

**Das Hubbardmodell in der Hilfsbosonenformulierung:
Eine Untersuchung auf „Bipartite“-Gittern**

**Diplomarbeit von
Ralf Meyer**

**vorgelegt dem
Fachbereich Physik-Technologie der
Universität-Gesamthochschule Duisburg**

Duisburg, im Dezember 1992

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	3
2	Das Hubbardmodell — Grundlagen	5
2.1	Das Einband-Hubbardmodell	5
2.2	Unendliche Raumdimension	6
2.3	Die Hilfsbosonenformulierung	7
3	Sattelpunktsnäherung der Hilfsbosonenformulierung	10
3.1	Methode der Sattelpunktsnäherung	10
3.2	Der paramagnetische Fall	12
3.3	Der ferromagnetische Fall	13
3.4	Der antiferromagnetische Fall	13
3.5	Numerische Auswertung	16
4	Ergebnisse	19
4.1	Zwei Raumdimensionen	19
4.1.1	Paramagnetische Lösungen	19
4.1.2	Ferromagnetische Lösungen	25
4.1.3	Antiferromagnetische Lösungen	33
4.1.4	Das magnetische Phasendiagramm	40
4.2	Unendliche Raumdimension	45
4.2.1	Paramagnetische Lösungen	45

4.2.2	Ferromagnetische Lösungen	47
4.2.3	Antiferromagnetische Lösungen	51
4.2.4	Magnetisches Phasendiagramm	54
4.3	Berechnung des Hallkoeffizienten	56
5	Zusammenfassung und Kritik	59
A	Partielle Ableitungen der Renormierungsfaktoren	62
A.1	Der paramagnetische Fall	62
A.2	Der ferromagnetische Fall	62
A.3	Der antiferromagnetische Fall	63
	Literaturverzeichnis	64
	Danksagung	66

Kapitel 1

Einführung

Das heute nach Hubbard benannte Modell erschien in der Literatur zuerst 1963 in zwei unabhängigen Veröffentlichungen von Gutzwiller [1] und Hubbard [2]. Beide Autoren führten das Modell mit dem Ziel ein, die Korrelationen der d -Elektronen in Übergangsmetallen auf möglichst einfache Art zu erfassen. Der von ihnen verwendete Hamiltonian bildet das wohl einfachste physikalische (Vielteilchen-) Modellsystem, bei dem Korrelationen zwischen den Fermionen berücksichtigt sind.

Seit seinem nunmehr fast dreißig Jahre zurückliegenden Erscheinen ist das Hubbardmodell intensiv studiert worden. Trotzdem sind bis heute nur wenige exakte Resultate bekannt, die meist auf den Grenzfall einer Raumdimension beschränkt sind. Es gibt allerdings Anlaß zu der Hoffnung, daß in Kürze auch für den Fall unendlicher Raumdimension analytische Ergebnisse vorliegen könnten. Jedoch insbesondere für die wichtigen Fälle zweier und dreier Raumdimensionen gibt es bis heute sowohl für den Grundzustand als auch für den Fall endlicher Temperatur praktisch keine exakten Aussagen über die Bildung magnetischer Phasen oder die Möglichkeit von Supraleitung. Numerische Methoden, wie exakte Diagonalisierung oder Quanten-Monte-Carlo-Simulation, erlauben zwar die Behandlung von zwei- und dreidimensionalen

Systemen, ihre Anwendung ist jedoch auf kleine Systeme beschränkt, so daß eine Extrapolation der Ergebnisse auf den thermodynamischen Limes große Unsicherheiten beinhaltet.

Durch die Entdeckung der Hochtemperatur-Supraleiter 1986 durch Bednorz und Müller [3] wurde das Interesse am Hubbardmodell noch verstärkt, da sehr bald klar wurde, daß starke elektronische Korrelationen in zweidimensionalen CuO_2 -Schichten für die ungewöhnlichen physikalischen Eigenschaften dieser Materialien ausschlaggebend sind. Dies führte insbesondere zu der Untersuchung von erweiterten Mehrband-Hubbardmodellen.

In dieser Arbeit wurde das magnetische Grundzustands-Phasendiagramm des Hubbardmodells in den Fällen zweier und unendlicher Raumdimensionen untersucht. Hierbei wurde die sogenannte Hilfsbosonenmethode verwendet, bei der zusätzliche Bosonenfelder für die Besetzungsstatistik der Gitterplätze in das System eingeführt werden. Dabei wurde besonderer Wert darauf gelegt, nicht nur die Phasengrenzen zu bestimmen, sondern auch das Verhalten der gefundenen Lösungen innerhalb der einzelnen Phasen zu analysieren. Dadurch konnten bisherige Annahmen bezüglich der Ausdehnung der ferromagnetischen Phase und der Art des Phasenübergangs vom Ferro- in den Paramagnetismus verbessert werden. Die im Rahmen einer Sattelpunktsnäherung gewonnenen Ergebnisse bilden das erste Glied einer systematischen Entwicklung der freien Energie des Hubbardmodells und können somit als Ausgangspunkt weiterer Untersuchungen dienen. Aufbauend wurde noch der Hallkoeffizient des zweidimensionalen Hubbardsystems unter den verwendeten Näherungen untersucht. Dabei zeigte sich, daß die unter der Sattelpunktsnäherung erhaltenen Ergebnisse ungeeignet sind, das experimentelle Verhalten der keramischen Hochtemperatursupraleiter richtig zu beschreiben.

Kapitel 2

Das Hubbardmodell — Grundlagen

2.1 Das Einband-Hubbardmodell

Der Hamilton-Operator des Hubbardmodells lautet in seiner allgemeinsten Form

$$H^{Hub} = \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} \sum_{\sigma} t_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} a_{\mathbf{i}, \sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{j}, \sigma} + U \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i}, \uparrow} n_{\mathbf{i}, \downarrow}. \quad (2.1)$$

Hierbei beschreibt der erste Term die kinetische Energie der Elektronen mit dem Transfermatrixelement $t_{\mathbf{i}, \mathbf{j}}$ und den Erzeugungsoperatoren (Vernichtungsoperatoren) $a_{\mathbf{i}, \sigma}^{\dagger}$ ($a_{\mathbf{i}, \sigma}$). Die Indices \mathbf{i}, \mathbf{j} beziehen sich dabei auf die Gitterplätze des zugrunde gelegten D -dimensionalen Gitters, während $\sigma = \uparrow, \downarrow$ den Spin der Elektronen bezeichnet. Die hintere Summe stellt eine Coulombwechselwirkung zwischen Elektronen am gleichen Gitterplatz dar, deren Stärke durch den Parameter U bestimmt wird. Hierin sind $n_{\mathbf{i}, \sigma} = a_{\mathbf{i}, \sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{i}, \sigma}$ die Besetzungszahloperatoren der Gitterplätze. Im folgenden werden die Transfermatrixelemente auf nächste Nachbarn beschränkt und als translationsinvariant angenommen, d.h. $t_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} = -t$, $t > 0$ für nächste Nachbarn \mathbf{i}, \mathbf{j} , sonst $t_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} = 0$. Außerdem soll gelten $U > 0$, was eine abstoßende Korrelationswechselwir-

kung impliziert. Absorbiert man zusätzlich noch den für die Behandlung des großkanonischen Ensembles wichtigen Term des chemischen Potentials μ in den Hamilton-Operator, so nimmt dieser die Form

$$H = -t \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle} \sum_{\sigma} a_{\mathbf{i}, \sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{j}, \sigma} - \mu \sum_{\mathbf{i}, \sigma} n_{\mathbf{i}, \sigma} + U \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i}, \uparrow} n_{\mathbf{i}, \downarrow} \quad (2.2)$$

an. Hierin bezeichnet $\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle$ die Summation über nächste Nachbarn. Dieser Hamiltonian dient als Grundlage für den Rest dieser Arbeit.

Durch Übergang in die \mathbf{k} -Darstellung

$$a_{\mathbf{k}, \sigma} = N^{-D/2} \sum_{\mathbf{j}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{j}} a_{\mathbf{j}, \sigma}, \quad (2.3)$$

wobei N die Zahl der Gitterplätze bezeichnet, läßt sich im Fall des einfach kubischen D -dimensionalen Gitters der kinetische Anteil des Hamilton-Operators (2.2) diagonalisieren:

$$H^{kin} = -t \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle} \sum_{\sigma} a_{\mathbf{i}, \sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{j}, \sigma} - \mu \sum_{\mathbf{i}, \sigma} n_{\mathbf{i}, \sigma} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}}^0 a_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}, \sigma}. \quad (2.4)$$

Die Bandstruktur $\epsilon_{\mathbf{k}}^0$ ist dann gegeben durch

$$\epsilon_{\mathbf{k}}^0 = -2D \sum_{\nu=1}^D \cos a k_{\nu} - \mu. \quad (2.5)$$

k_{ν} meint hierin die kartesischen Komponenten des Wellenvektors \mathbf{k} , während a die Gitterkonstante bezeichnet, die im folgenden gleich Eins gesetzt wird und somit aus den Gleichungen verschwindet. Im Fall zweier Raumdimensionen findet man für die Zustandsdichte $\rho(E)$ zu dieser Bandstruktur

$$\rho^0(E) = \frac{2}{t} K \left(1 - \left(\frac{E}{4t} \right)^2 \right), \quad (2.6)$$

wobei $K(x)$ das geschlossene elliptische Integral 2. Art bezeichnet.

2.2 Unendliche Raumdimension

Die Bedeutung des Grenzfalles unendlicher Raumdimension ($D \rightarrow \infty$) rührt daher, daß es in mehreren Fällen (hauptsächlich für klassische Spinsysteme)

gelungen ist, für diesen Grenzfall exakte Lösungen anzugeben. Hierbei existieren jeweils enge Verbindungen zu Molekularfeldlösungen der betreffenden Systeme. Für das Hubbardmodell stehen solche exakten Lösungen zwar auch im Fall $D \rightarrow \infty$ noch aus, jedoch besteht Anlaß zu der Hoffnung, daß sich dies in Kürze ändern könnte. Die erste Betrachtung von $D \rightarrow \infty$ stammt von Wolff [4].

Die Betrachtungen des vorhergehenden Abschnitts zeigen, daß im Fall unendlicher Raumdimension der intraatomare Wechselwirkungsterm des Hamilton-Operators (2.2) zwar wohldefiniert bleibt, die kinetische Energie (2.5) jedoch nicht. Metzner und Vollhardt wiesen in [5] jedoch darauf hin, daß eine geeignete Skalierung des Transfermatrixelements t zu einem nichttrivialen Modell korrelierter Elektronen führt. Dazu muß der Hamilton-Operator (2.2) in folgender Weise modifiziert werden:

$$H^\infty = -\frac{t}{(2D)^{1/2}} \sum_{i,j} \sum_{\sigma} a_{i,\sigma}^+ a_{j,\sigma} - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}. \quad (2.7)$$

Diese Skalierung führt im Grenzfall $D \rightarrow \infty$ für den unkorrelierten Fall $U = 0$ zu der Zustandsdichte

$$\rho^\infty(E) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{E}{t} \right)^2 \right]. \quad (2.8)$$

Jede andere Skalierung des Transfermatrixelements t läßt die mittlere kinetische Energie der Elektronen entweder verschwinden oder divergieren.

2.3 Die Hilfsbosonenformulierung

Die Methode der Hilfsbosonenformulierung wurde 1976 von Barnes bei der Behandlung des Spin-1/2 Andersonmodells eingeführt [6]. Davon verschiedene Formulierungen folgten sukzessive. Der wohl populärste Ansatz dieser Art für das Hubbardmodell, der auch in dieser Arbeit verwendet wurde, stammt von Kotliar und Ruckenstein [7].

Im Rahmen dieses Ansatzes wird der Fockraum des Hamilton-Operators (2.2) um die Zustände von vier Bosonenfeldern mit den Erzeugungsoperatoren (Vernichtungsoperatoren) e_i^+ (e_i), $p_{i,\sigma}^+$ ($p_{i,\sigma}$) und d_i^+ (d_i) erweitert, die entsprechend die elektronischen Besetzungszustände der Gitterplätze leer (**empty**), einfach besetzt (**partial**) und doppelt besetzt (**double**) repräsentieren. Um unphysikalische Zustände, in denen die bosonischen Zustände nicht mit der elektronischen Besetzung übereinstimmen, auszuschließen, müssen folgende Zwangsbedingungen erfüllt sein:

$$e_i^+ e_i + p_{i,\uparrow}^+ p_{i,\uparrow} + p_{i,\downarrow}^+ p_{i,\downarrow} + d_i^+ d_i = 1, \quad (2.9)$$

$$a_{i,\sigma}^+ a_{i,\sigma} = p_{i,\sigma}^+ p_{i,\sigma} + d_i^+ d_i, \quad \sigma = \pm 1. \quad (2.10)$$

In dem Unterraum des erweiterten Fockraums, in dem die Bedingungen (2.9) und (2.10) erfüllt sind, ist mit den Kopplungsoperatoren

$$\bar{z}_{i,\sigma} = e_i^+ p_{i,\sigma} + p_{i,-\sigma}^+ d_i \quad (2.11)$$

der Hamilton-Operator

$$H^{KR} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} a_{i,\sigma}^+ \bar{z}_{i,\sigma}^+ \bar{z}_{j,\sigma} a_{j,\sigma} - \mu \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} + U \sum_{\mathbf{i}} d_{\mathbf{i}}^+ d_{\mathbf{i}} \quad (2.12)$$

äquivalent zum Hubbardhamiltonian (2.2). Die Einhaltung der Zwangsbedingungen läßt sich z.B. durch Einführung von Lagrangemultiplikatoren $\lambda_{\mathbf{i}}$ und $\lambda_{i,\sigma}$ erzwingen.

