Lösung im Rahmen unserer VCA-Rechnungen nur für $\mu \approx 4$ gefunden werden kann.

Wie Abb. 6.13 zu entnehmen ist, erfüllen die Bad-Plätze hervorragend ihre Funktion als Ladungsreservoirs. Aus dem Vergleich mit der Elektronendichte n' auf den korrelierten Plätzen im Referenzsystem folgt $n' \approx n$ im gesamten betrachteten μ -Bereich. Während sich die On-Site-Energie ε auf den korrelierten Plätzen kaum mit dem Wert des chemischen Potentials ändert, liegt der optimale Wert ε_b auf den Bad-Plätzen immer etwas unter dem Wert μ ($\varepsilon_b \lesssim \mu$, siehe Abb. 6.12). Dadurch kann die Ladung mit abnehmendem chemischen Potenzial von den korrelierten Plätzen auf die Bad-Plätze fließen. Aus dem Verlauf der optimalen Hybridisierung ist ein Abkoppeln der Bad-Plätze ($V \rightarrow 0$) für $\mu \rightarrow -4$ (leeres Band) zu vermuten, so dass wegen $\varepsilon_b \lesssim \mu$ die Ladung vollständig auf die Bad-Plätze übergeht.

Unseren VCA-Resultaten für $n(\mu)$ sind in Abb. 6.13 die Ergebnisse aus CDMFT-

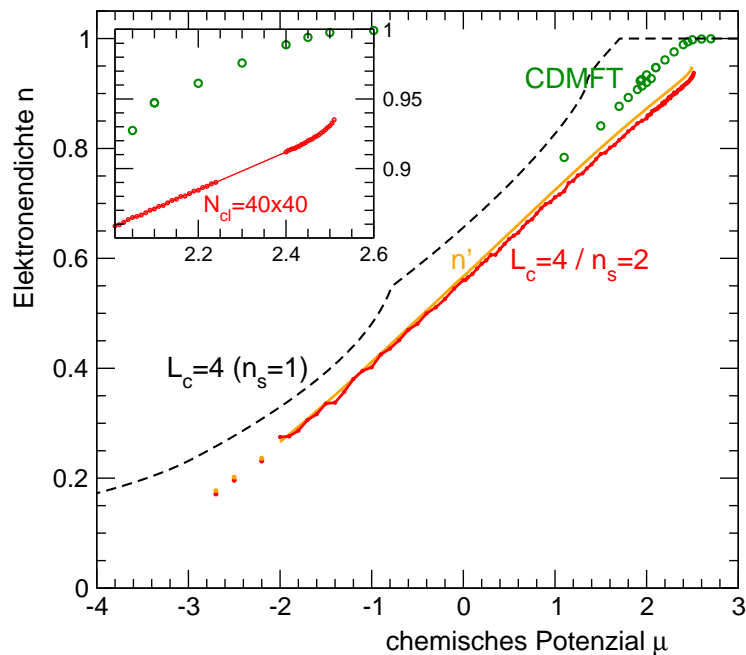


Abbildung 6.13: Elektronendichte $n(\mu)$ für die VCA-Rechnung aus Abb. 6.12 (rot), die Ergebnisse für den ($L_c=4$)-Cluster ohne Bad-Plätze sind ebenfalls zu sehen (gestrichelte schwarze Linie). Zum Vergleich der Daten sind ergänzend Resultate aus CDMFT-Rechnungen (2×2 -Cluster mit acht Bad-Plätzen) dargestellt (grün). Die CDMFT-Ergebnisse sind Ref. [80], Abb. 5.16 entnommen. Neben der Elektronendichte im Modellsystem ist zusätzlich die Elektronendichte n' auf den korrelierten Plätzen im *Referenzsystem* zu sehen (orange). Das Inset zeigt den Verlauf in der Nähe von Halbfüllung berechnet mit $N_{cl} = 40 \times 40$.

Rechnungen von Civelli [80] mit 2×2 -Cluster (mit acht Bad-Plätzen, $T = 0$) gegenübergestellt. Das kritische chemische Potenzial für den Metall-Isolator-Übergang in CDMFT beträgt $\mu_{PM} \approx 2.5$. Eine Divergenz der Ladungssuszeptibilität κ ist hier nicht zu beobachten. Unsere VCA-Rechnung ist kompatibel mit diesem Resultat, eine (lineare) Extrapolation der Daten führt auf $\mu_{PM} \approx 3.0$.²

Furukawa und Imada [81] (Quantum Monte Carlo) finden dagegen am Metall-Isolator-Übergang in $D = 2$ eine Singularität in der Kompressibilität $\kappa \propto \delta^{-1}$ ($\sqrt{\mu_{PM} - \mu(\delta)} \propto \delta$). Diese Divergenz in der Ladungssuszeptibilität ist unabhängig von Teilchen-Loch-Symmetrie sowie der Perfect-Nesting-Eigenschaft oder der Van-Hove-Singularität des $2D$ -Hubbard-Modells zu beobachten und offenbar eine universelle Eigenschaft des Mott-Übergangs in $D = 2$. Die Daten von Onoda und Imada [82] (Operator Projector Method) für $U = 8$ und $t' = 0$ lassen auf einen kritischen Wert $\mu_{PM} \approx 0.5$ schließen (siehe [82], Abb. 11). Eine deutliche Zunahme der Kompressibilität κ ist ab ca. 30% Dotierung zu beobachten. Als kritisches Verhalten der Teilchendichte im Rahmen unserer VCA-Rechnungen mag der Verlauf der Funktion $n(\mu)$ in der Nähe von Halbfüllung interpretiert werden (siehe Abb. 6.13, Inset). Allerdings ist eine Zunahme von κ erst für Dotierungen kleiner als 10% zu

²Die Verwendung einer endlichen Anzahl von Bad-Plätzen in CDMFT setzt die geeignete Wahl einer Abstandsfunktion voraus, mit deren Hilfe die optimalen Bad-Parameter bestimmt werden können. Die CDMFT-Resultate hängen von der Wahl dieser Abstandsfunktion ab [80].

sehen. Nehmen wir hier eine Divergenz der Ladungssuszeptibilität an, so ist der Mott-Übergang für $2.5 < \mu_{\text{PM}} < 2.6$ zu vermuten. Die VCA-Rechnung mit ($L_c=4$)-Cluster ohne Bad-Plätze liefert $\mu_{\text{PM}} \approx 1.7$. Der Bereich großer Dotierung und insbesondere der Limes $n \rightarrow 0$ kann aber mit Hilfe eines halbgefüllten Referenzsystems ohne Bad-Plätze nicht angemessen beschrieben werden (Abb. 6.13, gestrichelte Linie).

Wie die Berechnung der Teilchendichte n als Funktion von μ zeigt, ist die Verwendung von Bad-Plätzen (als Ladungsreservoirs) bei der Untersuchung dotierter Systeme entscheidend für die Qualität der Näherung. Die wachsende Bedeutung der Bad-Plätze mit zunehmender Dotierung kann durch eine Betrachtung der Grundzustandsenergie untermauert werden: Bei Halbfüllung bewirkt die Hinzunahme von Bad-Plätzen ($n_s = 1 \rightarrow n_s = 2$) eine Absenkung der Grundzustandsenergie von der Größenordnung $\mathcal{O}(10^{-4})$. Für 10% Dotierung dagegen ergibt sich bereits eine Energieabsenkung von der Größenordnung $\mathcal{O}(10^{-1})$ für einen Cluster mit $L_c = 4$ korrelierten Plätzen ($U = 8, t' = 0$). Beide Referenzsysteme wurden dabei als halbgefüllt angesetzt.

6.2.2 Antiferromagnetische Ordnung

Unabhängig vom verwendeten Referenzsystem ergeben unsere VCA-Rechnungen zum 2D-Hubbard-Modell, dass der Antiferromagnet bei Halbfüllung für beliebige Wechselwirkung $U > 0$ stabil ist (vergl. Abb. 6.5). Die Analyse des eindimensionalen Hubbard-Modells (Kap. 5.1.4) sowie die Untersuchung des Mott-Übergangs in $D = 2$ (siehe vorheriger Abschnitt) haben zudem die Relevanz von Bad-Plätzen bei der Berechnung dotierter Systeme aufgezeigt. Es liegt daher nahe, Referenzsystem Abb. 6.1 zu verwenden, um einen möglichen antiferromagnetischen metallischen Zustand ($n < 1$) im Rahmen der VCA zu beschreiben und die Untersuchung des zweidimensionalen Hubbard-Modells in der Nähe des Mott-Übergangs abzuschließen.

Ausgehend von den Resultaten in Abschnitt 6.1.1 setzen wir $h = 0$ auf den korrelierten Plätzen, $\varepsilon, \varepsilon_b, h_b, V_\uparrow$ und V_\downarrow werden als Variationsparameter optimiert. Die Größe der Bandlücke im Antiferromagneten bei Halbfüllung lässt einen Metall-Isolator-Übergang bei $\mu_{\text{AF}} = 1.82$ erwarten (die unabhängige Optimierung von h führt auf $\mu_{\text{AF}} = 1.86$). Innerhalb des Gaps ist das großkanonische Potenzial durch

$$\Omega = E_0 - \mu L_c \quad (6.3)$$

gegeben (es gilt $N = L_c$). Der Wert der Grundzustandsenergie E_0 ist innerhalb der Bandlücke konstant. Der Vergleich des großkanonischen Potenzials im antiferromagnetischen Isolator gemäß Gl. 6.3 mit der paramagnetischen metallischen Lösung ergibt, dass der Paramagnet für $\mu < 1.91$ die energetisch stabile Phase ist (siehe Abb. 6.17). Für die paramagnetische Lösung gilt an dieser Stelle $n \approx 0.85$. Daraus ist auf einen phasenseparierten Zustand für $\mu = 1.91$ zu schließen.

Um ein Gesamtbild der paramagnetischen und antiferromagnetischen Lösungen vergleichbar mit Abb. 4.5 zu gewinnen, haben wir versucht, mit Hilfe des ($L_c=4/n_s=2$)-Clusters eine antiferromagnetische metallische Phase zu bestimmen. Es ist allerdings nicht gelungen, ausgehend vom Heisenberg-Isolator die Lösung für $\mu_{\text{AF}} < 1.82$ weiterzuverfolgen und einen dotierten antiferromagnetischen Zustand zu finden. Auch unter Verwendung unterschiedlicher Startparameter in der Nähe des erwarteten Metall-Isolator-Übergangs konnte kein stationärer Punkt des Selbstenergiefunktionals für ein antiferromagnetisches Metall gefunden werden. Wie wir in Kap. 4.2.2 gesehen haben, ist der Koexistenzbereich von paramagnetischer und antiferromagnetischer Phase durch das Auftreten einer dritten,

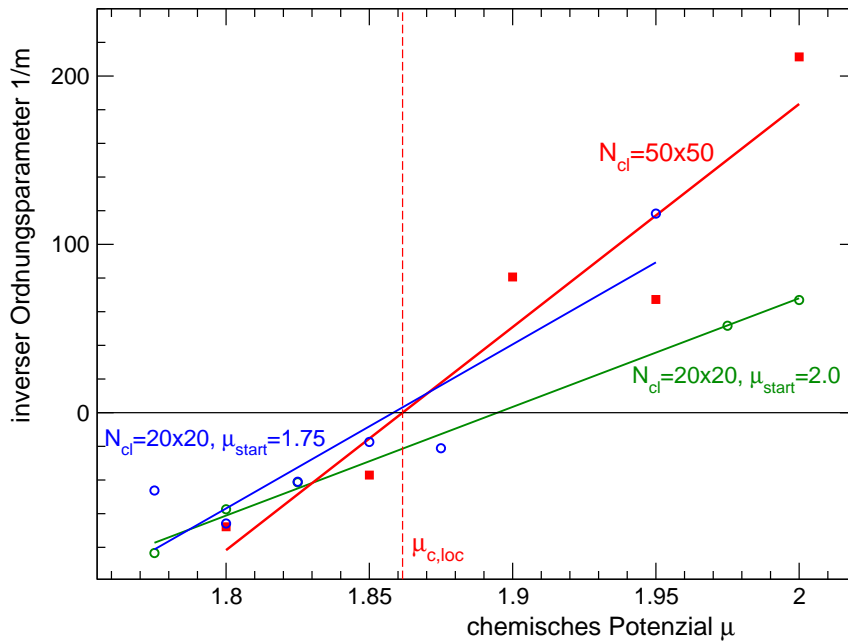


Abbildung 6.14: Inverse Magnetisierung $1/m$ als Funktion des chemischen Potentials μ für $U = 8$ (Nearest-Neighbor-Hopping) im Paramagneten. Repräsentative Ergebnisse für verschiedene Modellgrößen und unterschiedliche Startwerte μ_{start} für die Parameteroptimierung. VCA-Rechnungen mit Referenzsystem Abb. 6.1 und $h_{\text{AF}} = 10^{-3}$ (Variationsparameter ε , ε_b , h_b , V_{\uparrow} , V_{\downarrow}).

energetisch instabilen Lösung charakterisiert. Aus unseren Rechnungen geht hervor, dass mit dem Einsetzen der dritten Lösung bei $\mu_{c,\text{loc}}$ eine Divergenz der magnetischen Suszeptibilität χ_{AF} (Gl. 4.7) in der paramagnetischen Phase zu beobachten ist. Der Paramagnet ist lokal instabil für $\mu > \mu_{c,\text{loc}}$.

Das divergente Verhalten von χ_{AF} soll auch zur Bestimmung des kritischen $\mu_{c,\text{loc}}$ in unseren VCA-Rechnungen mit Bad-Plätzen ausgenutzt werden. Wir verwenden ein kleines physikalisches antiferromagnetisches Feld $h_{\text{AF}} = \mathcal{O}(10^{-3})$ (Gl. 4.4), so dass die Magnetisierung eine lineare Funktion von h_{AF} ist. Als Variationsparameter werden ε , ε_b , h_b sowie V_{\uparrow} und V_{\downarrow} optimiert, es wird $h = h_{\text{AF}}$ verwendet (siehe Diskussion oben). Repräsentative Ergebnisse sind in Abb. 6.14 als inverse Magnetisierung $1/m$ dargestellt. Legt man die Rechnung mit $N_{\text{cl}} = 50 \times 50$ zugrunde, so ergibt sich $\mu_{c,\text{loc}} = 1.86$ aus der Interpolation der Datenpunkte. Wie Abb. 6.14 erkennen lässt, weichen die Ergebnisse der dargestellten VCA-Rechnungen (für unterschiedliche Systemgröße und abweichende Startparameter für die Optimierung) voneinander ab.³ Der kritische Wert $\mu_{c,\text{loc}} = 1.86$ ist offensichtlich mit einem deutlichen Fehler behaftet. Aus der Gesamtheit unserer Rechnungen darf $\mu_{c,\text{loc}} \in [1.8; 2]$ angenommen werden.

Ein äquivalenter Ansatz zur Bestimmung des kritischen chemischen Potentials $\mu_{c,\text{loc}}$

³Die Funktion $\Omega_t(\mathbf{t}')$ lässt zum Teil Finite-Size-Effekte („Knicke“) aufgrund zu geringer Modellgröße erkennen. Eine Vergrößerung des Modellsystems führt zu einer Glättung von $\Omega_t(\mathbf{t}')$, allerdings auf Kosten der Rechenzeit. Dennoch erweist sich die Bestimmung stationärer Punkte des Selbstenergiefunktionals auch bei genügend großem Modellsystem als schwierig, hauptsächlich wegen der zunehmenden Wahrscheinlichkeit bei multidimensionaler Optimierung (mit dem Downhill-Simplex-Algorithmus) lokale Minima des Gradienten zu finden.

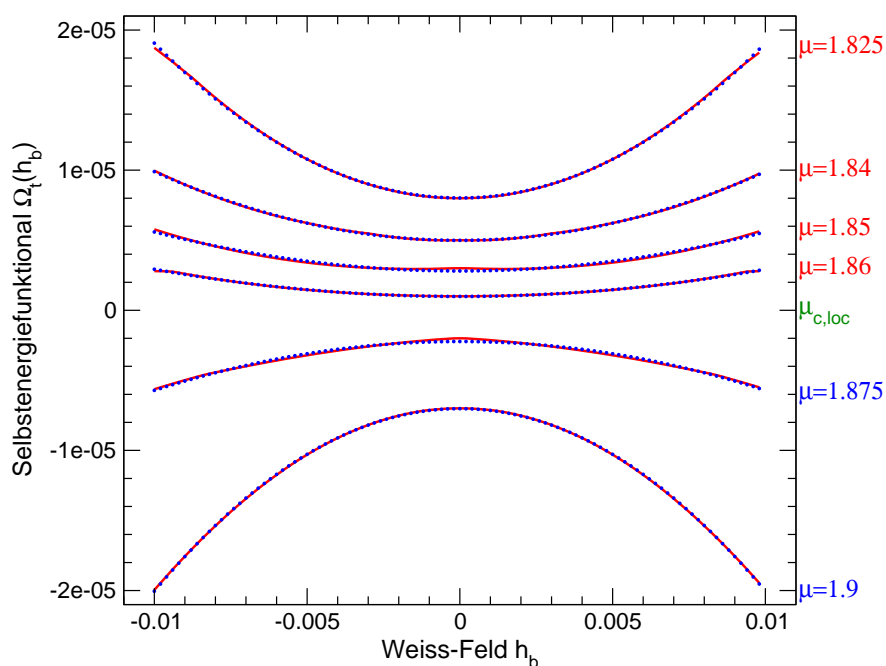


Abbildung 6.15: (rot) Selbstenergiefunktional als Funktion des antiferromagnetischen Felds auf den Bad-Plätzen $\Omega_t(h_b)$ für die paramagnetische Lösung gemäß Gl. 6.4. Das kritische $\mu_{c,loc}$ wird durch den Übergang von einem Minimum zu einem Maximum der Funktion $\Omega_t(h_b)$ für $h_b = 0$ festgelegt. Rechnungen mit $N_{cl} = 40 \times 40$. (blau) Fit der Daten an die quadratische Funktion $\Omega_{fit}(h_b) = a_1 h_b^2 + a_0$.