Der angegebene Ersatzhamiltonian (2.12) ist nicht der einzig mögliche. Man kann statt dessen jeden Operator \tilde{H} verwenden, der unter den Zwangsbedingungen (2.9) und (2.10) das gleiche Spektrum aufweist wie der ursprüngliche Hamilton-Operator (2.2). Dies ist ohne Bedeutung, solange die Zwangsbedingungen exakt behandelt werden. Jede Näherung, die die Einhaltung der Zwangsbedingungen aufweicht, führt hingegen zu Resultaten, die von der konkreten Wahl des Ersatzhamiltonians abhängen. Die dadurch

künstlich entstehende Freiheit kann dazu benutzt werden, bestimmte Grenzfälle richtig aus etwaigen Näherungen herauskommen zu lassen. So wählten Kotliar und Ruckenstein in [7] statt der Kopplungsoperatoren $\bar{z}_{i,\sigma}$ die modifizierten Operatoren

$$z_{i,\sigma} = \left(1 - d_i^+ d_i - p_{i,\sigma}^+ p_{i,\sigma}\right)^{-1/2} \bar{z}_{i,\sigma} \left(1 - e_i^+ e_i - p_{i,-\sigma}^+ p_{i,-\sigma}\right)^{-1/2}. \quad (2.13)$$

Diese Wahl bietet den Vorteil, daß in der von Kotliar und Ruckenstein durchgeführten weiteren Behandlung, die dieser Arbeit zugrunde liegt, die Grenzfälle $U \rightarrow 0$ und $t \rightarrow 0$ richtig herauskommen und darüber hinaus die sogenannte Gutzwillerlösung reproduziert wird. Diese mit Hilfe einer Variationswellenfunktion gewonnene Lösung wurde von Gutzwiller in [8] angegeben. Der Sinn einer Reproduktion dieser Lösung liegt darin, daß das von Gutzwiller verwendete Verfahren zum Erhalt dieser Lösung keiner systematischen Verbesserung zugänglich ist, im Gegensatz zu dem von Kotliar und Ruckenstein beschrittenen Weg.

Die weitere Auswertung von (2.12) kann nun mit Standardmethoden der statistischen Physik erfolgen. So kann die großkanonische Zustandssumme Z im Rahmen der Methode kohärenter Zustände z.B. folgendermaßen als Funktionalintegral über Fermionen- und Bosonenfelder geschrieben werden (e_i , $p_{i,\sigma}$, d_i und $a_{i,\sigma}$ bezeichnen dann keine Operatoren mehr, sondern komplexe Größen und Grassmannvariable, was aber keinen Anlaß zu Verwechslungen geben sollte):

$$Z = \int \mathcal{D}a \mathcal{D}e \mathcal{D}p_\sigma \mathcal{D}d \prod_{i,\sigma} d\lambda'_i d\lambda_{i,\sigma} \exp \left[- \int_0^\beta \mathcal{L}(\tau) d\tau \right]. \quad (2.14)$$

Die im Exponenten stehende Lagrangefunktion $\mathcal{L}(\tau)$ ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\tau) = & \sum_{i,j} \sum_{\sigma} a_{i,\sigma}^+ \left[(\partial_\tau - \mu + \lambda_{i,\sigma}) \delta_{i,j} + z_{i,\sigma}^+ z_{j,\sigma} t_{i,j} \right] a_{j,\sigma} \\ & + \sum_i e_i^+ (\partial_\tau + \lambda'_i) e_i + \sum_{i,\sigma} p_{i,\sigma}^+ (\partial_\tau + \lambda'_i - \lambda_{i,\sigma}) p_{i,\sigma} \\ & + \sum_i d_i^+ \left(\partial_\tau + \lambda'_i - \sum_{\sigma} \lambda_{i,\sigma} + U \right) d_i - \sum_i \lambda'_i. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Kapitel 3

Sattelpunktsnäherung der Hilfsbosonenformulierung

3.1 Methode der Sattelpunktsnäherung

Da sich die Zustandssumme (2.14) analytisch nicht exakt auswerten läßt, müssen für ihre Behandlung Näherungen gemacht werden. Eine der einfachsten Näherungen ist die bereits von Kotliar und Ruckenstein [7] verwendete Sattelpunktsnäherung. Hierfür werden die in der Lagrangefunktion (2.15) auftretenden Bosefelder $e_i^{(+)}$, $p_{i,\sigma}^{(+)}$ und $d_i^{(+)}$ sowie die Lagrangemultiplikatoren λ'_i und $\lambda_{i,\sigma}$ durch ihre Werte an einem Sattelpunkt der Lagrangefunktion ersetzt. Auf Grund der Homogenität des zugrundeliegenden Hamilton-Operators (2.12) können diese gitterplatzunabhängig angenommen werden und werden im folgenden mit e , p_σ , d , λ' und λ_σ bezeichnet. Für die Behandlung von Lösungen mit einer Überstruktur, wie z.B. Antiferromagnetismus, muß dieses Verfahren natürlich modifiziert werden, da hier trotz der Homogenität des Hamilton-Operators Gitterplatzabhängigkeiten auftreten.

Das großkanonische Potential Φ bzw. die freie Energie F des Systems kann

nun am Sattelpunkt berechnet werden, und man erhält

$$\begin{aligned}\frac{F}{N} &= \frac{\Phi}{N} + \mu n \\ &= -(\beta N)^{-1} \ln \text{Sp} \left[e^{-\beta H^{eff}} \right] + U d^2 + \lambda' (e^2 + p_{\uparrow}^2 + p_{\downarrow}^2 + d^2) \\ &\quad - \sum_{\sigma} \lambda_{\sigma} (p_{\sigma}^2 + d^2) + \mu n \quad ,\end{aligned}\tag{3.1}$$

wobei n die mittlere Elektronenzahl am Gitterplatz bezeichnet, $\beta = (k_B T)^{-1}$ die inverse Temperatur und der effektive Hamilton-Operator H^{eff} gegeben ist durch

$$H^{eff} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} q_{\sigma} a_i^+ a_j - \sum_{i,\sigma} (\mu - \lambda_{\sigma}) n_{i,\sigma} \quad ,\tag{3.2}$$

mit dem Renormierungsfaktor

$$q_{\sigma} = z^+ z = \frac{(e p_{\sigma} + p_{-\sigma} d)^2}{(1 - d^2 - p_{\sigma}^2)(1 - e^2 - p_{-\sigma}^2)} \quad .\tag{3.3}$$

Dieser effektive Hamilton-Operator geht aber aus dem kinetischen Anteil (2.4) des Hubbardhamiltonians (2.2) durch einfache Renormierung mit dem Faktor q_{σ} und Verschiebung um λ_{σ} hervor. Daher läßt er sich wie dieser durch eine Fouriertransformation diagonalisieren, und man erhält für ihn die effektive Bandstruktur

$$\epsilon_{\mathbf{k},\sigma} = q_{\sigma} \epsilon_{\mathbf{k},\sigma}^0 + \lambda_{\sigma} \quad .\tag{3.4}$$

Es verbleibt die Aufgabe, die Werte der Bosefelder und Lagrangemultiplikatoren so zu bestimmen, daß die Auswertung tatsächlich an einem Sattelpunkt der Lagrangefunktion stattfindet. Dies geschieht am einfachsten durch das Aufsuchen von Minima der freien Energie F . Die entsprechenden Gleichungen erhält man durch Nullsetzen der partiellen Ableitungen von F nach den Bosefeldern und Lagrangemultiplikatoren. Eine weitere Gleichung ergibt die Ableitung nach dem chemischen Potential zur Festlegung der Elektronendichte n . Die nächsten Abschnitte sind den entsprechenden Gleichungssystemen unter Vorgabe verschiedener magnetischer Ordnungsstrukturen gewidmet.

3.2 Der paramagnetische Fall

Paramagnetische Ordnung kann in dem verwendeten Formalismus dadurch charakterisiert werden, daß die Werte der spinabhängigen Größen p_σ und λ_σ für beide Spinrichtungen gleichgesetzt werden, also

$$p_\uparrow = p_\downarrow =: p \quad (3.5)$$

$$\lambda_\uparrow = \lambda_\downarrow =: \lambda \quad (3.6)$$

Damit verschwindet natürlich auch die Spinabhängigkeit des Renormierungsfaktors q_σ , der die Form

$$q_\uparrow = q_\downarrow = \frac{p^2 (e + d)^2}{(1 - d^2 - p^2)(1 - e^2 - p^2)} =: q \quad (3.7)$$

annimmt. Nullsetzen der partiellen Ableitungen der freien Energie pro Gitterplatz nach den sechs Größen e , p , d , λ' , λ und μ liefert das Gleichungssystem

$$0 = I_E \frac{\partial q}{\partial e} + \lambda' e \quad (3.8)$$

$$0 = I_E \frac{\partial q}{\partial p} + (\lambda' - \lambda) p \quad (3.9)$$

$$0 = I_E \frac{\partial q}{\partial d} + (\lambda' - 2\lambda + U) d \quad (3.10)$$

$$0 = e^2 + 2p^2 + d^2 - 1 \quad (3.11)$$

$$0 = I_N - (d^2 + p^2) \quad (3.12)$$

$$0 = 2I_N - n \quad (3.13)$$

Hierin sind die Größen I_E und I_N \mathbf{k} -Summen der Gestalt

$$I_E = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}}^0 \langle a_{\mathbf{k},\uparrow}^+ a_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}}^0 \langle a_{\mathbf{k},\downarrow}^+ a_{\mathbf{k},\downarrow} \rangle \quad (3.14)$$

$$I_N = \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{k},\uparrow}^+ a_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{k},\downarrow}^+ a_{\mathbf{k},\downarrow} \rangle \quad (3.15)$$

wobei die thermodynamischen Mittelwerte $\langle \dots \rangle$ der elektronischen Besetzungszahloperatoren durch die Fermifunktion gegeben sind. Die partiellen Ableitungen von q sind in A.1 aufgelistet. Dieses Gleichungssystem wurde von Lavagna in [9] und [10] ausführlich untersucht und diskutiert.

3.3 Der ferromagnetische Fall

Für die Behandlung von ferromagnetischen Zuständen muß die freie Energie in Abhängigkeit von den acht Größen e , p_σ , d , λ' , λ_σ und μ mit Berücksichtigung der Spinabhängigkeiten minimiert werden. Die partiellen Ableitungen der freien Energie pro Gitterplatz führen auf das Gleichungssystem

$$0 = I_{E,\uparrow} \frac{\partial q_\uparrow}{\partial e} + I_{E,\downarrow} \frac{\partial q_\downarrow}{\partial e} + 2 * \lambda' e \quad (3.16)$$

$$0 = I_{E,\uparrow} \frac{\partial q_\uparrow}{\partial p_\uparrow} + I_{E,\downarrow} \frac{\partial q_\downarrow}{\partial p_\uparrow} + 2 (\lambda' - \lambda_\uparrow) p \quad (3.17)$$

$$0 = I_{E,\uparrow} \frac{\partial q_\uparrow}{\partial p_\downarrow} + I_{E,\downarrow} \frac{\partial q_\downarrow}{\partial p_\downarrow} + 2 (\lambda' - \lambda_\downarrow) p \quad (3.18)$$

$$0 = I_{E,\uparrow} \frac{\partial q_\uparrow}{\partial d} + I_{E,\downarrow} \frac{\partial q_\downarrow}{\partial d} + 2 (\lambda' - \lambda_\uparrow - \lambda_\downarrow + U) d \quad (3.19)$$

$$0 = e^2 + p_\uparrow^2 + p_\downarrow^2 + d^2 - 1 \quad (3.20)$$

$$0 = I_{N,\uparrow} - (d^2 + p_\uparrow^2) \quad (3.21)$$

$$0 = I_{N,\downarrow} - (d^2 + p_\downarrow^2) \quad (3.22)$$

$$0 = I_{N,\uparrow} + I_{N,\downarrow} - n \quad (3.23)$$

Die \mathbf{k} -Summen sind jetzt ebenfalls spinabhängig und durch

$$I_{E,\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}}^0 \langle a_{\mathbf{k},\sigma}^+ a_{\mathbf{k},\sigma} \rangle \quad (3.24)$$

$$I_{N,\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{k},\sigma}^+ a_{\mathbf{k},\sigma} \rangle \quad (3.25)$$

gegeben. Auch die in dem Gleichungssystem (3.16) - (3.23) auftretenden partiellen Ableitungen der Renormierungsfaktoren q_σ findet man unter A.2 aufgelistet.

3.4 Der antiferromagnetische Fall

Wie bereits in 3.1 angemerkt, muß die Berechnung der freien Energie im Rahmen der Sattelpunktsnäherung für die Behandlung des Antiferromagnetismus modifiziert werden. Hierzu wird das Gitter in zwei Untergitter \mathbf{A} und

B unterteilt, die physikalisch äquivalent angenommen werden. Die Werte der Bosefelder werden nun nicht mehr auf allen Gitterplätzen gleich angesetzt, sondern nur noch innerhalb der beiden Untergitter. Damit hängt die freie Energie zunächst von den Variablen $e_\alpha, p_{\sigma,\alpha}, d_\alpha, \lambda'_\alpha, \lambda_{\sigma,\alpha}$ und μ ab mit dem Untergitterindex $\alpha = \mathbf{A}, \mathbf{B}$. Die Symmetrie antiferromagnetischer Zustände erfordert jedoch, daß folgende Bedingungen erfüllt sein müssen:

$$e_{\mathbf{A}} = e_{\mathbf{B}} =: e \quad (3.26)$$

$$d_{\mathbf{A}} = d_{\mathbf{B}} =: d \quad (3.27)$$

$$p_{\sigma,\mathbf{A}} = p_{-\sigma,\mathbf{B}} =: p_\sigma \quad (3.28)$$

$$\lambda'_{\mathbf{A}} = \lambda'_{\mathbf{B}} =: \lambda' \quad (3.29)$$

$$\lambda_{\sigma,\mathbf{A}} = \lambda_{-\sigma,\mathbf{B}} =: \lambda_\sigma \quad (3.30)$$

Weiterhin ist es in diesem Fall sinnvoll, statt der Lagrangemultiplikatoren λ_σ die Größen

$$\lambda = \frac{\lambda_\uparrow + \lambda_\downarrow}{2} \quad (3.31)$$

$$\delta\lambda = \frac{\lambda_\uparrow - \lambda_\downarrow}{2} \quad (3.32)$$

zu verwenden. Die hiermit eingeführte Bezeichnungsweise ohne Untergitterindex wird im folgenden verwendet, da eine Verwechslung mit den gleich bezeichneten Größen in den vorher betrachteten Fällen jeweils durch den Zusammenhang ausgeschlossen wird.

Der effektive Hamilton-Operator erhält jetzt die Gestalt

$$H_{AF}^{eff} = -tq \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} a_{i,\sigma}^+ a_{j,\sigma} + \sum_{i \in \mathbf{A}, \sigma} (\mu - \lambda_\sigma) n_{i,\sigma} + \sum_{i \in \mathbf{B}, \sigma} (\mu - \lambda_{-\sigma}) n_{i,\sigma} \quad (3.33)$$

mit dem Renormierungsfaktor

$$q = \frac{(ep_\uparrow + dp_\downarrow)(ep_\downarrow + dp_\uparrow)}{\left[(1 - d^2 - p_\uparrow^2)(1 - e^2 - p_\downarrow^2)(1 - d^2 - p_\downarrow^2)(1 - e^2 - p_\uparrow^2) \right]^{1/2}} \quad (3.34)$$

Der effektive Hamilton-Operator (3.33) läßt sich durch eine Fouriertransformation auf den Untergittern und eine nachfolgende lineare Transformation diagonalisieren, und man erhält

$$H_{AF}^{eff} = \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}, \alpha}^{AF} f_{\mathbf{k}, \sigma, \alpha}^{+} f_{\mathbf{k}, \sigma, \alpha} \quad (3.35)$$

mit fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $f_{\mathbf{k}, \sigma, \alpha}^{+}$ und $f_{\mathbf{k}, \sigma, \alpha}$ und der Bandstruktur

$$\epsilon_{\mathbf{k}, \alpha}^{AF} = \alpha \sqrt{(q\epsilon_{\mathbf{k}}^0)^2 + \delta\lambda^2} + \lambda - \mu \quad (3.36)$$

Der Faktor α ist $+1$ im Fall $\alpha = \mathbf{A}$ und -1 im Fall $\alpha = \mathbf{B}$.

Ähnlich wie im Abschnitt 3.1 läßt sich nun auch die freie Energie pro Gitterplatz berechnen. Man erhält den Ausdruck

$$\frac{F}{N} = -\frac{1}{\beta} \ln \text{Sp} \left[e^{-\beta H_{AF}^{eff}} \right] + U d^2 + \lambda' (e^2 + p_{\uparrow}^2 + p_{\downarrow}^2 + d^2) \quad (3.37)$$

$$- \lambda (2d^2 + p_{\uparrow}^2 + p_{\downarrow}^2) - \delta\lambda (p_{\uparrow}^2 - p_{\downarrow}^2) + \mu n \quad (3.38)$$

Nullsetzen der partiellen Ableitungen der freien Energie pro Gitterplatz nach den Variablen e , p_{σ} , d , λ' , λ_{σ} und μ führt nun auf das Gleichungssystem

$$0 = I_E^{AF} \frac{\partial q}{\partial e} + \lambda' e \quad (3.39)$$

$$0 = I_E^{AF} \frac{\partial q}{\partial p_{\uparrow}} + (\lambda' - \lambda - \delta\lambda) p_{\uparrow} \quad (3.40)$$

$$0 = I_E^{AF} \frac{\partial q}{\partial p_{\downarrow}} + (\lambda' - \lambda + \delta\lambda) p_{\downarrow} \quad (3.41)$$

$$0 = I_E^{AF} \frac{\partial q}{\partial d} + (\lambda' - 2\lambda + U) d \quad (3.42)$$

$$0 = 2I_N^{AF} - (2d^2 + p_{\uparrow}^2 + p_{\downarrow}^2) \quad (3.43)$$

$$0 = e^2 + p_{\uparrow}^2 + p_{\downarrow}^2 + d^2 - 1 \quad (3.44)$$

$$0 = I_M^{AF} - (p_{\uparrow}^2 - p_{\downarrow}^2) \quad (3.45)$$

$$0 = 2I_N^{AF} - n \quad (3.46)$$

mit den \mathbf{k} -Summen

$$I_E^{AF} = \sum_{\mathbf{k},\alpha} \alpha \frac{q (\epsilon_{\mathbf{k}}^0)^2}{\sqrt{(q\epsilon_{\mathbf{k}}^0)^2 + \delta\lambda^2}} \langle f_{\mathbf{k},\sigma,\alpha}^+ f_{\mathbf{k},\sigma,\alpha} \rangle \quad (3.47)$$

$$I_N^{AF} = \sum_{\mathbf{k},\alpha} \langle f_{\mathbf{k},\sigma,\alpha}^+ f_{\mathbf{k},\sigma,\alpha} \rangle \quad (3.48)$$

$$I_M^{AF} = \sum_{\mathbf{k},\alpha} \alpha \frac{\delta\lambda}{\sqrt{(q\epsilon_{\mathbf{k}}^0)^2 + \delta\lambda^2}} \langle f_{\mathbf{k},\sigma,\alpha}^+ f_{\mathbf{k},\sigma,\alpha} \rangle \quad (3.49)$$

Die Teilchenzahlerwartungswerte sind natürlich wieder durch die Fermifunktion gegeben, wobei der Spinindex σ ohne Bedeutung ist, da die Bandstruktur (3.36) nicht spinabhängig ist. Der Faktor α regelt wie in der Bandstruktur die Vorzeichenwahl. Die Ausdrücke für die partiellen Ableitungen des Renormierungsfaktors q sind in A.3 angegeben.

3.5 Numerische Auswertung

Die Sattelpunktgleichungssysteme (3.8)-(3.13), (3.16)-(3.23) und (3.39)-(3.46) wurden im Zuge dieser Arbeit für verschiedene Werte von U/t und der Dotierung $\delta = 1 - n$ bei $T = 0$ gelöst. Dabei konnte sich auf den Fall $\delta > 0$, also Lochdotierung, beschränkt werden, da sowohl der Hamilton-Operator (2.2) als auch die Sattelpunktgleichungen invariant gegen eine Teilchen-Loch-Vertauschung sind. Die Beschränkung auf $T = 0$ erfolgte aus zwei Gründen. Zum einen ist der numerische Aufwand bei der Behandlung endlicher Temperaturen erheblich größer, da die Abtastung des Bereichs der Brillouinzone um die Fermikante mit hoher Genauigkeit erfolgen muß, um die Aufweichung der Fermifunktion korrekt zu behandeln. Andererseits erscheint die Vernachlässigung der Fluktuationen der Bosefelder, wie sie durch die Sattelpunktsnäherung geschieht, nur bei sehr tiefen Temperaturen gerechtfertigt, wo die Änderungen gegenüber dem Fall $T = 0$ relativ gering sind. Die Berechnung der in den Gleichungen auftretenden \mathbf{k} -Summen erfolgte durch Integration über die Brillouinzone. Bei der Behandlung von Para-

und Ferromagnetismus wurde hierzu für das zweidimensionale System eine \mathbf{k} -Komponente analytisch ausintegriert, so daß nur noch ein eindimensionales Integral über die andere Komponente numerisch berechnet werden mußte. Im antiferromagnetischen Fall und bei der Behandlung des Grenzfalls unendlicher Raumdimension wurde ausgenutzt, daß die \mathbf{k} -Summen jeweils nur über die Bandstruktur $\epsilon_{\mathbf{k}}^0$ vom Wellenvektor \mathbf{k} abhängen, so daß die \mathbf{k} -Integrale mit Hilfe der Zustandsdichte ρ^0 (2.6) bzw. ρ^∞ (2.8) durch (eindimensionale) Integrale über die Teilchenenergie ausgedrückt werden können. Die numerische Behandlung der Integrale erfolgte mittels der Simpsonregel mit gewichteter Intervallbreite. Für die Berechnung des in die Zustandsdichte ρ^0 eingehenden geschlossenen elliptischen Integrals 2. Art wurde die Methode der iterierten Mittelwertbildung angewandt (vgl. z.B. [11]), welche erlaubt, in wenigen Iterationsschritten die gewünschte Funktion mit hoher Genauigkeit zu berechnen.

Für die Behandlung der Gleichungssysteme wurden zunächst einige Gleichungen in den Gleichungssystemen analytisch gelöst. So findet man in allen Fällen die Beziehung

$$d^2 = n - 1 + e^2 . \quad (3.50)$$

Bei der Behandlung des Paramagnetismus erhält man weiterhin

$$p^2 = \frac{1}{2} (2 - n - 2e^2) , \quad (3.51)$$

sowie in den Fällen Ferromagnetismus und Antiferromagnetismus

$$p_{\downarrow}^2 = 2 - n - 2e^2 - p_{\uparrow}^2 . \quad (3.52)$$

Des weiteren läßt sich mit Hilfe der Gleichungen (3.8), (3.16) und (3.39), die durch die Ableitung der freien Energie nach e entstehen, jeweils der Lagrange-multiplikator λ' aus den Gleichungen eliminieren. Somit verbleiben drei zu lösende Gleichungen im unmagnetischen Fall und fünf in den magnetischen Fällen. Diese wurden mit Hilfe des mehrdimensionalen Newton-Verfahrens

mit Lambdastrategie gelöst (vgl. z.B. [12]). Die hierbei benötigten partiellen Ableitungen der verbliebenen Gleichungen wurden numerisch durch zentrale Differenzenquotienten berechnet, deren Schrittweiten vom Programm dynamisch in sinnvollen Bereichen gehalten wurden. Weiterhin wurde der Aufruf einer Testfunktion implementiert, die zu verhindern sollte, daß bei der Iteration unzulässige Bereiche des Variablenraums erreicht wurden.

Die für die Lösung verwendeten Computerprogramme wurden allesamt in der Programmiersprache C geschrieben. Dadurch wurde ein modularer Aufbau erreicht, der eine Mehrfachverwertung großer Programmteile, z.B. der zum Newton-Verfahren gehörenden, in den Programmen für die verschiedenen Gleichungssysteme ermöglichte.

Kapitel 4

Ergebnisse

4.1 Zwei Raumdimensionen

In diesem Abschnitt werden die aus der numerischen Lösung der Sattelpunktgleichungssysteme folgenden physikalischen Größen für das zweidimensionale System dargestellt und diskutiert.

4.1.1 Paramagnetische Lösungen

Für den paramagnetischen Fall sind die entsprechenden Ergebnisse schon lange bekannt und insbesondere anhand des Gutzwilleransatzes hinlänglich untersucht. Trotzdem erfolgt hier noch einmal eine Vorstellung der Resultate, um den Vergleich mit den Ergebnissen der anderen magnetischen Lösungen zu ermöglichen.

Die Abbildungen 4.1 und 4.2 zeigen das Verhalten der Hilfsbosonen in Abhängigkeit von der Stärke der Coulombwechselwirkung U/t im paramagnetischen Fall für die sehr kleine Dotierung $\delta = 0.001$ und die vergleichsweise große Dotierung $\delta = 0.1$. Zunächst erkennt man in beiden Darstellungen den durch Gleichung (3.50) gegebenen parallelen Verlauf der Besetzungswahrscheinlichkeiten für leere und doppelt besetzte Gitterplätze. Ausgehend

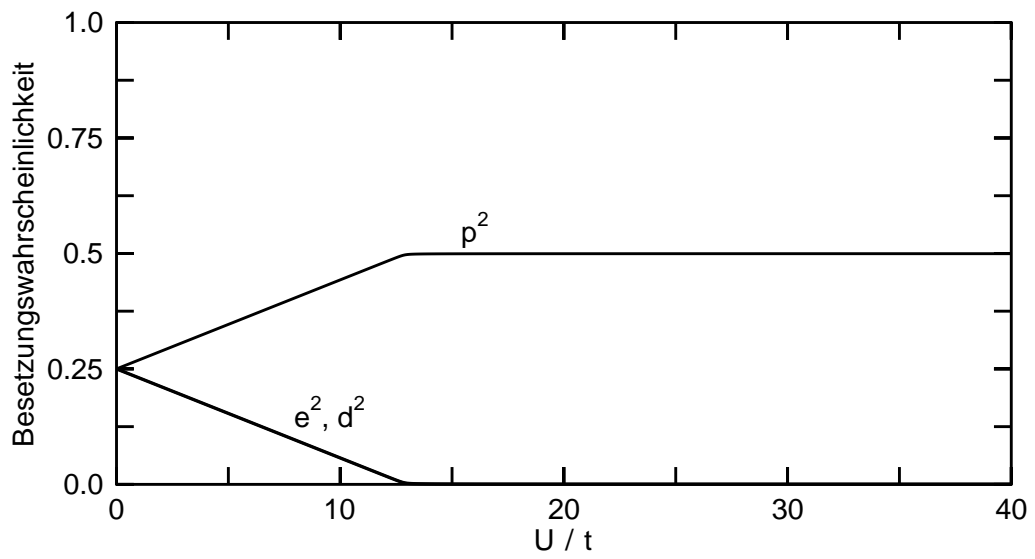


Abbildung 4.1: Quadrate der Bosefelder im zweidimensionalen paramagnetischen Fall für $\delta = 0.001$.