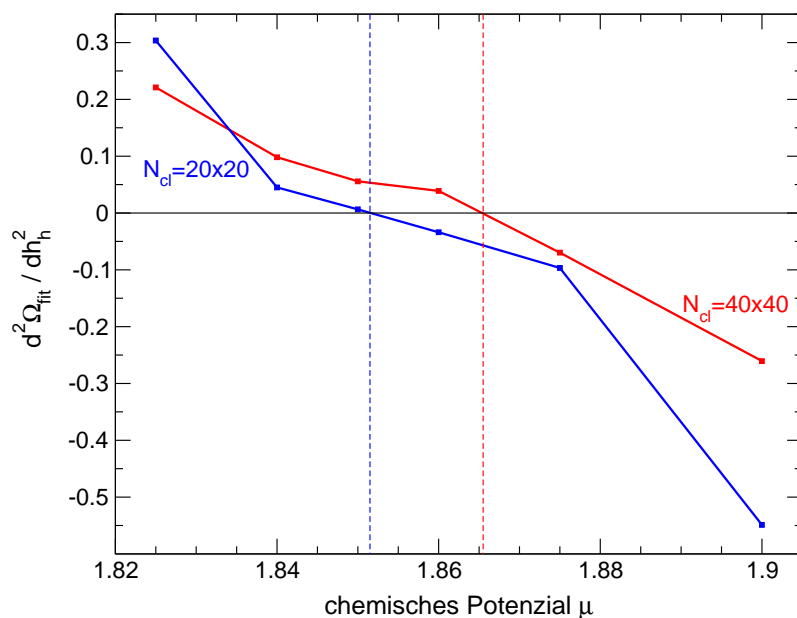


Abbildung 6.16: Krümmung $d^2\Omega_{fit}^2/dh_b^2$ an der Stelle $h_b = 0$ für die Daten aus Abb. 6.15. Ergänzt zur Rechnung mit $N_{cl} = 40 \times 40$ sind die Ergebnisse für $N_{cl} = 20 \times 20$ dargestellt. Es folgt $\mu_{c,loc} = 1.866$ bzw. $\mu_{c,loc} = 1.851$.

liegt in der Berechnung des Selbstenergiefunktionals als Funktion des Variationsparameters h_b für die paramagnetische Lösung. Der Wechsel von einem Minimum zu einem Maximum der Funktion $\Omega_t(h_b)$ bei $h_b = 0$ kennzeichnet den Übergang von der lokal stabilen zur lokal instabilen Phase (vergl. Kap. 4.2.2). Die Ergebnisse zeigt Abb. 6.15. Um mögliche Finite-Size-Effekte aufgrund der Modellgröße zu minimieren, wurde die Rechnung mit vergleichsweise großem Modellsystem $N_{cl} = 40 \times 40$ durchgeführt. Die Ergebnisse sind in der Form

$$\Omega_t(h_b) - \Omega_t(0) + \text{const} \cdot (1.865 - \mu) \quad (6.4)$$

dargestellt. Zur Bestimmung der Krümmung sind die Daten im betrachteten Intervall $[-0.01; 0.01]$ an die Funktion $\Omega_{\text{fit}}(h_b) = a_1 h_b^2 + a_0$ gefittet. Die zugehörige Krümmung $d\Omega_{\text{fit}}^2/d^2h_b$ für $h_b = 0$ ist in Abb. 6.16 zu sehen und ergibt $\mu_{c,\text{loc}} = 1.866$. Einen geringfügig abweichenden Wert $\mu_{c,\text{loc}} = 1.851$ liefert die Rechnung mit $N_{cl} = 20 \times 20$. Unabhängig von der verwendeten Modellgröße liegt das kritische chemische Potenzial $\mu_{c,\text{loc}}$ damit innerhalb der Bandlücke der antiferromagnetischen Lösung. Die Größe der Bandlücke Δ ist überdies (im Rahmen der numerischen Genauigkeit) unabhängig von der Systemgröße $N_{cl} = 20 \times 20$ bzw. $N_{cl} = 40 \times 40$.

Unsere Daten führen somit auf das folgende Szenario: Von Halbfüllung ausgehend, ist der Mott-Heisenberg-Isolator *global* stabil bis zum kritischen Wert $\mu_c = 1.91$. Für $\mu < \mu_c$ gilt $\Omega_{\text{PM}} < \Omega_{\text{AF}}$, solange eine antiferromagnetische Lösung existiert. Von wesentlicher Bedeutung ist hier allerdings, dass der Paramagnet erst ab $\mu < \mu_{c,\text{loc}} = 1.866$ *lokal* stabil ist. Daraus folgt, dass der Antiferromagnet einerseits bei $\mu_c = 1.91$ energetisch instabil wird, ein Phasenübergang in die paramagnetische Phase andererseits wegen der lokalen Instabilität der paramagnetischen Lösung nicht realisiert werden kann. Unter Ausschluss weiterer Lösungen führt dieses Szenario auf einen Sprung des großkanonischen Potentials an der Stelle $\mu_{c,\text{loc}}$ mit $\Delta\Omega = \Omega_{\text{PM}} - \Omega_{\text{AF}} = -0.007$ ($\Delta\Omega = 0.058$ am Teilchen-Loch-symmetrischen Punkt).

Ein Sprung in Ω erscheint aber unphysikalisch. Vielmehr erwartet man generell einen stetigen Verlauf des großkanonischen Potentials als Funktion von μ . Möglicherweise ist ein direkter Vergleich zwischen paramagnetischer und antiferromagnetischer Lösung im Rahmen einer Cluster-Mean-Field-Beschreibung generell mit einiger Vorsicht zu genießen, da räumliche Fluktuationen aufgrund der stärkeren Lokalisierung der Elektronen im Antiferromagneten (siehe Diskussion Kap. 4.2.1) eine geringere Rolle spielen als im Paramagneten (und damit die Approximation für die paramagnetische und die antiferromagnetische Phase nicht von der gleichen Qualität ist). Aus dem unphysikalischen Verhalten der Lösungen mag ebenso auf die Existenz weiterer Phasen geschlossen werden, die im Rahmen unserer Rechnungen nicht berücksichtigt wurden. Z. B. kann eine supraleitende Lösung vorliegen, ebenso sind Phasen mit Ladungsordnungen wie Stripes- oder Checkerboard-Strukturen denkbar.

In Abb. 6.17 sind die Ergebnisse unserer VCA-Rechnungen mit Bad-Plätzen zum 2D-Hubbard-Modell zusammengetragen. Um eine paramagnetische Lösung im gesamten μ -Bereich darstellen zu können, haben wir die isolierende Lösung für Teilchen-Loch-Symmetrie gemäß Gl. 6.3 (in Analogie zum Antiferromagneten) auch für $\mu < 4$ angenommen. Ein Schnittpunkt mit der metallischen Lösung ist bei $\mu = 2.39$ zu finden ($n \approx 0.9$). Unsere Extrapolation der Daten unter der Annahme einer Divergenz in der Kompressibilität führt dagegen auf $2.5 < \mu_{\text{PM}} < 2.6$ für den Metall-Isolator-Übergang ($\mu_{\text{PM}} \approx 3.0$ bei linearer Extrapolation). Unter Berücksichtigung der numerischen Schwierigkeiten, die metallische Lösung in der Nähe von Halbfüllung zu bestimmen, sowie der Eigenschaft des Referenzsystems ($n_s = 2$), einen verschwindenden Wert für die Bandlücke vorherzusagen, lässt

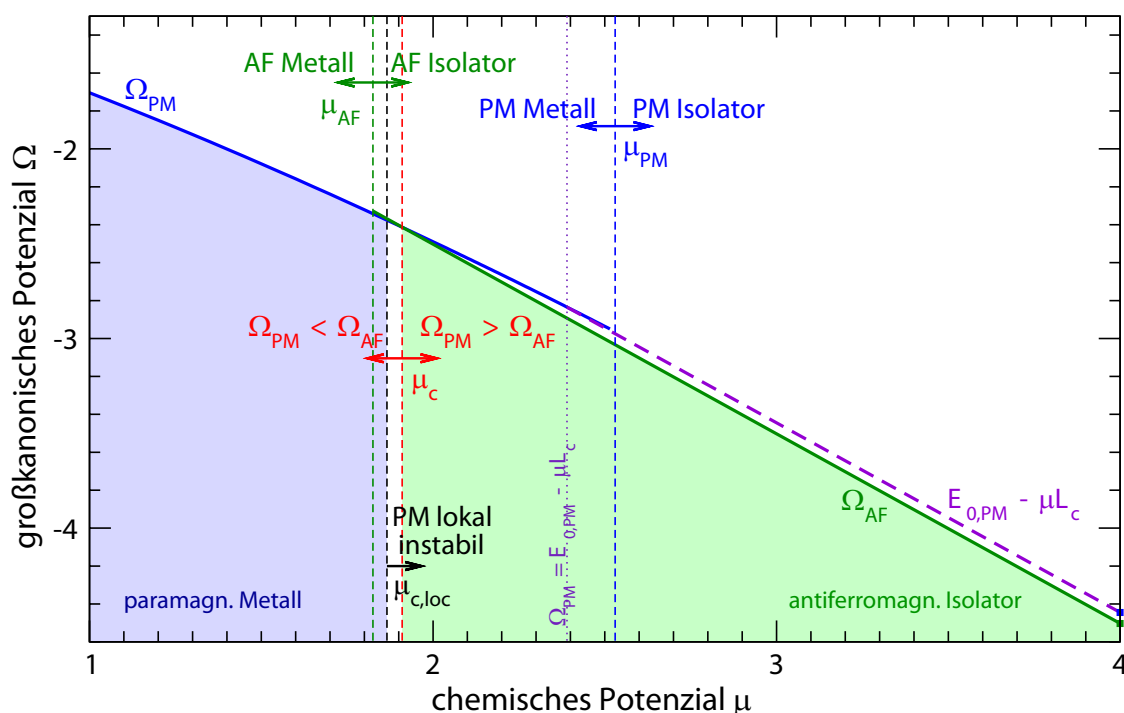


Abbildung 6.17: Großkanonisches Potenzial Ω für das zweidimensionale Hubbard-Modell berechnet mit Referenzsystem Abb. 6.1 ($U = 8, t' = 0$). Der paramagnetische und der antiferromagnetische Isolator werden gemäß Gl. 6.3 mit Hilfe der Grundzustandsenergie bei Teilchen-Loch-Symmetrie berechnet. Zur Diskussion der Daten siehe Text.

sich damit ein konsistentes Bild für den Mott-Übergang im Paramagneten konstruieren. Der antiferromagnetische Isolator ist energetisch stabil bis $\mu = 1.91$, aufgrund der lokalen Instabilität des Paramagneten kann eine metallische Phase erst für $\mu < 1.866$ realisiert werden. Zuverlässige Aussagen zum Bereich $1.866 < \mu < 1.91$ sind nicht möglich.