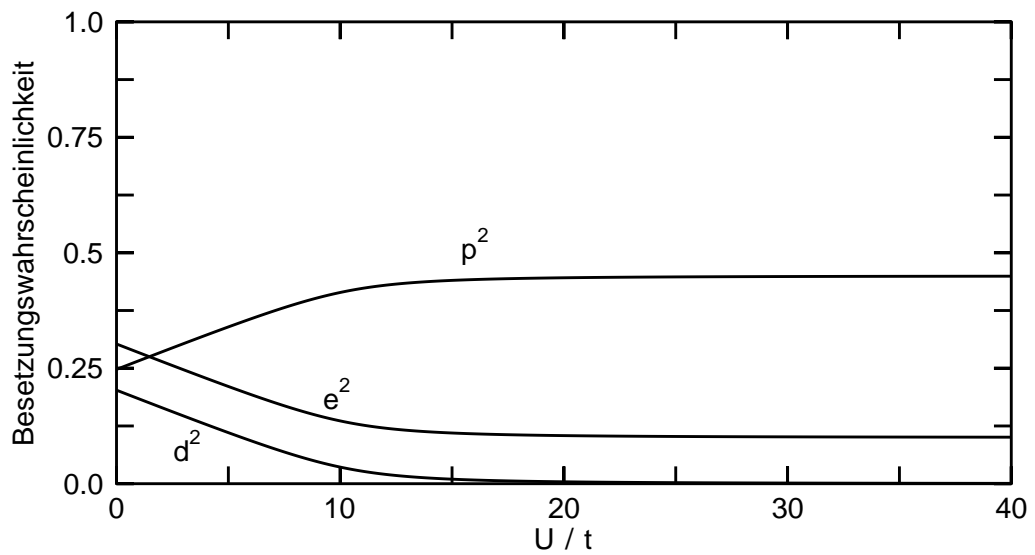


Abbildung 4.2: Quadrate der Bosefelder im zweidimensionalen paramagnetischen Fall für $\delta = 0.1$.

vom unkorrelierten Fall $U/t = 0$, sinken zunächst bei beiden Dotierungen die Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten von Doppelbesetzungen mit steigender Coulombwechselwirkung. Dieses Verhalten ist leicht zu verstehen, da die Coulombwechselwirkung ja einer Doppelbesetzung von Gitterplätzen entgegenwirkt. Entsprechend erhöht sich natürlich der Anteil der Einfachbesetzungen, wie die Besetzungswahrscheinlichkeit der p -Bosonen zeigt. Diese Änderungen erfolgen bei kleinem U/t linear. Im Fall von nahezu halber Bandfüllung ($\delta = 0.001$) ändert sich dies jedoch bei $U/t \approx 13$. An dieser Stelle knicken die Kurven, und die Besetzungswahrscheinlichkeiten bleiben für alle höheren Werte von U/t konstant. Hierin manifestiert sich ein Metall-Isolator-Übergang, der von Brinkman und Rice in der Lösung des Gutzwilleransatzes mit Gutzwillernäherung gefunden wurde [13] und auch als Brinkman-Rice-Übergang bezeichnet wird. Ein eigentlicher Metall-Isolator-Übergang tritt allerdings nur bei halber Bandfüllung auf. Nur in diesem Fall besitzen die Kurven einen Knick im Sinne eines Sprungs in der Ableitung, und nur dann bleiben die Besetzungswahrscheinlichkeiten mathematisch exakt konstant für höhere Wechselwirkungsstärken. Wie Abbildung 4.1 gut zeigt, wird dieses Verhalten jedoch bei kleinen Dotierungen sehr gut approximiert. Aus Abbildung 4.2 hingegen ist ersichtlich, daß für größere Dotierungen der Brinkman-Rice-Übergang nur noch andeutungsweise in den Kurven zu finden ist.

Der Brinkman-Rice-Übergang ist auch im Verhalten der Lagrangemultiplikatoren λ und λ' wiederzufinden. Diese sind in den Abbildungen 4.3 und 4.4 für die gleichen Dotierungen wie die Bosefelder aufgetragen, wobei jedoch auch der Fall der Elektronendotierung ($\delta < 0$) berücksichtigt wurde. Bei der Auftragung der Bosefelder ist eine Berücksichtigung von Elektronendotierung nicht sinnvoll, da sich die Ergebnisse auf Grund der Teilchen-Loch-Symmetrie nur durch eine Vertauschung der Rollen der e - und d -Bosonen von denen bei Lochdotierung unterscheiden. Für nahezu halbe Bandfüllung ($\delta = 0.001$) verlaufen unterhalb des Brinkman-Rice-Übergangs die Lagrangemultiplika-

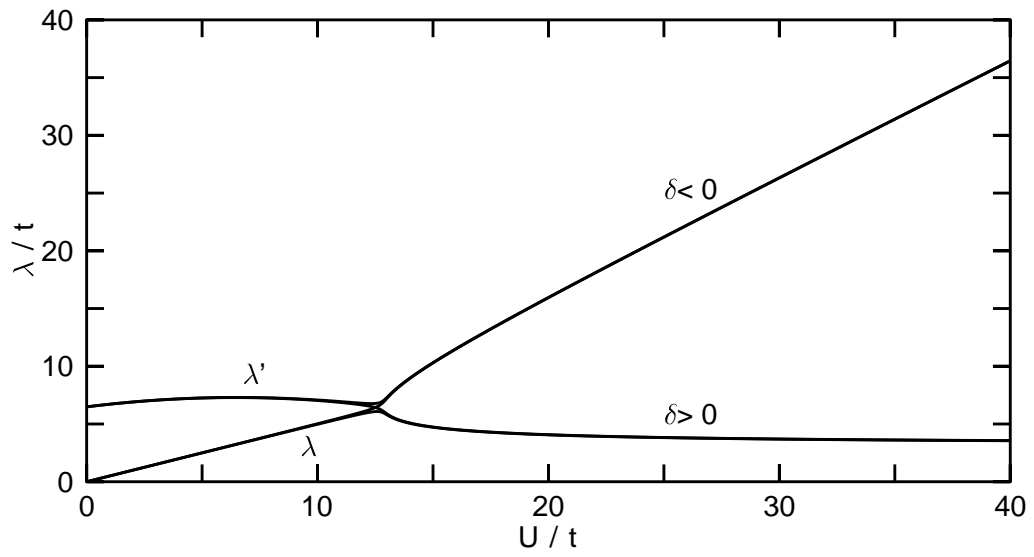


Abbildung 4.3: Lagrangemultiplikatoren im zweidimensionalen paramagnetischen Fall für $\delta = \pm 0.001$.

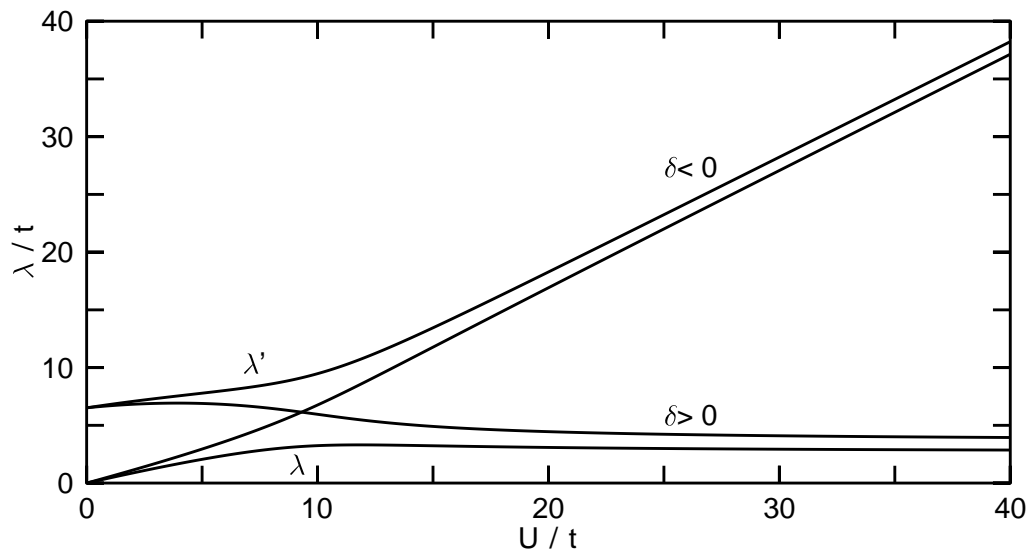


Abbildung 4.4: Lagrangemultiplikatoren im zweidimensionalen paramagnetischen Fall für $\delta = \pm 0.1$.

toren für Loch- und Elektronendotierung nahezu gleich. λ steigt in diesem Bereich, beginnend bei Null, ungefähr linear an, wohingegen λ' im wesentlichen konstant bleibt. Am Metall-Isolator-Übergang spalten dann die Kurven für Loch- und Elektronendotierung auf, während sich λ und λ' ab hier nicht mehr wesentlich unterscheiden. Die Lagrangemultiplikatoren für Lochdotierung sinken im weiteren Verlauf ein wenig ab und scheinen sich dabei einer Konstanten zu nähern. Im Gegensatz dazu steigen die Lagrangemultiplikatoren im Fall der Elektronendotierung weiterhin im wesentlichen linear an. Die Aufspaltung der Ergebnisse für Elektron- und Lochdotierung ist eine Folge des Energieanstiegs im System auf Grund der steigenden Coulombwechselwirkung in Verbindung mit den bei Elektronendotierung unvermeidbar vorhandenen Gitterplatzdoppelbesetzungen. Da λ die Verschiebung der renormierten Bänder gegenüber dem unkorrelierten Fall darstellt, kann diese Aufspaltung auch als das Auftreten von oberem und unterem Hubbardband angesehen werden. Diese Interpretation darf jedoch nicht allzusehr in Anspruch genommen werden, da bei der Sattelpunktsbehandlung nicht mit halber Bandfüllung ein abgeschlossenes und ein leeres Band vorliegen, sondern, wie die Bandstruktur (3.4) zeigt, nach wie vor nur ein halb gefülltes Band. Eine Diskussion des Verhaltens des zweiten Lagrangemultiplikators λ' ist schwierig, da seine physikalische Bedeutung bis heute unklar ist. Abbildung 4.4 zeigt, daß auch für die Lagrangemultiplikatoren bei höheren Dotierungen das charakteristische Verhalten des Brinkman-Rice-Übergangs verloren geht und hier die Aufspaltung der Bänder für Elektron- und Lochdotierung schon bei kleinsten Werten von U/t einsetzt.

Für die Betrachtung der effektiven Bandstruktur ist neben dem Lagrangemultiplikator λ der Renormierungsfaktor q wesentlich. Sein Verhalten für die beiden betrachteten Dotierungen ist in Abbildung 4.5 dargestellt. Man erkennt, daß für $\delta = 0.001$ die Bandbreite (gegeben durch $8qt$) mit steigendem U/t immer kleiner wird und am Brinkman-Rice-Übergang praktisch auf Null

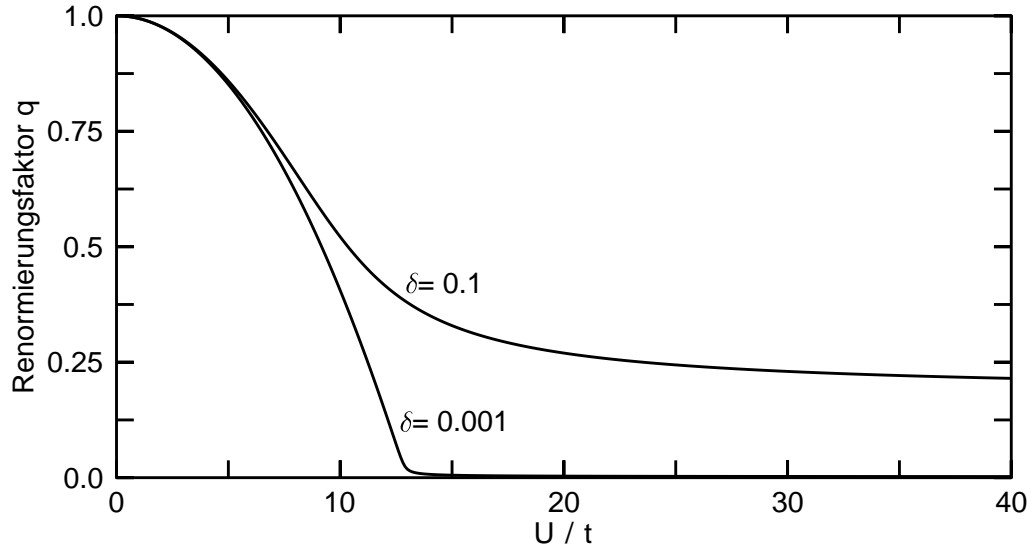


Abbildung 4.5: Renormierungsfaktor q im zweidimensionalen paramagnetischen Fall für $\delta = 0.001$ und $\delta = 0.1$.

sinkt. Hieran zeigt sich auch die Bedeutung des Brinkman-Rice-Übergangs als Metall-Isolator-Übergang, da ein Verschwinden des Renormierungsfaktors einer divergierenden effektiven Masse entspricht bzw. einer verschwindenden Transfermatrix. Ebenso erkennt man daran auch das Fehlen des Brinkman-Rice-Übergangs bei Dotierungen ungleich Null bzw. das Verschwinden des Isolatorcharakters der Lösungen oberhalb dieses Übergangs bei höheren Dotierungen.

Zum Abschluß der Betrachtung der paramagnetischen Lösungen zeigt die Auftragsung 4.6 das Verhalten des chemischen Potentials in Abhängigkeit der Dotierung für verschiedene Werte von U/t . Der Sinn dieser Auftragsung liegt darin, die thermodynamische Stabilität der gefundenen Lösungen zu untersuchen. Es läßt sich nämlich leicht zeigen (vgl. z.B. [14]), daß eine Lösung mit $\frac{\partial \mu}{\partial n} < 0$ thermodynamisch nicht stabil sein kann, da sie nicht einem Maximum der Entropie entspricht. Wie man aus Abbildung 4.6 aber leicht ersehen kann, zeigt das chemischen Potentials für alle Dotierungen das zur Stabilität notwendige Verhalten.

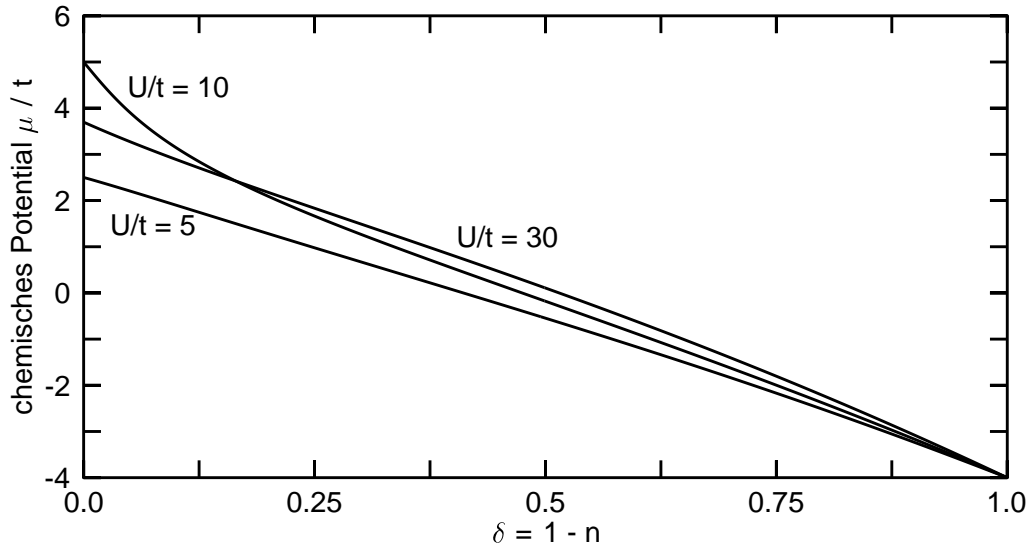


Abbildung 4.6: Chemisches Potential μ im zweidimensionalen paramagnetischen Fall für verschiedene Werte von U/t .