Sowohl die Untersuchung des eindimensionalen als auch des zweidimensionalen Hubbard-Modells hat gezeigt, dass die Verwendung von Bad-Plätzen bei der Berechnung dotierter Systeme wesentlichen Einfluss auf die Qualität der Näherung hat. Besonders die Rolle der Bad-Plätze als Ladungsreservoirs garantiert, dass die Elektronendichte im Modellsystem mit der Teilchendichte auf den korrelierten Plätzen im Referenzsystem nahezu übereinstimmt. Gute Übereinstimmung mit CDMFT-Rechnungen ist bereits mit einem Bad-Platz je korreliertem Platz im Referenzsystem ($n_s - 1 = 1$) zu beobachten. Auch bei Halbfüllung zeigt sich deutlich der Einfluss der Bad-Plätze auf dynamische Größen. Diese Eigenschaft ist im Rahmen des 1D-Hubbard-Modells am Gap Δ im Ein-Teilchen-Anregungsspektrum ausgiebig untersucht worden. In $D = 2$ hat sich gezeigt, dass eine Beschreibung des Mott-Übergangs mit Koexistenz von metallischer und isolierender Phase im Paramagneten nur mit Hilfe von Bad-Plätzen möglich ist.

Die Berechnung der Grundzustandsenergie für Halbfüllung hat dagegen ergeben, dass die Anzahl der korrelierten Plätze entscheidend ist und Bad-Plätze nur zu einer geringen Verbesserung der Lösung führen. Abseits von Halbfüllung ist der Energiegewinn durch die Verwendung von Bad-Plätzen allerdings nicht mehr zu vernachlässigen (im Vergleich mit einem Cluster ohne Bad-Plätze und $N' = L_c$). Ebenso lässt die Untersuchung von Phasenseparation im 2D-Hubbard-Modell vermuten, dass die Clustergröße L_c wesentlich für eine

zuverlässige Aussage zur Koexistenz einer paramagnetischen und antiferromagnetischen Lösung ist (vergl. Gl. 4.13). So kann auch die VCA-Rechnung mit Referenzsystem Abb. 6.1 die Existenz eines phasenseparierten Zustands nicht endgültig klären. Ein antiferromagnetischer Isolator bei Halbfüllung sowie ein paramagnetisches Metall für hinreichend große Dotierung können im Rahmen der VCA-Rechnungen übereinstimmend, unabhängig vom verwendeten Referenzsystem, gefunden werden.

Kapitel 7

Supraleitung

Als ein Standardmodell zur Untersuchung der Hochtemperatur-Supraleitung hat das Hubbard-Modell in $D = 2$ besondere Bedeutung erlangt. Bereits das Ein-Band-Hubbard-Modell bietet eine gute Grundlage zur Beschreibung der niederenergetischen Physik der Kuprate, wie wir in Kap. 2 festgestellt haben. Als Abschluss dieser Arbeit soll daher, aufbauend auf den Untersuchungen des Mott-Übergangs, Supraleitung in unseren VCA-Rechnungen mitberücksichtigt werden. Das Phasendiagramm Abb. 2.5 vor Augen, liegt unser Hauptaugenmerk auf der Berechnung des supraleitenden Ordnungsparameters.

Es wurden bereits VCA-Rechnungen zur Bestimmung des supraleitenden Ordnungsparameters im dotierten $2D$ -Hubbard-Modell von Aichhorn *et al.* [32, 40, 83] durchgeführt. Dabei wurden Cluster der Größe $L_c = 4$ bis $L_c = 10$ (ohne Bad-Plätze) verwendet. Unterschiedliche Clustergeometrien wurden ebenfalls berücksichtigt. Die Rechnungen ergeben eine antiferromagnetische supraleitende Phase in der Nähe von Halbfüllung sowohl für Loch- als auch für Elektronendotierung ($U = 8$, $t' = -0.3$). In beiden Fällen führt die weitere Dotierung zu einem Phasenübergang in eine rein supraleitende Phase. Es zeigt sich hier eine Asymmetrie im Phasendiagramm zwischen lochdotiertem und elektrondotiertem System in qualitativer Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen [32]. Die antiferromagnetische Phase existiert im elektrondotierten System bis zu deutlich größerer Dotierung als im lochdotierten System.

Phasenseparation zwischen beiden supraleitenden Phasen mit und ohne Antiferromagnetismus ist nur für Lochdotierung zu beobachten [40]. Der Phasenübergang von der antiferromagnetischen supraleitenden zur rein supraleitenden Phase ist erster Ordnung. Davon abweichend ist im elektrondotierten System (im thermodynamischen Limes) ein kontinuierlicher Phasenübergang zu erwarten. Das Fehlen eindeutiger Anzeichen für Stripes-Strukturen in elektrondotierten Materialien würde dadurch erklärt werden.

Die Relevanz von Bad-Plätzen in Verbindung mit dotierten Systemen haben unsere Untersuchungen des Hubbard-Modells in $D = 1$ und $D = 2$ deutlich gezeigt. Es ist hier das Ziel, durch Einbeziehung von Bad-Plätzen in die VCA-Rechnungen zur Supraleitung eine bessere Beschreibung der Grundzustandsphysik zu erhalten.

7.1 Spinabhängige Teilchen-Loch-Transformation

Supraleitung kann durch Einführung geeigneter Weiss-Felder, die die Erzeugung von Cooper-Paaren beschreiben, im Rahmen des Formalismus der SFT berücksichtigt werden. Ein

entsprechender Anteil im Hamilton-Operator des Referenzsystems ist durch

$$\hat{H}'_{\text{SC}} = h_{\text{SC}} \sum_{ij} \Delta_{ij} \left(\hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger + \hat{c}_{i\downarrow} \hat{c}_{j\uparrow} \right) \quad (7.1)$$

gegeben mit einem (passend zu wählenden) Paarungsfeld Δ [31, 32]. Der Umgang mit anomalen Green-Funktionen unter Verwendung des Nambu-Formalismus [84] kann umgangen werden, indem der Hamiltonian durch eine spinabhängige Teilchen-Loch-Transformation in eine geeignete Darstellung gebracht wird. Wir betrachten dazu den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \sum_{ij\sigma} (t_{ij\sigma} - \mu\delta_{ij}) \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{ij} \Delta_{ij} \left(\hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger + \hat{c}_{i\downarrow} \hat{c}_{j\uparrow} \right) \quad (7.2)$$

mit einer Hopping-Matrix \mathbf{t} , die diagonal im Spinraum angenommen wird ($t_{\sigma\sigma'} = \delta_{\sigma\sigma'} \mathbf{t}_\sigma$). Die unitäre Transformation

$$\begin{aligned} \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger &\rightarrow \hat{d}_{i\uparrow}^\dagger \\ \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger &\rightarrow \hat{d}_{i\downarrow} \end{aligned} \quad (7.3)$$

angewendet auf \hat{H} führt auf

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{ij} \left[(t_{ij\uparrow} + U\delta_{ij} - \mu\delta_{ij}) \hat{d}_{i\uparrow}^\dagger \hat{d}_{j\uparrow} - (t_{ij\downarrow} - \mu\delta_{ij}) \hat{d}_{i\downarrow}^\dagger \hat{d}_{j\downarrow} \right] \\ &\quad - U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{ij} \Delta_{ij} \left(\hat{d}_{i\uparrow}^\dagger \hat{d}_{j\downarrow} + \hat{d}_{i\downarrow}^\dagger \hat{d}_{j\uparrow} \right) + \sum_i (t_{ii\downarrow} - \mu) \end{aligned} \quad (7.4)$$

mit $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{d}_{i\sigma}^\dagger \hat{d}_{i\sigma}$ ($\Delta_{ij} = \Delta_{ji}$). Interpretieren wir Gl. 7.4 als eine Modifikation der Modellparameter, so entspricht die Teilchen-Loch-Transformation Gl. 7.3 einer Transformation der Ein-Teilchen-Parameter (inklusive chemischem Potenzial μ)

$$\begin{pmatrix} \mathbf{t}_\uparrow - \mu & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{t}_\downarrow - \mu \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \mathbf{t}_\uparrow + U - \mu & \Delta \\ \Delta & -\mathbf{t}_\downarrow + \mu \end{pmatrix} \quad (7.5)$$

und einer Änderung der Wechselwirkung gemäß

$$U \rightarrow -U. \quad (7.6)$$

Die unitäre Transformation Gl. 7.3 bzw. die Darstellung des transformierten Systems gemäß Gl. 7.5 und 7.6 darf als rein technischer Aspekt aufgefasst werden. Zu einem gegebenen Modellsystem wird das Referenzsystem mit Variationsparametern zunächst in der ursprünglichen Darstellung festgelegt. Zur Auswertung des Selbstenergiefunktionals wird die Teilchen-Loch-Transformation in gleicher Weise auf Modellsystem und Referenzsystem angewendet. Mit Einführung des Paarungsfelds Δ ist die Teilchenzahl N keine Erhaltungsgröße mehr, es resultiert ein erhöhter numerischer Aufwand zur exakten Diagonalisierung des Referenzsystems. Dagegen bleibt in der Darstellung nach Teilchen-Loch-Transformation die Teilchenzahl zwar erhalten, der numerische Mehraufwand äußert sich allerdings darin, dass $S_{\text{tot}}^z = N_\uparrow - N_\downarrow$ nicht weiter als Erhaltungsgröße verwendet werden kann.