4.1.2 Ferromagnetische Lösungen

Die Abbildungen 4.7 und 4.8 zeigen die Besetzungswahrscheinlichkeiten der Hilfsbosonenzustände für die gefundenen ferromagnetischen Lösungen mit Dotierungswerten von $\delta = 0.001$ und $\delta = 0.1$. Zunächst erkennt man, daß nicht für alle Werte von U/t Lösungen gefunden wurden. Bei tiefen Werten von U/t ist der Grund hierfür, daß es offenbar gar keine Lösungen der entsprechenden Sattelpunktsgleichungen gibt. Dies erscheint auch vernünftig, da zur Herstellung einer ferromagnetischen Ordnung im System Energie benötigt wird, die erst oberhalb eines kritischen Wertes von U/t aufgebracht werden kann. Das Fehlen von Lösungen im Bereich höherer Werte von U/t in den Auftragungen hingegen beruht, wie man den Abbildungen entnehmen kann, darauf, daß hier total spinpolarisierte Lösungen angenommen werden, bei denen das Minoritätsband völlig entleert ist. Diese Lösungen sind zwar trivialerweise Eigenzustände des Hubbardmodells, können jedoch numerisch nicht im Rahmen der hier verwendeten Hilfsbosonenmethode behandelt werden, da der Renormierungsfaktor q_{\downarrow} für diese Lösungen divergiert.

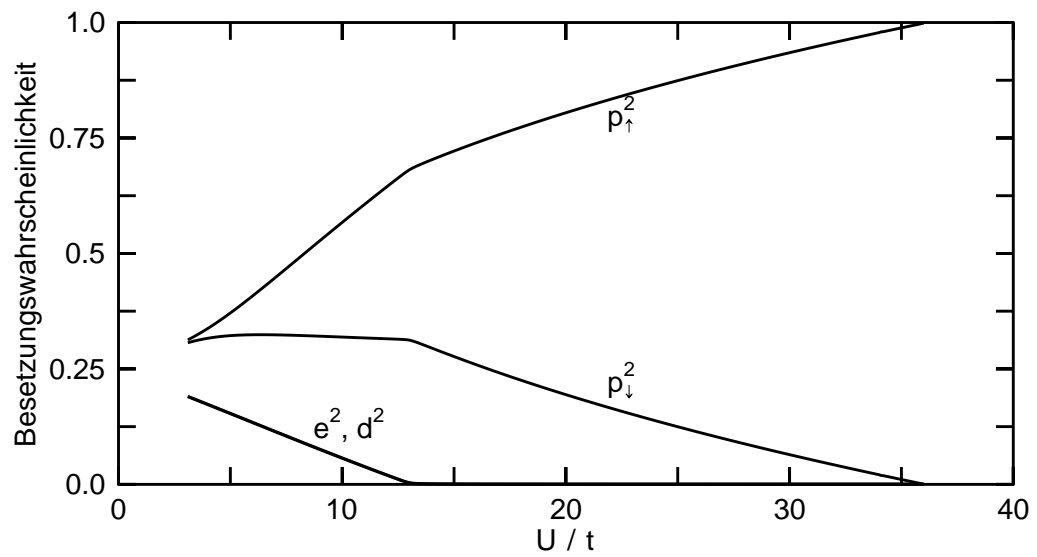


Abbildung 4.7: Quadrate der Bosefelder im zweidimensionalen ferromagnetischen Fall für $\delta = 0.001$.

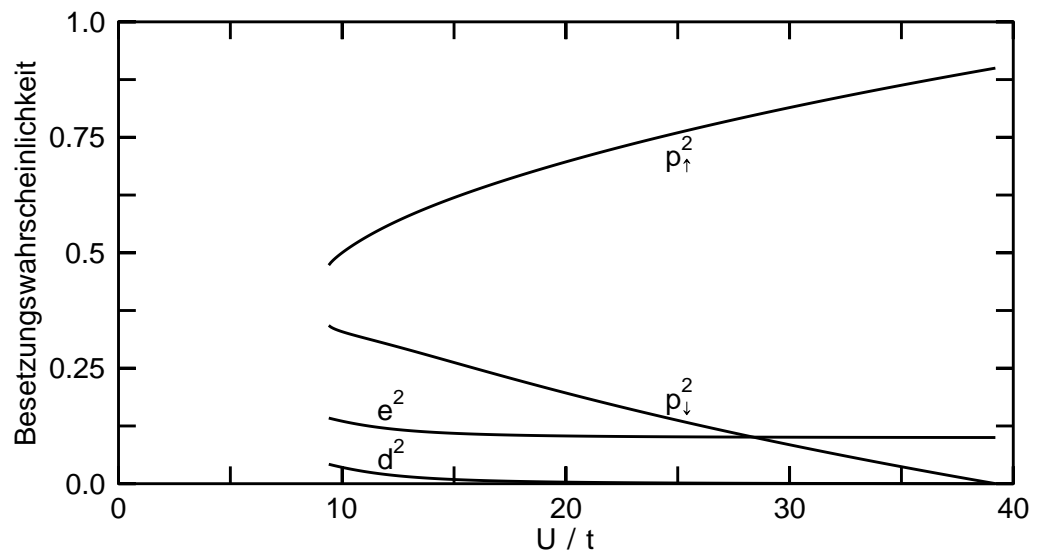


Abbildung 4.8: Quadrate der Bosefelder im zweidimensionalen ferromagnetischen Fall für $\delta = 0.1$.

Wie die Abbildungen 4.7 und 4.8 zeigen, verhalten sich die e - und d -Bosonen im ferromagnetischen Fall in etwa so wie im paramagnetischen. Die Besetzungswahrscheinlichkeit der p_σ -Bosonen ist hingegen durch die Trennung der beiden Spinrichtungen auf Grund der magnetischen Ordnung gegenüber den unmagnetischen Lösungen modifiziert. Für Dotierungen nahe der halben Bandfüllung erfolgt die Erhöhung des Anteils der Einfachbesetzungen zunächst einfach durch zusätzliche Besetzung des Majoritätsbandes (p_\uparrow), wobei die Besetzungswahrscheinlichkeit für p_\downarrow nahezu gleich bleibt. Mit Erreichen der kritischen Wechselwirkungsstärke für den Brinkman-Rice-Übergang, dessen Auswirkungen auch hier erkennbar sind, bleibt wie in Abbildung 4.1 die Besetzung der e - und d -Zustände praktisch auf dem jeweiligen Minimalwert, während das Majoritätsband auf Kosten des Minoritätsbandes weiter gefüllt wird. Mit Erreichen des zweiten kritischen Wertes von U/t ist, wie oben bereits erwähnt, das Minoritätsband vollständig entleert und das System vollständig magnetisiert. Da damit auch die Wirkung des Korrelationsterms im Hamilton-Operator entfällt, ergibt sich auch bei weiter steigender Coulombwechselwirkung keine Veränderung mehr im System. Für die größere Dotierung $\delta = 0.1$ beginnt die Existenz ferromagnetischer Lösungen erst in dem Bereich, wo sich im paramagnetischen Fall der Metall-Isolator-Übergang andeutet, so daß hier die Entleerung des Minoritätsbandes mit steigendem U/t sofort einsetzt.

Die Abbildungen 4.9 und 4.10 zeigen den Verlauf der Lagrangemultiplikatoren λ_σ für die ferromagnetischen Lösungen bei den betrachteten Dotierungen. Auf die Auftragung des Lagrangemultiplikators λ' wurde verzichtet, da dessen Verhalten keine wesentliche Veränderung gegenüber dem unmagnetischen Fall zeigt und, wie bereits gesagt, seine physikalische Bedeutung unklar ist. Auch die aufgetragenen Lagrangemultiplikatoren λ_σ zeigen auf den ersten Blick kein wesentlich anderes Verhalten als ihre paramagnetischen Pendanten. Bemerkenswert ist jedoch die Aufspaltung zwischen den Kurven für

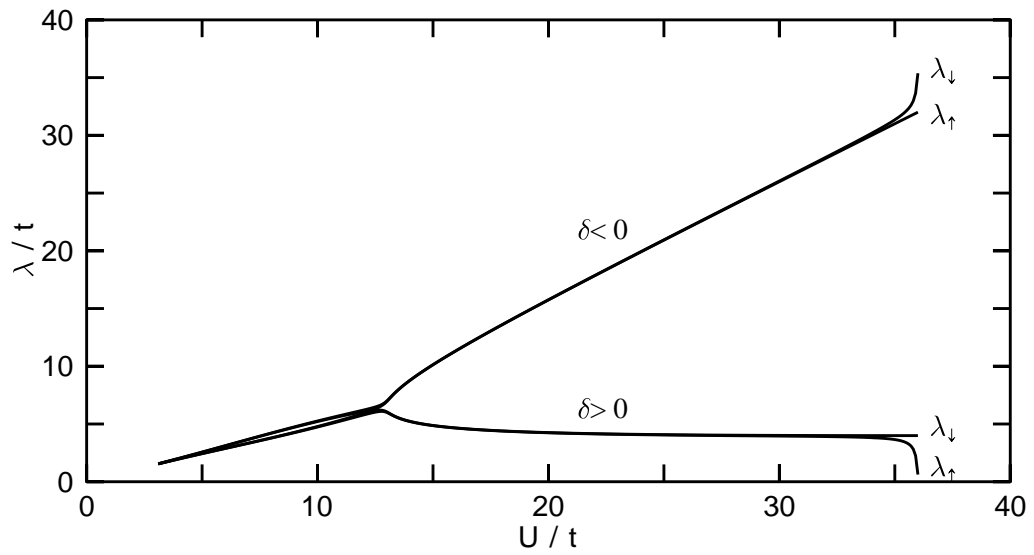


Abbildung 4.9: Lagrangemultiplikatoren im zweidimensionalen ferromagnetischen Fall für $\delta = \pm 0.001$.

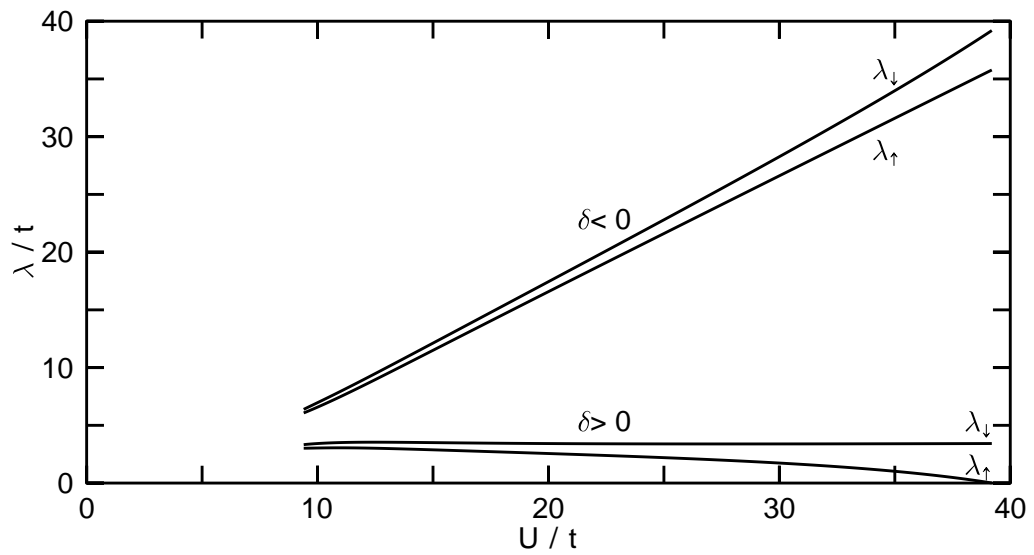


Abbildung 4.10: Lagrangemultiplikatoren im zweidimensionalen ferromagnetischen Fall für $\delta = \pm 0.1$.

die beiden Spinrichtungen. Als erstes sei wieder der Fall $\delta = 0.001$ betrachtet. Hier zeigt sich unterhalb des Metall-Isolator-Übergangs zunächst eine kleine Aufspaltung zwischen den Bändern (die Ergebnisse für Loch- und Elektronendotierung fallen in diesem Bereich wieder zusammen), die jedoch mit der Trennung zwischen Loch- und Elektronendotierung wieder verschwindet. Von da an ist die Verschiebung der Bandschwerpunkte für die beiden Spinrichtungen mit steigendem U/t nur sehr gering, bis die Bänder kurz vor dem Erreichen des voll polarisierten Zustands plötzlich schnell auseinanderwandern. Im stärker dotierten Fall zeigt sich ähnlich dem Verhalten der Bosefelder keine Andeutung eines Metall-Isolator-Übergangs mehr. Die Aufspaltung der Lagrangemultiplikatoren für Majoritäts- und Minoritätsband erfolgt hier stetig über den gesamten erfaßten Bereich und zeigt auch keinen rasanten Anstieg vor dem Übergang in den voll magnetisierten Zustand.