7.2 Supraleitender Ordnungsparameter

Als Standardparameter zur Beschreibung der kupratbasierten Hochtemperatur-Supraleiter mit Hilfe des zweidimensionalen Ein-Band-Hubbard-Modells werden $t = 1$, $t' = -0.3$ und $U = 8$ gewählt [32, 85]. $d_{x^2-y^2}$ -Paarung lässt sich durch ein Paarungsfeld (im Referenzsystem) der Form

$$\Delta_{ij} = \begin{cases} 1/2 & \text{für } \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j = \pm \mathbf{e}_x \\ -1/2 & \text{für } \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j = \pm \mathbf{e}_y \end{cases} \quad (7.7)$$

beschreiben (\mathbf{r}_i und \mathbf{r}_j gehören zum selben Cluster). Um den Einfluss der Bad-Plätze auf den supraleitenden Ordnungsparameter zu untersuchen, verwenden wir als Referenzsystem einen 2×2 -Cluster sowohl ohne Bad-Plätze (Abb. 4.1) als auch mit Bad-Plätzen (Abb. 6.1). Unter Verwendung des Clusters ohne Bad-Plätze werden als Variationsparameter die On-Site-Energie ε (thermodynamische Konsistenz) sowie das Weiss-Feld h_{SC} (Gl. 7.1) optimiert. Werden zusätzlich Bad-Plätze mit einbezogen ($n_s = 2$), so treten als weitere Variationsparameter die On-Site-Energie der Bad-Plätze ε_b und die Hybridisierung V auf. Ein supraleitendes Weiss-Feld $h_{\text{SC},b}$ wird *ausschließlich auf den Bad-Plätzen* betrachtet, in Anlehnung an die Resultate aus Kap. 6.1.1 (bzgl. der antiferromagnetischen Weiss-Felder h und h_b).

Die Ergebnisse der VCA-Rechnungen sind in Abb. 7.1 zusammengefasst. Der supraleitende Ordnungsparameter ist als

$$\Delta_{\text{SC}} = \frac{1}{L} \sum_{ij} \Delta_{ij} \langle \hat{c}_{i\downarrow} \hat{c}_{j\uparrow} \rangle \quad (7.8)$$

definiert. Es hat sich herausgestellt, dass ein 2×2 -Cluster (ohne Bad-Plätze) bereits eine gute Beschreibung statischer Grundzustandseigenschaften erlaubt [32]. Der Einfluss der Clustergröße auf den Ordnungsparameter Δ_{SC} ist gering (Variationsparameter ε und h_{SC}).

Wir betrachten Δ_{SC} als Funktion der Lochdotierung in der rein supraleitenden Phase. Mit Hilfe des ($L_c=4$)-Clusters (Abb. 4.1) kann eine supraleitende Lösung bis ca. 35% Dotierung gefunden werden. Ausgehend von Halbfüllung nimmt der Ordnungsparameter mit der Dotierung monoton zu (Abb. 7.1, grüne Linie). Im Gegensatz dazu resultiert aus der Einführung von Bad-Plätzen ein Maximum des Ordnungsparameters bei 10% bis 15% Dotierung. Mit weiterer Dotierung nimmt der Ordnungsparameter wieder ab. Die supraleitende Phase existiert bis ca. 25% Dotierung (rote Linie). Ein Vergleich der Teilchendichte im Referenzsystem n' (korrelierte Plätze) mit der Dichte im Modellsystem n lässt eine zunehmende Differenz $\Delta n = n' - n$ abseits von Halbfüllung in der Rechnung ohne Bad-Plätze deutlich erkennen (Abb. 7.1, unten). Bad-Plätze als Ladungsreservoirs dagegen bewirken eine merkliche Verringerung von Δn . Während eine Differenz der Teilchendichten von bis zu $\Delta n \approx 0.18$ unter Verwendung des Referenzsystems Abb. 4.1 zu beobachten ist, zeigt sich mit $n_s - 1 = 1$ Bad-Platz je korreliertem Platz nur eine Abweichung von maximal $\Delta n \approx 0.03$ ($\Delta n \approx 0.015$ in der normalleitenden paramagnetischen Lösung, siehe Abb. 6.13). Es erscheint physikalisch plausibel, dass eine Clusternäherung mit $n' \approx n$ eine passendere Beschreibung des Modellsystems liefert als eine Approximation mit großem Δn .

Die Einführung von Bad-Plätzen ändert nicht nur den qualitativen Verlauf des Ordnungsparameters. Wie Abb. 7.1 erkennen lässt zeigt sich außerdem eine globale Abnahme des Werts von Δ_{SC} . Offensichtlich können quantenmechanische Fluktuationen durch die Verwendung von Bad-Freiheitsgraden besser berücksichtigt werden. Im Vergleich mit CDMFT [85] ($L_c = 4$, $n_s = 3$; blaue Linie) ist sowohl eine *qualitativ* als auch eine *quantitativ* gute Übereinstimmung mit unseren VCA-Daten zu beobachten. Darin zeigt sich einmal

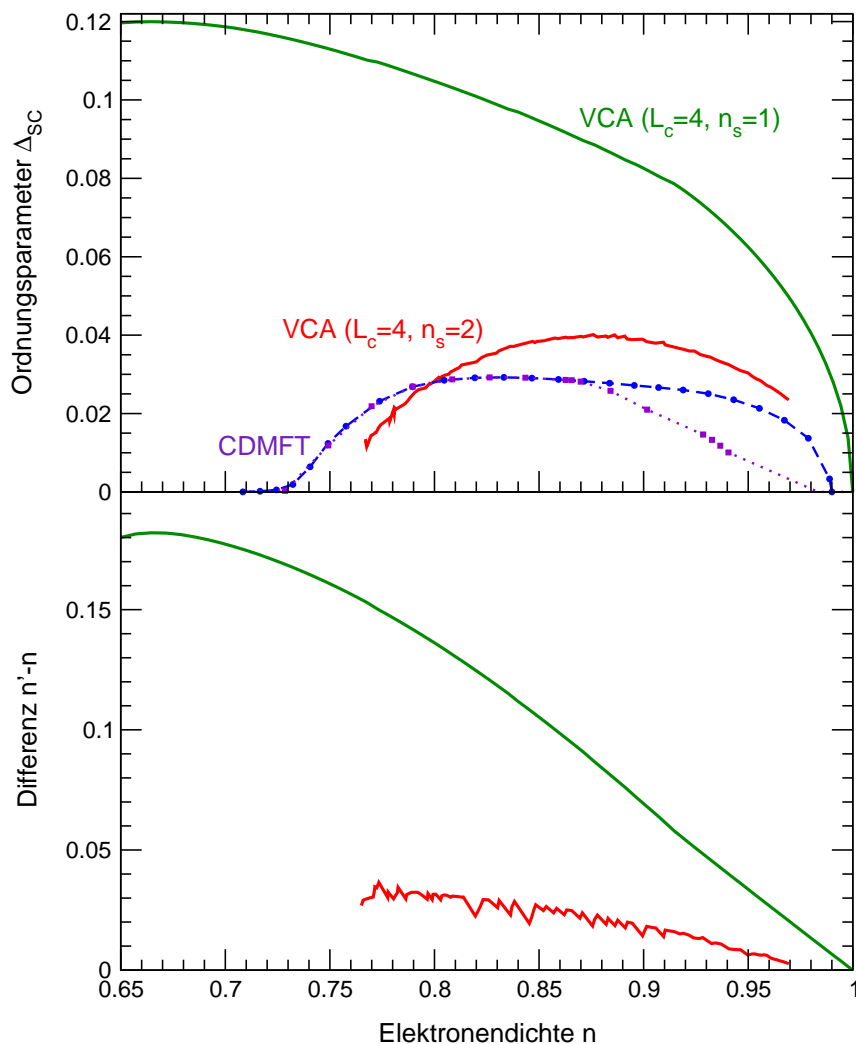


Abbildung 7.1: (oben) Supraleitender Ordnungsparameter Δ_{SC} (Gl. 7.8) als Funktion der Elektronendichte n . Referenzsystem $L_c = 4$ (Abb. 4.1) mit Variationsparametern ε und h_{SC} (grün). VCA-Rechnung mit Bad-Plätzen (Abb. 6.1) mit Optimierung der Parameter ε , ε_b , V und $h_{SC,b}$ (rot). CDMFT-Daten von S. S. Kancharla *et al.* [85] mit rein supraleitender Lösung (blau) sowie unter Berücksichtigung antiferromagnetischer Ordnung (violett). (unten) Differenz $\Delta n = n' - n$ der Teilchendichte im Referenzsystem (korrelierte Plätze) und im Modellsystem für obige VCA-Rechnungen. $U = 8$, $t' = -0.3$; $N_{cl} = 40 \times 40$.