Um zu einem tieferen Verständnis der gefundenen ferromagnetischen Lösungen zu gelangen, müssen natürlich auch die Renormierungsfaktoren q_σ der Teilbänder betrachtet werden. Diese sind in den Abbildungen 4.11 und 4.12 dargestellt. Das Verhalten bei schwacher Dotierung ist für kleine Wechselwirkungsstärken wieder dem im paramagnetischen Fall ähnlich. In diesem Bereich zeigt sich kein Unterschied in der Renormierung für die beiden Spinrichtungen. Erst nach Überschreitung des kritischen U/t -Wertes weichen die Kurven voneinander ab. Während die Bandbreite des Minoritätsbandes nahezu Null bleibt, gewinnen die Elektronen im Majoritätsband wieder an Beweglichkeit, wie der Anstieg von q_\uparrow zeigt. Kurz vor Erreichen der vollständigen Polarisation des Systems nimmt auch hier die Abweichung zwischen den Spinrichtungen rapide zu. Analog den bisher schon betrachteten Größen driften

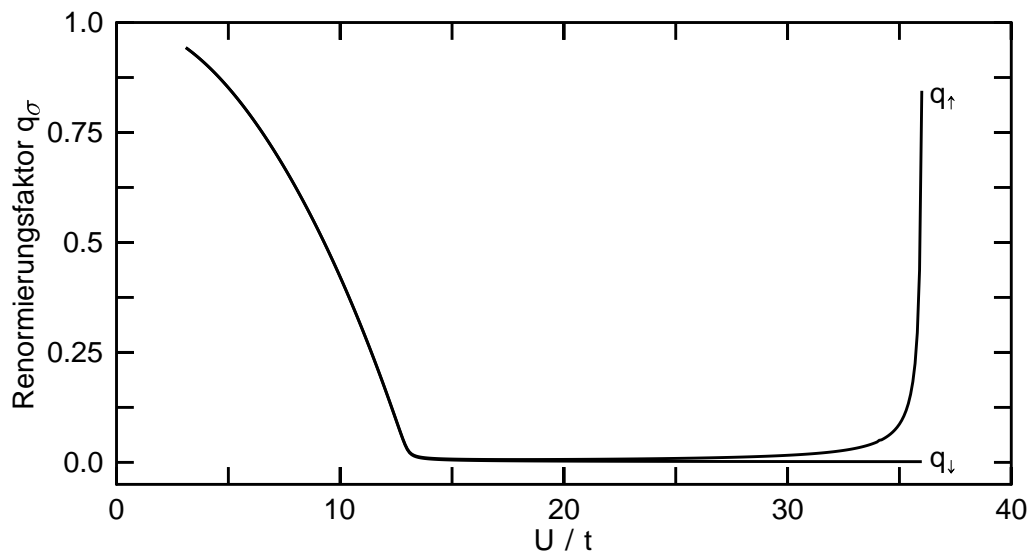


Abbildung 4.11: Renormierungsfaktoren q_σ im zweidimensionalen ferromagnetischen Fall für $\delta = 0.001$.

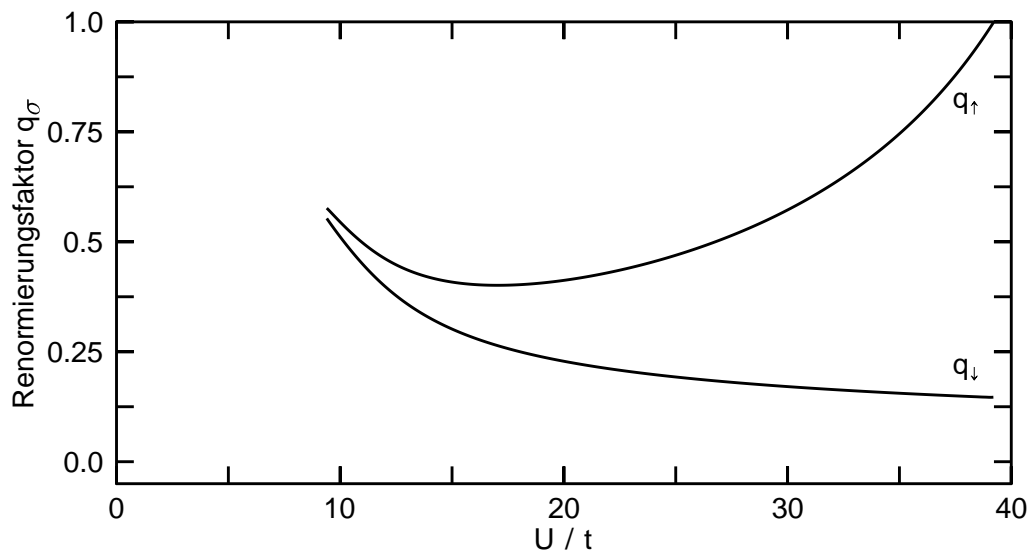


Abbildung 4.12: Renormierungsfaktoren q_σ im zweidimensionalen ferromagnetischen Fall für $\delta = 0.1$.

im Fall $\delta = 0.1$ die Kurven über den gesamten betrachteten Bereich hinweg auseinander, und von einem isolierenden Charakter des Systems kann keine Rede mehr sein.

Faßt man die Beobachtungen aus dem Verhalten der Lagrangemultiplikatoren und der Renormierungsfaktoren zusammen, so kann festgestellt werden, daß die aus dem Verhalten der Bosefelder ersichtliche zunehmende Magnetisierung des Systems bei steigendem U/t durch zwei Mechanismen getrieben wird und für kleine Dotierungen in drei Phasen eingeteilt werden kann. Im Bereich kleiner Coulombwechselwirkungen bis nahe an den Brinkman-Rice-Übergang heran erfolgt die Umverteilung der Elektronen einzig und allein durch eine Verschiebung der Teilbänder gegeneinander. Im Bereich um den Brinkman-Rice-Übergang herum wandern die Bänder wieder zusammen, die Magnetisierung wird jedoch durch eine unterschiedliche Breite der Bänder aufrechterhalten und für höhere Wechselwirkungsstärken weiter vergrößert. In der Nähe des Übergangs zur voll polarisierten Lösung erfolgt die Erhöhung der Magnetisierung dann gemeinsam durch Verschiebung der Bänder und durch unterschiedliche Renormierung.

Das Verhalten der Magnetisierung für die gefundenen ferromagnetischen Lösungen soll nun noch aus einer anderen Sicht betrachtet werden. Dazu ist in Abbildung 4.13 die Magnetisierung als Funktion der Dotierung für verschiedene Wechselwirkungsstärken aufgetragen. Zunächst erkennt man, daß der Bereich, in dem ferromagnetische Lösungen gefunden wurden, bezüglich der Dotierung nach oben hin beschränkt ist, wobei der Bereich mit wachsender Coulombwechselwirkung immer breiter wird. Weiterhin zeigt die Darstellung, daß, beginnend bei halber Bandfüllung, die Magnetisierung mit steigender Dotierung abnimmt. Zunächst geschieht dieser Abfall linear und ist wohl hauptsächlich durch die Erniedrigung der verfügbaren Teilchenzahl gegeben. Für den Fall der Elektronendotierung zeigt sich das gleiche Verhalten, da hier durch das unvermeidbare Mindestmaß an Gitterplatzdoppelbesetzungen

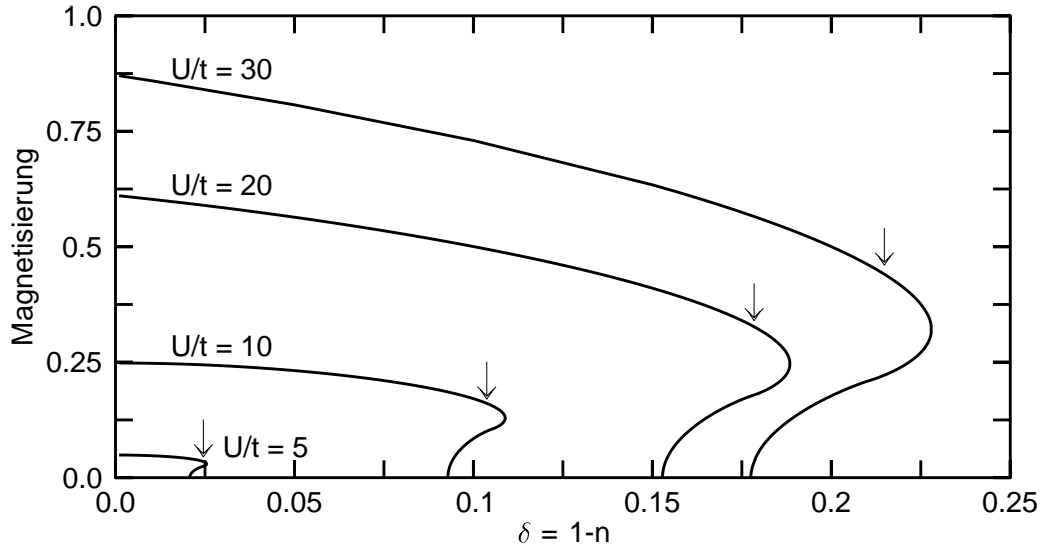


Abbildung 4.13: Magnetisierung im zweidimensionalen ferromagnetischen Fall für verschiedene Werte von U/t .

ebenfalls die Zahl der an der magnetischen Ordnung teilnehmenden Teilchen erniedrigt wird. Mit weiter steigender Dotierung ändert sich jedoch das Verhalten der Magnetisierungskurven. Nachdem sie zunächst immer schneller abfallen, durchlaufen sie eine senkrechte Wendetangente und führen wieder zu niedrigeren Dotierungen zurück. Dieses Verhalten ist charakteristisch für einen Phasenübergang erster Ordnung. Ein Vergleich der aus den Lösungen berechneten freien Energien mit denen der korrespondierenden paramagnetischen Lösungen zeigt dann auch die Existenz eines solchen Phasenübergangs. Die in Abbildung 4.13 eingetragenen Pfeile markieren jeweils den Einsatz des Phasenübergangs. Dieses Ergebnis ist einigermaßen überraschend, da bislang allgemein angenommen wurde, daß der Phasenübergang zwischen Ferro- und Paramagnetismus im Hubbardmodell, wenn er überhaupt existiert, von zweiter Ordnung sei. Auf Grund dieser Annahme wurde in vielen Arbeiten, so auch von Kotliar und Ruckenstein in [7], die Phasengrenzlinie durch Aufsuchen der Divergenz der statischen magnetischen Suszeptibilität ermittelt. Die Punkte für diese Divergenz findet man natürlich in Abbildung 4.13 bei den

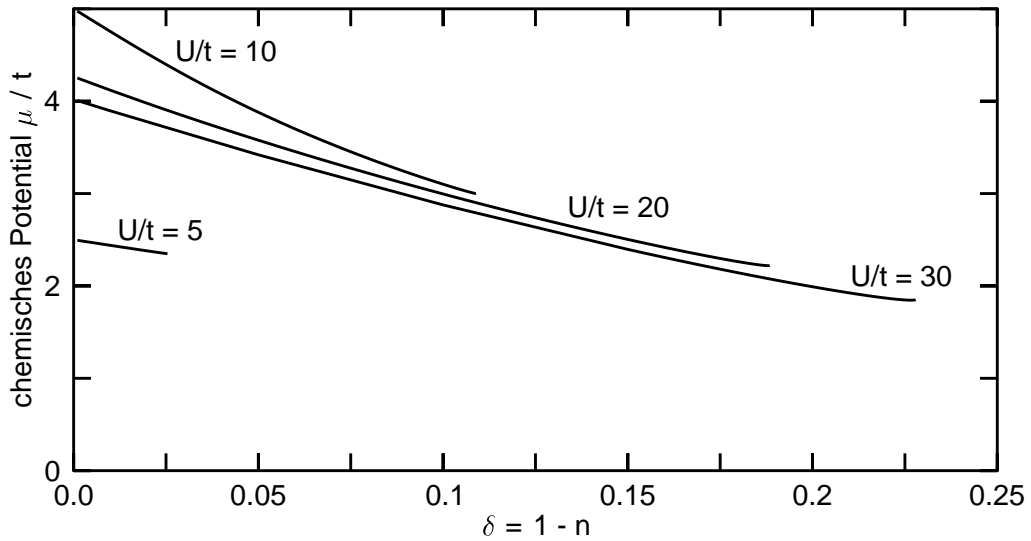


Abbildung 4.14: Chemisches Potential μ im zweidimensionalen ferromagnetischen Fall für verschiedene Werte von U/t .

Nulldurchgängen der Magnetisierungskurven. Somit zeigt Abbildung 4.13, daß ein aus der Suszeptibilität bestimmter ferromagnetischer Bereich eines Phasendiagramms zu klein ist.

Letztlich zeigt Abbildung 4.14 das chemische Potential der gefundenen Lösungen in Abhängigkeit von der Dotierung. Wie im paramagnetischen Fall ergeben sich hieraus keine Hinweise auf eine mögliche Instabilität der ferromagnetischen Lösungen. Die merkwürdige Reihenfolge der Kurven läßt sich mit dem Verhalten des Lagrangemultiplikators λ erklären, welches zeigt, daß sich unterhalb des Brinkmann-Rice-Übergangs die Bänder zunächst nach oben verschieben, dann jedoch wieder absinken.

4.1.3 Antiferromagnetische Lösungen

Die erhaltenen Ergebnisse für die antiferromagnetische Phase unterscheiden sich in ihren Strukturen grundlegend von denen der bislang betrachteten Zustände. Wie die paramagnetische Phase wurde auch der antiferromagnetische Fall bereits von anderen Autoren untersucht, und man findet z.B. bei

Lilly [15] einen guten Vergleich der Ergebnisse der Hilfsbosonenmethode mit Sattelpunktsnäherung zu Quanten-Monte-Carlo-Rechnungen.

In den Abbildungen 4.15 und 4.16 sind zunächst wieder die Besetzungswahrscheinlichkeiten der Hilfsbosonenzustände für zwei Dotierungen aufgetragen. Für die größere Dotierung wurde hier ein anderer Wert ($\delta = 0.175$) als bisher gewählt, da sich erstens die Ergebnisse nicht direkt mit den oben angegebenen vergleichen lassen und zweitens die Dotierung $\delta = 0.1$ im antiferromagnetischen Fall nicht die volle Charakteristik der Lösungen mit hoher Dotierung aufweist. Man erkennt in beiden Graphiken wieder den parallelen Abfall der Besetzungen von e - und d -Zuständen mit steigendem U/t . Jedoch auch bei der kleinen Dotierung $\delta = 0.001$ fehlt jegliche Andeutung eines Metall-Isolator-Übergangs. Im Fall nahezu halber Bandfüllung beginnt der Bereich antiferromagnetischer Lösungen nahezu bei $U/t = 0$, und die p_σ -Besetzungswahrscheinlichkeiten spalten von Anfang an gleichmäßig auf, d.h. die Wahrscheinlichkeit für p_\uparrow -Zustände steigt kontinuierlich und nähert sich ihrem Maximalwert, während die p_\downarrow -Wahrscheinlichkeit stetig absinkt und gegen Null geht. Im hochdotierten Fall ist das Verhalten anders. Hier beginnt der Bereich antiferromagnetischer Lösungen erst bei $U/t \approx 5$. Von da an zeigt sich zunächst ein ähnliches Verhalten wie im schwachdotierten Fall, bis bei $U/t \approx 10$ die Aufspaltung zwischen den Besetzungswahrscheinlichkeiten der p_σ -Zustände (und damit die Untergittermagnetisierung) ein Maximum durchläuft und von da an wieder absinkt. Bei $U/t \approx 30$ verschwindet dann die Magnetisierung der Untergitter völlig, und die antiferromagnetische Lösung geht wieder stetig in die paramagnetische über.