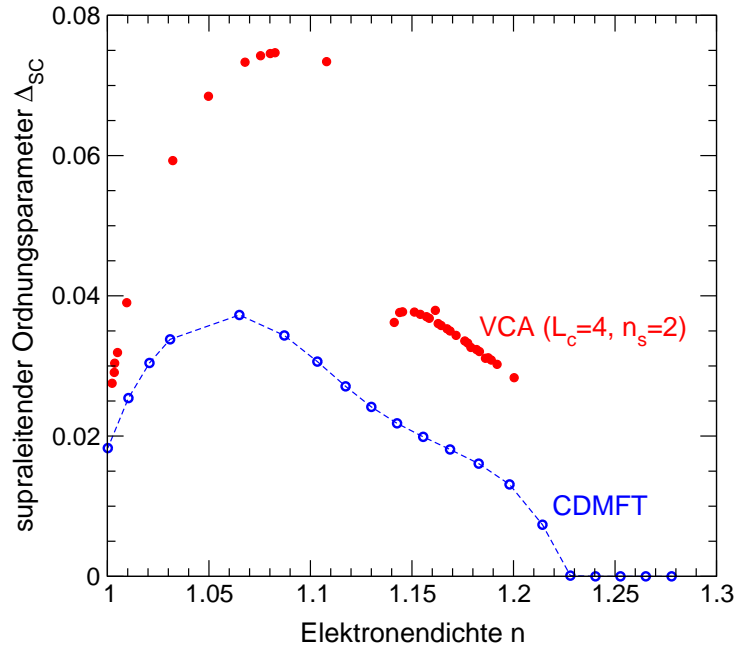


Abbildung 7.2: (rot) VCA-Rechnung mit Bad-Plätzen für Elektrondotierung, Parameter wie in Abb. 7.1. (blau) CDMFT-Daten von S. S. Kancharla *et al.* aus [85], Abb. 2 ($t' = 0.3$ und $n < 1$).

mehr die Bedeutung bereits eines einzelnen Bad-Platzes je korreliertem Platz für die Untersuchung dotierter Systeme sowie die Bedeutung von Bad-Plätzen für die Beschreibung zeitlicher Fluktuationen.

Wird neben einem supraleitenden Weiss-Feld auch ein antiferromagnetisches Feld als Variationsparameter zugelassen, so findet sich sowohl in CDMFT [85] als auch in VCA ohne Bad-Plätze [32] für geringe Dotierung eine antiferromagnetische supraleitende Phase. Für die betrachtete Wechselwirkung $U = 8$ (mit $t' = -0.3$) kann ein Phasenübergang zweiter Ordnung [85] bzw. ein Phasenübergang erster Ordnung im Zusammenhang mit Phasenseparation [32] in eine rein supraleitende Lösung beobachtet werden. Die Anwesenheit langreichweitiger antiferromagnetischer Ordnung führt zu einer Verringerung des supraleitenden Ordnungsparameters (Abb. 7.1, violette Linie). Es ist uns nicht gelungen, im Rahmen unserer VCA-Rechnungen mit Bad-Plätzen eine antiferromagnetische supraleitende Lösung (abseits von Halbfüllung) zu finden. (Vergleichbare Schwierigkeiten sind bei der Suche nach einer antiferromagnetischen metallischen Lösung in Kap. 6.2.2 aufgetreten.)

Die Bestimmung stationärer Lösungen des Selbstenergiefunktionals (bei Verwendung des Downhill-Simplex-Algorithmus) im elektrondotierten Modell hat sich als aufwändiger herausgestellt als für den Fall $n < 1$. Die Ergebnisse sind in Abb. 7.2 dargestellt. Trotz numerischer Schwierigkeiten ist eine qualitativ gute Übereinstimmung mit den entsprechenden CDMFT-Rechnungen [85] festzustellen. Insbesondere die ausgeprägte Form des Maximums sowie eine Verschiebung des Maximums in Richtung geringerer Dotierung werden im Vergleich mit dem lochdotierten System deutlich.

Identifiziert man den supraleitenden Ordnungsparameter Δ_{SC} mit der Sprungtemperatur T_c , so lässt sich ein Vergleich mit experimentellen Daten anstellen. Das Phasendiagramm Abb. 2.5 zeigt im Fall von Lochdotierung qualitativ das gleiche Verhalten für T_c wie unsere VCA-Rechnungen für Δ_{SC} , sofern wir den Bereich mit antiferromagneti-

scher Ordnung unberücksichtigt lassen. Antiferromagnetismus spielt für elektrondotierte Systeme eine größere Rolle, so dass hier eine Gegenüberstellung mit unseren Rechnungen unzureichend erscheint.

Kapitel 8

Zusammenfassung

Das Ein-Band-Hubbard-Modell als ein Minimalmodell zur Beschreibung von Hochtemperatur-Supraleitung ist in der Lage, wesentliche Eigenschaften stark korrelierter Elektronensysteme in qualitativer Übereinstimmung mit den Experimenten zu beschreiben. Die enge Verbindung zwischen Hochtemperatur-Supraleitern und Mott-(Heisenberg-)Isolatoren erfordert numerische Methoden, die diese Phasen korrekt behandeln können [85]. Quanten-Cluster-Methoden haben sich in diesem Zusammenhang als geeignete Näherungsverfahren herauskristallisiert. Wie unsere Rechnungen sowohl in Bezug auf normalleitende metallische und isolierende Lösungen als auch unter Berücksichtigung supraleitender Phasen gezeigt haben, ist die VCA, insbesondere unter Hinzunahme von Bad-Freiheitsgraden, eine leistungsfähige Clustermethode zur Untersuchung stark korrelierter Elektronensysteme.

Wir finden als Grundzustand des Teilchen-Loch-symmetrischen $2D$ -Hubbard-Modells bei Halbfüllung einen antiferromagnetischen Isolator für beliebige Wechselwirkung $U > 0$. Der Wert des antiferromagnetischen Ordnungsparameters $m(U)$ im Limes $U \rightarrow \infty$ kann durch unsere Clusterrechnungen gegenüber dem reinen Mean-Field-Szenario $m = 1$ deutlich verbessert werden, die Rechnungen ergeben $m \approx 0.87$. Der exakte Wert $m \approx 0.61$ wird allerdings weder durch den größten verwendeten Cluster mit $L_c = 10$ korrelierten Plätzen noch durch Einbeziehung von Bad-Plätzen ($L_c = 4$, $n_s = 2$) reproduziert (siehe Abb. 6.3). Offensichtlich kann der Einfluss von Spinwellen mit $\mathbf{q} \rightarrow 0$ durch Cluster dieser Größenordnung nicht beschrieben werden.

In der paramagnetischen Phase bei Halbfüllung lässt sich ein Metall-Isolator-Übergang als Funktion der Wechselwirkungsstärke beobachten. Unsere Rechnungen mit Hilfe des ($L_c=4/n_s=2$)-Clusters ergeben hier einen Phasenübergang erster Ordnung sowie einen nicht realisierten kontinuierlichen Metall-Isolator-Übergang innerhalb einer metastabilen Phase (Hidden Critical Point). Dieses Szenario stellt eine *qualitative* Neuerung gegenüber dem DMFT-Resultat mit kontinuierlichem Phasenübergang für $T = 0$ dar ($U_c = U_{c2}$). Die Hinzunahme eines weiteren Bad-Platzes ($n_s = 3$) ändert das Phasendiagramm qualitativ nicht [79]. Quantitative Änderungen zeigen sich in den Phasengrenzen. Die gefundenen Werte U_{c1} und U_{c2} sind bereits in sehr guter Übereinstimmung mit CDMFT-Resultaten für endliche Temperaturen (siehe Kap. 6.1.2). Eine Clusternäherung mit einem einzigen Bad-Platz ist offensichtlich ausreichend, um wesentliche qualitative Änderungen bzgl. des DMFT-Szenarios zu beschreiben. Nahezu quantitative Übereinstimmung mit CDMFT kann bereits durch wenige Bad-Plätze erreicht werden. Die Resultate deuten daher darauf hin, dass der Mott-Metall-Isolator-Übergang bei $T = 0$ auch im Limes $n_s \rightarrow \infty$ als Phasenübergang erster Ordnung auftritt.