Das in den Abbildungen 4.17 und 4.18 vorgestellte Verhalten der Lagrangemultiplikatoren λ' und λ zeigt ebenfalls grundsätzliche Unterschiede des Verhaltens im schwach und im stark dotierten Fall. Während bei $\delta = 0.001$ der Multiplikator λ einfach stetig und ungefähr linear mit Steigung $U/2t$ ansteigt, ergibt sich im stärker dotierten Fall wieder ein Maximum bei

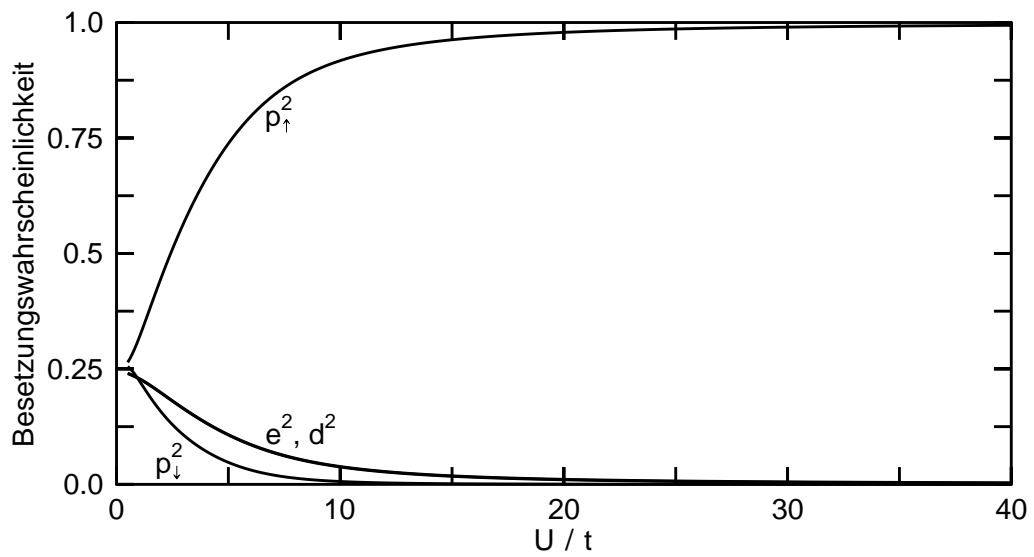


Abbildung 4.15: Quadrate der Bosefelder im zweidimensionalen antiferromagnetischen Fall für $\delta = 0.001$.

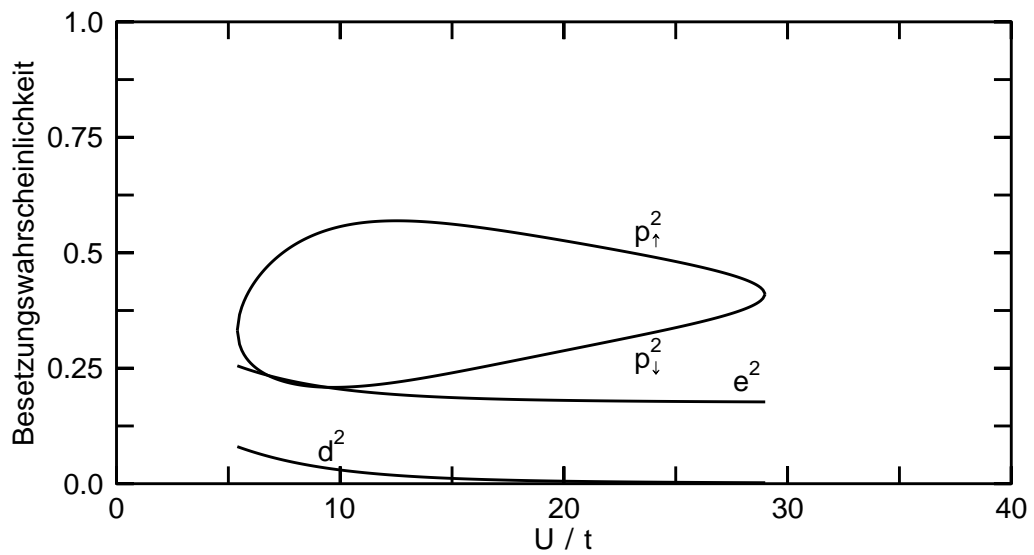


Abbildung 4.16: Quadrate der Bosefelder im zweidimensionalen antiferromagnetischen Fall für $\delta = 0.175$.

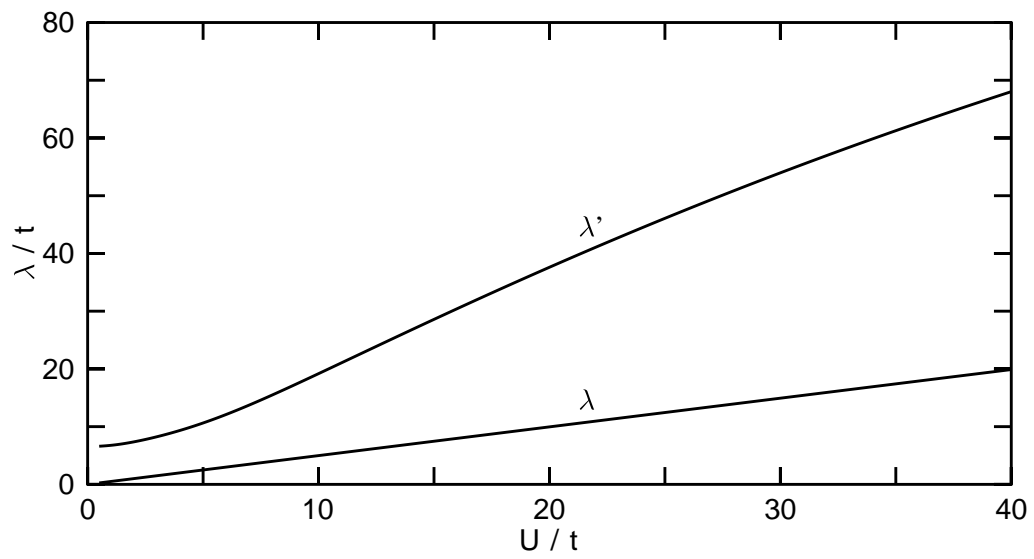


Abbildung 4.17: Lagrangemultiplikatoren im zweidimensionalen antiferromagnetischen Fall für $\delta = 0.001$.

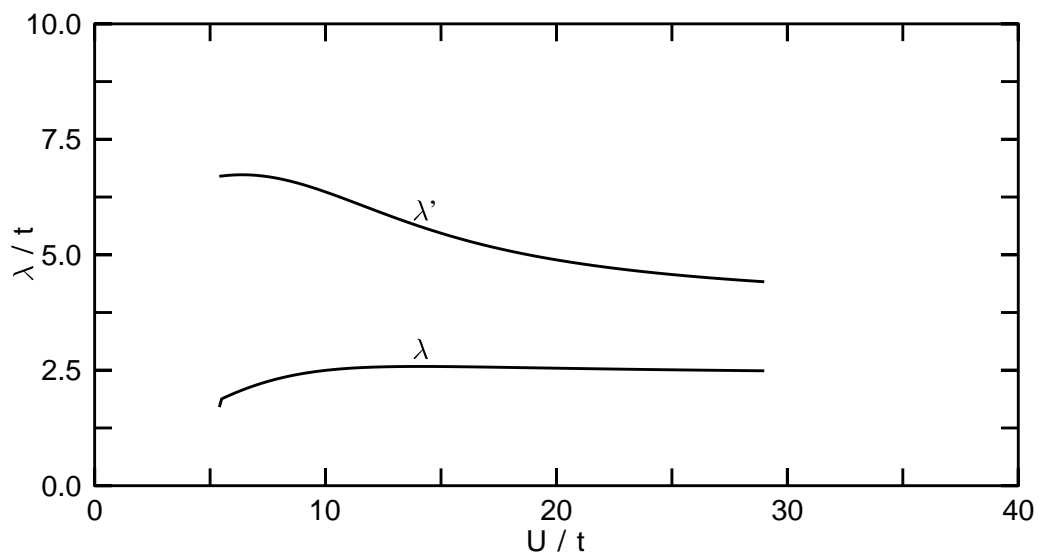


Abbildung 4.18: Lagrangemultiplikatoren im zweidimensionalen antiferromagnetischen Fall für $\delta = 0.175$.

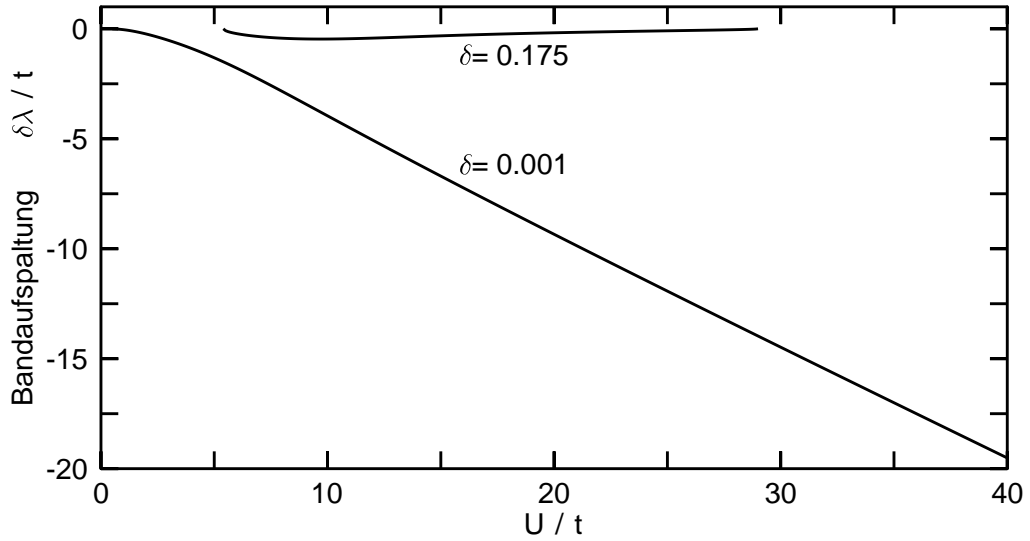


Abbildung 4.19: Bandaufspaltung $\delta\lambda$ im zweidimensionalen antiferromagnetischen Fall für verschiedene Dotierungen.

$U/t \approx 10$. Natürlich ergibt sich aus den bislang vorgestellten Auftragungen kein Hinweis darauf, daß nicht auch im schwachdotierten Fall bei höheren Wechselwirkungsstärken ein ähnliches Verhalten wie bei $\delta = 0.175$ einsetzt. Daß dies wohl nicht der Fall ist, wird weiter unten bei der Diskussion des Phasendiagramms des Hubbardmodells erläutert. Da die Bedeutung des Lagrangemultiplikators λ' auch hier unklar ist, wird auf eine Diskussion seines Verhaltens verzichtet.

Während der Lagrangemultiplikator λ im antiferromagnetischen Fall wie im paramagnetischen die Verschiebung der effektiven Bandstruktur gegenüber der unkorrelierten angibt, gibt die Größe $\delta\lambda$ die Aufspaltung der beiden Teilbänder an (vgl. Gleichung (3.36)). Ihr Verlauf wird in Abbildung 4.19 gezeigt. Das negative Vorzeichen von $\delta\lambda$ ist im Prinzip ohne Bedeutung, da es nur mit der willkürlich gewählten Richtung der Untergittermagnetisierungen korrespondiert. Auch $\delta\lambda$ zeigt bei schwacher Dotierung einen stetigen Anstieg (dem Betrag nach) und ein Maximum bei $U/t \approx 10$ im Fall $\delta = 0.175$.