Eine thermodynamisch konsistente Beschreibung dotierter Systeme kann durch Opti-

mierung der globalen On-Site-Energie als Variationsparameter garantiert werden. Obwohl die Teilchenzahl im Referenzsystem konstant gehalten werden muss, kann dadurch die Teilchendichte im Modellsystem bereits ohne Verwendung von Bad-Plätzen als Ladungsreservoirs kontinuierlich variiert werden (Kap. 4.2, 5.2). Die besten Ergebnisse lassen sich dabei für $n' \approx n$ erzielen (siehe Abb. 5.16). Mit der Einführung von Bad-Plätzen kann auch die Ladung auf den korrelierten Plätzen im Referenzsystem kontinuierlich verändert werden ($n'_{\text{corr}} = 0$ bis $n'_{\text{corr}} = 2$), während die Gesamtteilchenzahl im Referenzsystem (korrelierte Plätze und Bad-Plätze) weiterhin konstant bleibt. Dadurch lässt sich $n'_{\text{corr}} \approx n$ für beliebige Dotierung realisieren. Wie unsere Analyse des 1D-Hubbard-Modells ergeben hat, wird dadurch die Beschreibung des dotierten Systems im Vergleich zu Referenzsystemen ohne Bad-Plätze wesentlich verbessert.

Als Schwierigkeit bei der Verwendung von Bad-Plätzen hat sich die Stabilisierung der dotierten Lösung in der Nähe von Halbfüllung herausgestellt. Während die paramagnetische Lösung in $D = 1$ eine Divergenz in der Kompressibilität klar erkennen lässt (Abb. 5.19), ist in $D = 2$ keine definitive Aussage möglich, da hier die Lösung nur für $n \lesssim 0.9$ bestimmt werden kann (siehe Abb. 6.13). Ebenso ist es uns nicht gelungen, in $D = 2$ eine antiferromagnetische metallische oder supraleitende Lösung mit Hilfe des ($L_c=4/n_s=2$)-Clusters zu finden. Als Funktion von μ ergibt sich ein (unphysikalischer) Sprung im großkanonischen Potenzial für $\mu_{c,\text{loc}}$ (siehe Abb. 6.17). Dieser Sprung resultiert aus der lokal instabilen paramagnetischen Lösung für $\mu > \mu_{c,\text{loc}}$. Die Berücksichtigung weiterer Phasen (z. B. Supraleitung oder Phasen mit Ladungsordnung) neben der paramagnetischen und antiferromagnetischen Lösung mag diese Unstimmigkeit beheben.

Abhängig vom verwendeten Referenzsystem kann Phasenseparation zwischen paramagnetischer und antiferromagnetischer metallischer Lösung im 2D-Hubbard-Modell auftreten. Der phasenseparierte Zustand reagiert dabei äußerst empfindlich auf Änderungen der Clustergröße und Clustergeometrie (Kap. 4.3 und 4.4). Die beobachteten Finite-Size-Effekte sind konsistent mit analytischen Überlegungen, die den Einfluss langreichweitiger Effekte auf einen phasenseparierten Zustand betonen (siehe Gl. 4.13). Ob das 2D-Hubbard-Modell Phasenseparation zeigt oder nicht, kann durch unsere Rechnungen nicht endgültig geklärt werden. Die VCA-Resultate unter Berücksichtigung verschiedener Clustergrößen und Clustergeometrien lassen Phasenseparation aber als eher unwahrscheinlich erscheinen.

Die Wahl eines geeigneten Referenzsystems hängt davon ab, welche physikalischen Größen betrachtet werden sollen. So kann die Konvergenz statischer Größen wie der Grundzustandsenergie durch Hinzunahme von Bad-Plätzen kaum beschleunigt werden. Auch die unabhängige Optimierung einer Vielzahl an Variationsparametern hat hier nur geringen Einfluss auf die Konvergenz. Vielmehr ist die Anzahl korrelierter Clusterplätze in diesem Fall entscheidend (Kap. 5.1). Bad-Plätze sind dagegen wesentlich, wenn dynamische Größen berechnet werden (siehe Kap. 5.1.5). Es hat sich herausgestellt, dass einige (wenige) Bad-Plätze, die an korrelierte Plätze am Clusterrand ankoppeln, bereits eine ausgezeichnete Näherung des Gaps im Ein-Teilchen-Anregungsspektrum des 1D-Hubbard-Modells liefern. Die Verwendung zusätzlicher Bad-Plätze im Clusterinneren erscheint dagegen unnötig. Darüber hinaus ist in $D = 2$ eine deutliche Verkleinerung des supraleitenden Ordnungsparameters Δ_{SC} im Vergleich zur Rechnung ohne Bad-Plätze zu beobachten (siehe Abb. 7.1). Bad-Plätze ermöglichen offensichtlich eine verbesserte Beschreibung quantenmechanischer Fluktuationen im Rahmen von Clusterapproximationen.

Die optimale Clusternäherung ergibt sich durch Verwendung eines kontinuierlichen Bads ($n_s \rightarrow \infty$). Unsere VCA-Rechnungen in der normalleitenden als auch in der supraleitenden Phase zeigen allerdings auch, dass ein einzelner Bad-Platz ($n_s = 2$) bereits

gute quantitative Übereinstimmung mit CDMFT-Resultaten ermöglicht (siehe z. B. Abb. 6.13 und 7.1). Während unsere Clusterapproximationen im Rahmen der SFT eine thermodynamisch konsistente Beschreibung bei $T = 0$ erlauben, kann die thermodynamische Konsistenz in CDMFT für $T = 0$ im Allgemeinen nicht garantiert werden. Ein kontinuierliches Bad (und damit thermodynamische Konsistenz) lässt sich mit Hilfe von Quanten-Monte-Carlo-Verfahren nur für endliche Temperaturen realisieren. Dagegen ist für $T = 0$ eine Lösung der CDMFT-Selbstkonsistenzgleichungen bei Verwendung exakter Diagonalisierung (mit einigen wenigen Bad-Plätzen) nur näherungsweise möglich.

Die VCA ermöglicht eine thermodynamisch konsistente Beschreibung der Grundzustandseigenschaften des Hubbard-Modells und zeichnet sich durch große Flexibilität bei der Konstruktion von Referenzsystemen aus. Damit steht mit der VCA eine attraktive Clustermethode zur Untersuchung stark korrelierter Elektronensysteme zur Verfügung. Eine Weiterentwicklung der Methode durch Kombination mit DDMRG ($T = 0$) oder QMC ($T > 0$) zur Lösung des Referenzsystems stellt zudem in Aussicht, zu deutlich größeren Clustern übergehen zu können.

Literaturverzeichnis

- [1] G. Kotliar, D. Vollhardt, *Physics Today* **57**, 53 (2004)
- [2] N. F. Mott, *Philos. Mag.* **6**, 287 (1961)
- [3] N. F. Mott, *Metal-Insulator Transitions* (Taylor and Francis, London, 1990)
- [4] J. Hubbard, *Proc. R. Soc. London A* **276**, 238 (1963)
- [5] J. Hubbard, *Proc. R. Soc. London A* **281**, 401 (1964)
- [6] W. F. Brinkman, T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **2**, 4302 (1970)
- [7] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996)
- [8] T. Maier, M. Jarrell, T. Pruschke, M. H. Hettler, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 1027 (2005)
- [9] A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, *Phys. Rev. B* **62**, R9283 (2000)
- [10] G. Kotliar, S. Y. Savrasov, G. Pálsson, G. Biroli, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 186401 (2001)
- [11] M. H. Hettler, A. N. Tahvildar-Zadeh, M. Jarrell, T. Pruschke, H. R. Krishnamurthy, *Phys. Rev. B* **58**, R7475 (1998)
- [12] M. Potthoff, *Euro. Phys. J. B* **32**, 429 (2003)
- [13] P. Fazekas, *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism* (World Scientific Publishing Co Pte Ltd, 1999)
- [14] P. A. Lee, N. Nagaosa, X.-G. Wen, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 17 (2006)
- [15] D. J. Scalapino, *cond-mat/0610710* (2006)
- [16] M. Imada, A. Fujimori, Y. Tokura, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 1039 (1998)
- [17] F. Gebhard, *The Mott Metal-Insulator Transition* (Springer, Berlin, 1997)
- [18] E. H. Lieb, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1201 (1989)
- [19] N. D. Mermin, H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966)
- [20] E. H. Lieb, F. Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **20**, 1445 (1968)
- [21] A. A. Ovchinnikov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **57**, 2137 (1969)

- [22] T. Usuki, N. Kawakami, A. Okiji, Phys. Lett. A **135**, 476 (1989)
- [23] H. Benthien, F. Gebhard, E. Jeckelmann, cond-mat/**0402664** (2004)
- [24] J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **31**, 4403 (1985)
- [25] E. Manousakis, Rev. Mod. Phys. **63**, 1 (1991)
- [26] S. R. White, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, E. Y. Loh, J. E. Gubernatis, R. T. Scalettar, Phys. Rev. B **40**, 506 (1989)
- [27] A. Damascelli, Z. Hussain, Z.-X. Shen, Rev. Mod. Phys. **75**, 473 (2003)
- [28] M. Potthoff, M. Aichhorn, C. Dahnken, Phys. Rev. Lett. **91**, 206402 (2003)
- [29] W. Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 7: Viel-Teilchen-Theorie*, (Springer, Berlin, 2005)
- [30] D. Sénéchal, D. Pérez, and M. Pioro-Ladrière, Phys. Rev. Lett. **84**, 522 (2000)
- [31] D. Sénéchal, arXiv:0806.2690 (2008)
- [32] M. Aichhorn, E. Arrigoni, M. Potthoff, W. Hanke, Phys. Rev. B **74**, 024508 (2006)
- [33] Ilja N. Bronstein, Konstantin A. Semendjajew, Gerhard Musiol, *Taschenbuch der Mathematik* (Deutsch (Harri), Frankfurt am Main, 2000)
- [34] M. Potthoff, Eur. Phys. J. B **36**, 335 (2003)
- [35] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, *Numerical Recipes in C* (Cambridge University Press, Cambridge, 1993)
- [36] R. Freund, *Band Lanczos method*, In: Templates for the Solution of Algebraic Eigenvalue Problems: A Practical Guide, Ed. by Z. Bai, J. Demmel, J. Dongarra, A. Ruhe, and H. van der Vorst (SIAM, Philadelphia, 2000)
- [37] M. Aichhorn, *Ordering Phenomena in Strongly-Correlated Systems: Cluster Perturbation Theory Approaches*, Dissertation, Graz (2004)
- [38] H. Q. Lin, J. E. Gubernatis, Comput. Phys. **7**, 400 (1993)
- [39] E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994)
- [40] M. Aichhorn, E. Arrigoni, M. Potthoff, W. Hanke, Phys. Rev. B **74**, 235117 (2006)
- [41] C. Dahnken, M. Aichhorn, W. Hanke, E. Arrigoni, M. Potthoff, Phys. Rev. B **70**, 245110 (2004)
- [42] M. Balzer, *Selbstenergie-Funktional-Theorie für wechselwirkende Elektronensysteme mit Unordnung*, Diplomarbeit, Würzburg (2004)
- [43] W. Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 4: Spezielle Relativitätstheorie, Thermodynamik*, (Springer, Berlin, 2005)
- [44] G. B. Bachelet, A. C. Cosentini, cond-mat/**9810173** (1998)

- [45] F. Becca, M. Capone, S. Sorella, Phys. Rev. B **62**, 12700 (2000)
- [46] J. M. Tranquada, B. J. Sternlieb, J. D. Axe, Y. Nakamura, S. Uchida, Nature **375**, 561 (1995)
- [47] M. Vershinin, S. Misra, S. Ono, Y. Abe, Y. Ando, A. Yazdani, Science **303**, 1995 (2004)
- [48] K. McElroy, D.-H. Lee, J. E. Hoffman, K. M. Lang, J. Lee, E. W. Hudson, H. Eisaki, S. Uchida, J. C. Davis, Phys. Rev. Lett. **94**, 197005 (2005)
- [49] W. O. Putikka, M. U. Luchini, Phys. Rev. B **62**, 1684 (2000)
- [50] C. T. Shih, Y. C. Chen, T. K. Lee, Phys. Rev. B **57**, 627 (1998)
- [51] C. S. Hellberg, E. Manousakis, Phys. Rev. Lett. **78**, 4609 (1997)
- [52] V. J. Emery, S. A. Kivelson, H. Q. Lin, Phys. Rev. Lett. **64**, 475 (1990)
- [53] A. Moreo, D. Scalapino, E. Dagotto, Phys. Rev. B **43**, 11442 (1991)
- [54] G. Su, Phys. Rev. B **54**, R8281 (1996)
- [55] A. Macridin, M. Jarrell, T. Maier, Phys. Rev. B **74**, 085104 (2006)
- [56] C.-C. Chang, S. Zhang, Phys. Rev. B **78**, 165101 (2008)
- [57] R. Zitzler, T. Pruschke, R. Bulla, Eur. Phys. J. B **27**, 473 (2002)
- [58] M. Eckstein, M. Kollar, M. Potthoff, D. Vollhardt, Phys. Rev. B **75**, 125103 (2007)
- [59] M. Civelli, M. Capone, S. S. Kancharla, O. Parcollet, G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **95**, 106402 (2005)
- [60] T. Tohyama, S. Maekawa, Phys. Rev. B **49**, 3596 (1994)
- [61] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992)
- [62] T. A. Maier, M. Jarrell, Phys. Rev. B **65**, 041104(R) (2002)
- [63] G. Biroli, G. Kotliar, Phys. Rev. B **65**, 155112 (2002)
- [64] K. Aryanpour, T. A. Maier, M. Jarrell, Phys. Rev. B **71**, 037101 (2005)
- [65] G. Biroli, G. Kotliar, Phys. Rev. B **71**, 037102 (2005)
- [66] C. Gros and R. Valenti, Phys. Rev. B **48**, 418 (1993)
- [67] M. Potthoff, In: *Effective models for low-dimensional strongly correlated systems*, Ed. by G. Batrouni and D. Poilblanc (AIP proceedings, Melville, 2006)
- [68] C. J. Bolech, S. S. Kancharla, G. Kotliar, Phys. Rev. B **67**, 075110 (2003)
- [69] H. Hafermann, S. Brener, A. N. Rubtsov, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein, JETP Letters **86**, 677 (2007)
- [70] M. Caffarel, W. Krauth, Phys. Rev. Lett. **72**, 1545 (1994)

- [71] R. Preuss, A. Muramatsu, W. von der Linden, P. Dieterich, F. F. Assaad, W. Hanke, Phys. Rev. Lett. **73**, 732 (1994)
- [72] M. G. Zacher, E. Arrigoni, W. Hanke, and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. B **57**, 6370 (1998)
- [73] M. Capone, M. Civelli, S. S. Kancharla, C. Castellani, G. Kotliar, Phys. Rev. B **69**, 195105 (2004)
- [74] E. Koch, G. Sangiovanni, O. Gunnarsson, Phys. Rev. B **78**, 115102 (2008)
- [75] H. Park, K. Haule, G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **101**, 186403 (2008)
- [76] Y. Z. Zhang, M. Imada, Phys. Rev. B **76**, 045108 (2007)
- [77] E. Gull, P. Werner, M. Troyer, A. J. Millis, arXiv:**0805.3778** (2008)
- [78] N.-H. Tong, S.-Q. Shen, F.-C. Pu, Phys. Rev. B **64**, 235109 (2001)
- [79] A.-M. S. Tremblay, private Mitteilung
- [80] M. Civelli, *Investigation of Strongly Correlated Electron Systems with Cellular Dynamical Mean Field Theory*, Dissertation, New Brunswick, New Jersey (2006); arXiv:**0710.2802** (2007)
- [81] N. Furukawa, M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. **62**, 2557 (1993)
- [82] S. Onoda, M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. **70**, 3998 (2001)
- [83] M. Aichhorn, E. Arrigoni, M. Potthoff, W. Hanke, Phys. Rev. B **76**, 224509 (2007)
- [84] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, New York, 1971)
- [85] S. S. Kancharla, B. Kyung, D. Sénéchal, M. Civelli, M. Capone, G. Kotliar, A.-M. S. Tremblay, Phys. Rev. B **77**, 184516 (2008)

Veröffentlichungen

M. Balzer, B. Kyung, D. Sénéchal, A.-M. S. Tremblay, M. Potthoff
First-order Mott transition at zero temperature in two dimensions: Variational plaquette study
Europhys. Lett. **85**, 17002 (2009)

M. Balzer and M. Potthoff
Disorder- and correlation-driven metal-insulator transitions
Physica B **359-361**, 768 (2005)

M. Potthoff and M. Balzer
Self-energy-functional theory for systems of interacting electrons with disorder
Phys. Rev. B **75**, 125112 (2007)

J. Ortloff, M. Balzer and M. Potthoff
Non-perturbative conserving approximations and Luttinger's sum rule
Eur. Phys. J. B **58**, 37 (2007)

M. Balzer, W. Hanke and M. Potthoff
Mott transition in one dimension: Benchmarking dynamical cluster approaches
Phys. Rev. B **77**, 045133 (2008)

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. Werner Hanke bedanken, der mir durch Aufnahme am Lehrstuhl für Theoretische Physik I die Möglichkeit eröffnet hat, ein aktuelles Thema der theoretischen Festkörperphysik zu bearbeiten. Mit Problemen konnte ich mich jederzeit an ihn wenden.

Besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. Michael Potthoff für die intensive Betreuung während der Dissertation. Er hatte immer ein offenes Ohr für auftretende Fragen und stand mir mit Anregungen und durch zahlreiche Diskussionen hilfreich zur Seite.

Die angenehme Atmosphäre am Lehrstuhl wurde wesentlich durch Kollegialität und Hilfsbereitschaft bestimmt. Ich danke Prof. Dr. Fakher Assaad, Prof. Dr. Carsten Honerkamp, Dr. Markus Aichhorn, Dr. Kevin Beach, Sascha Brehm, Andrzej Fleszar, Dr. Stephan Hochkeppel, Maximilian Kiesel, Guido Klingschat, Thomas Lang, Lee Martin, Jutta Orloff und Christian Platt für ihre Unterstützung.

Meinen Kommilitonen Christian Bretschneider, Frank Dimler, Dr. Matthias Kaminski, Thomas Schmidt sowie Robert Spitzenpfeil und Dr. Dmitri Voronine danke ich für ihre hilfreichen Anregungen.

Zuletzt möchte ich mich bei meinen Eltern und meinen Geschwistern für die liebevolle Unterstützung während meines Studiums bedanken.

Erklärung

Hiermit versichere ich an Eides statt, die vorliegende Arbeit eigenständig, d. h. insbesondere ohne Hilfe eines kommerziellen Promotionsberaters, und nur mit den angegebenen Quellen und Hilfsmitteln angefertigt zu haben. Diese Arbeit liegt nicht in gleicher oder anderer Form bereits in einem anderen Prüfungsfach vor.

Würzburg, 20.11.2008

Matthias Balzer