Ein überraschendes Verhalten zeigen die in Abbildung 4.20 gezeigten Re-

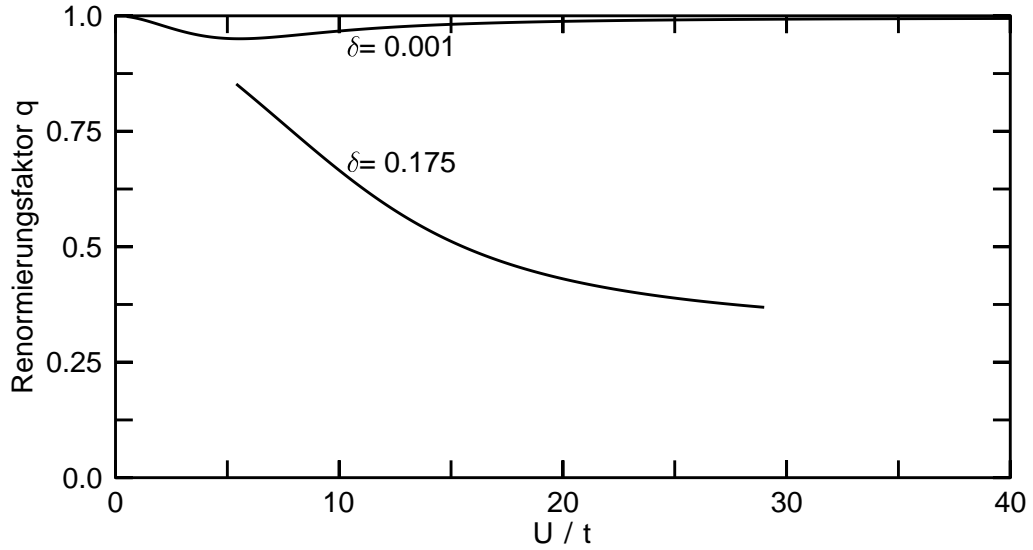


Abbildung 4.20: Renormierungsfaktor q im zweidimensionalen antiferromagnetischen Fall für verschiedene Dotierungen.

normierungsfaktoren q der effektiven Bandstruktur im antiferromagnetischen Fall. Für den starkdotierten Fall ergibt sich noch ein ähnliches Bild wie im paramagnetischen Fall, d.h. eine mit steigendem U/t monoton zunehmende Verschmälerung der Bänder. Im schwachdotierten Fall hingegen nimmt der Renormierungsfaktor zwar, beginnend mit kleinem U/t , zunächst ein wenig ab, beginnt aber ab $U/t \approx 5$ wieder zu steigen und nähert sich rasch wieder dem Wert Eins. Dieses zunächst merkwürdige Verhalten hat seinen Grund in der effektiven Bandstruktur (3.36). Analysiert man diese genauer, so stellt man fest, daß die Breite der beiden Teilbänder hier nicht mehr allein durch q bestimmt ist, sondern auch durch die Bandaufspaltung $\delta\lambda$. Ruft man sich nun den starken Anstieg dieser Größe bei steigendem U/t (vgl. Abbildung 4.19) im Fall kleiner Dotierung in Erinnerung, so sieht man, daß auch im antiferromagnetischen Fall die effektiven Teilbänder sehr schmal werden.

Die in Abbildung 4.21 gezeigte Untergittermagnetisierung der antiferromagnetischen Lösungen in Abhängigkeit von δ bestätigt im wesentlichen die bereits gemachten Beobachtungen. Nach einem zunächst linearen Abfall

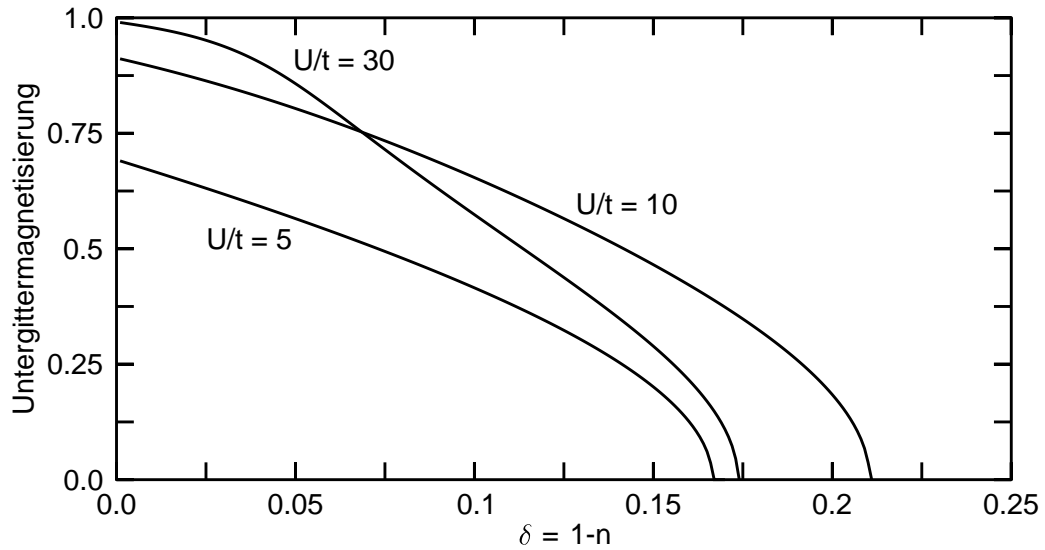


Abbildung 4.21: Untergittermagnetisierung im zweidimensionalen antiferromagnetischen Fall für verschiedene Werte von U/t .

der Magnetisierung in der Nähe halber Bandfüllung, der wohl wie im ferromagnetischen Fall auf die Verringerung der verfügbaren Teilchenzahl zurückzuführen ist, sinkt die Magnetisierung mit zunehmender Geschwindigkeit auf Null ab. Es ergeben sich keinerlei Anzeichen für einen Phasenübergang erster Ordnung. Auffallend ist noch, daß die Breite des antiferromagnetischen Bereiches nach einem Anstieg zwischen $U/t = 5$ und $U/t = 10$ zu $U/t = 30$ hin wieder abnimmt. Dies wird ebenfalls weiter unten anhand des Phasendiagramms diskutiert werden.

Die Auftragung 4.22 des chemischen Potentials in Abhängigkeit der Dotierung bringt nun eine Enttäuschung. Sie zeigt, daß die gefundenen Lösungen für den antiferromagnetischen Fall in weiten Bereichen thermodynamisch nicht stabil sein können. Nur bei der höchsten eingezeichneten Wechselwirkungsstärke ist überhaupt ein Bereich möglicher Stabilität zu sehen. Dies hat natürlich große Auswirkungen auf die Bewertung der erhaltenen Lösungen. Auf die Instabilität der antiferromagnetischen Zustände bei Dotierungen ungleich Null wurde allerdings bereits in [16] hingewiesen.

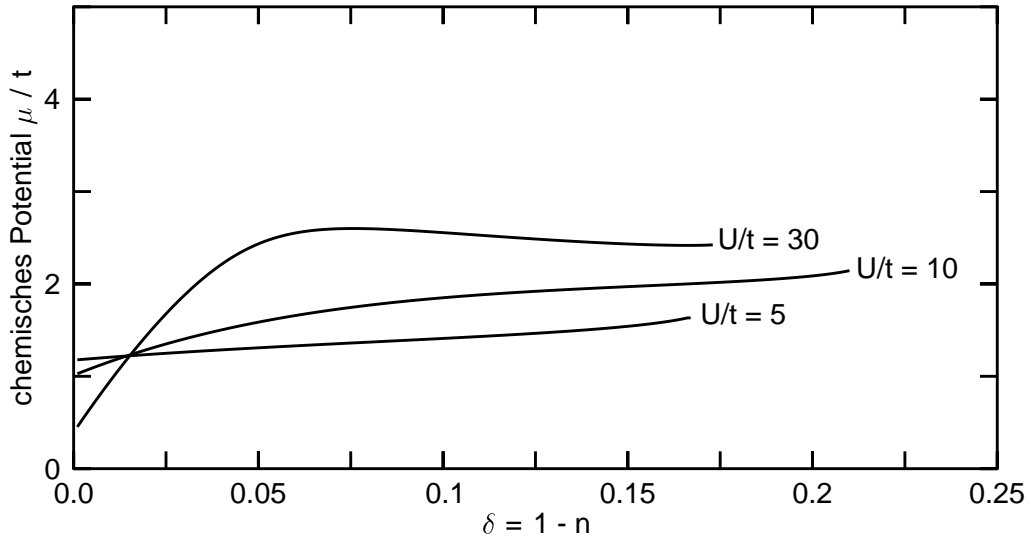


Abbildung 4.22: Chemisches Potential μ im zweidimensionalen antiferromagnetischen Fall für verschiedene Werte von U/t .

4.1.4 Das magnetische Phasendiagramm

Abbildung 4.23 zeigt das magnetische Phasendiagramm, das aus den berechneten Lösungen durch Vergleich der zugehörigen freien Energien gewonnen wurde. Die durchgezogenen dicken Linien markieren die tatsächlichen Grenzen zwischen der paramagnetischen (P), der ferromagnetischen (F) und der antiferromagnetischen (AF) Phase, während die gepunkteten die Fortsetzungen der Grenzen zwischen Ferro- und Paramagnetismus bzw. Antiferro- und Paramagnetismus in die jeweilige dritte Phase markieren. Die dünnere gestrichelte Linie begrenzt den Bereich, in dem ferromagnetische Lösungen gefunden wurden (vgl. Abbildung 4.13). Der Übergang der ferromagnetischen Lösungen in den voll polarisierten Zustand (FSP) ist durch die dicke gestrichelte Linie gegeben. Letztlich sind noch die Grenzwerte der Phasengrenzen für $U/t \rightarrow \infty$ eingetragen. Dabei bezeichnet der Stern die Grenze zwischen Antiferromagnetismus und Paramagnetismus, während das Kreuz den Grenzwert für Ferro- und Paramagnetismus andeutet. Die Grenze zwischen Ferro- und Antiferromagnetismus wandert für $U/t \rightarrow \infty$ auf die Achse $\delta = 0$. Die

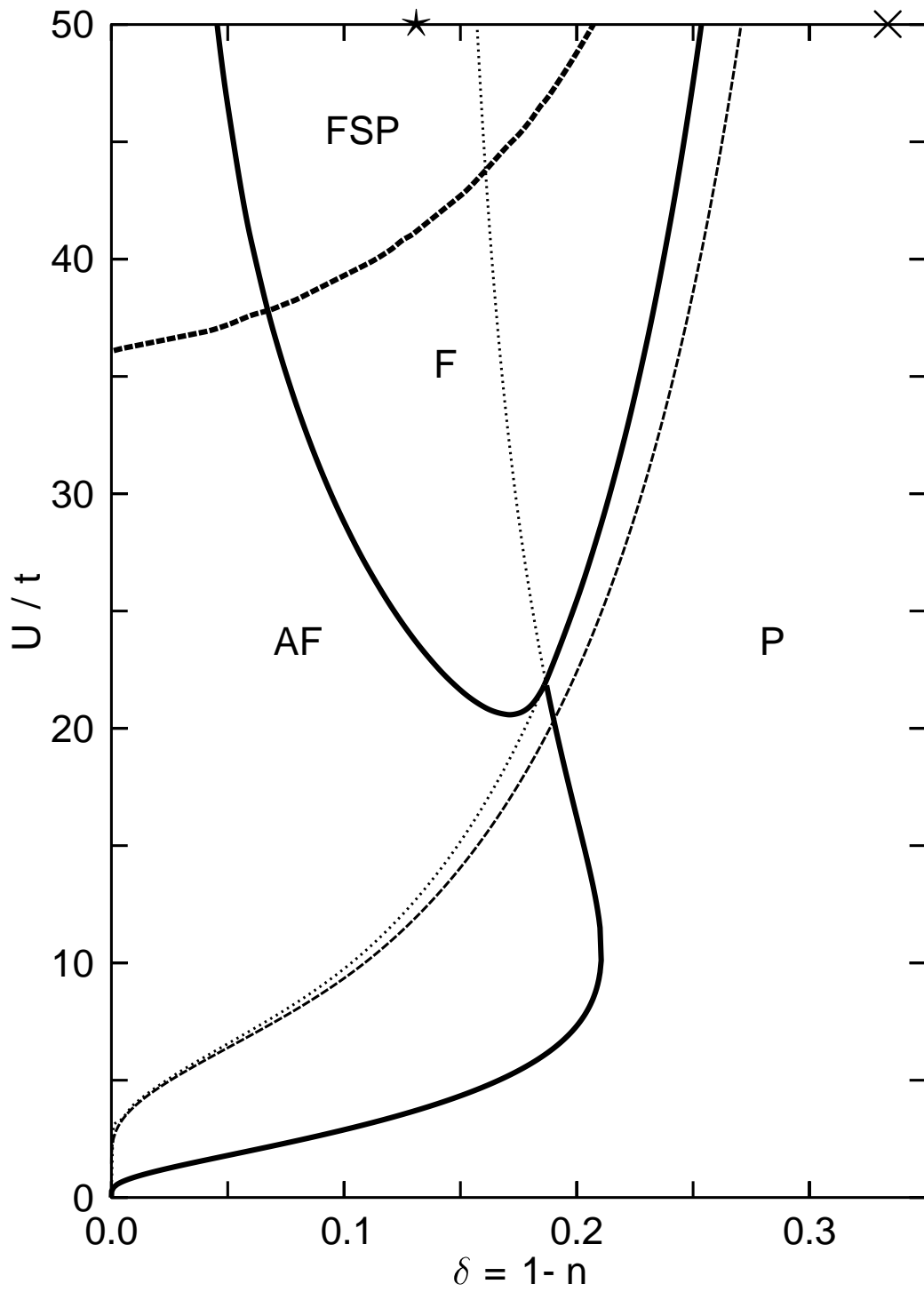


Abbildung 4.23: Magnetisches Phasendiagramm für den zweidimensionalen Fall.

Ermittlung dieser Grenzen geschah durch Nullsetzen von d und Weglassen des Terms Ud in den Sattelpunktgleichungssystemen. Es konnten allerdings nur in den Fällen Paramagnetismus und Antiferromagnetismus Lösungen der sich ergebenden Gleichungssysteme gefunden werden. Im ferromagnetischen Fall scheint es für $U \rightarrow \infty$ im Rahmen der Sattelpunktsbehandlung nur noch die voll polarisierte Lösung zu geben, die dann auch für den Vergleich verwendet wurde. Diese Untersuchungen bei unendlicher Coulombwechselwirkung sind auch der Grund für die im letzten Unterabschnitt aufgestellte Behauptung, im antiferromagnetischen Fall mit nahezu halber Bandfüllung ergäbe sich keine wesentliche Verhaltensänderung der Lösungen oberhalb des aufgezeichneten Bereichs der Wechselwirkungsstärke. Ginge nämlich auch für schwache Dotierungen die Untergittermagnetisierung mit steigendem U/t wieder auf Null, so sollte im Grenzfall $U/t \rightarrow \infty$ der antiferromagnetische Bereich die Breite Null besitzen. Es kann und soll allerdings nicht ausgeschlossen werden, daß für Dotierungen ungleich Null und hohe Wechselwirkungsstärken die Untergittermagnetisierung wieder abnimmt.

Das Phasendiagramm zeigt, daß sich um die Achse $\delta = 0$ herum für alle Stärken der Coulombwechselwirkung ein antiferromagnetischer Bereich ergibt. Dessen Breite beginnt bei Null im unkorrelierten Fall und nimmt bis $U/t \approx 10$ kontinuierlich zu. Oberhalb dieser Wechselwirkungsstärke wird der Bereich wieder schmaler (wie schon bei der Betrachtung der Abbildung, 4.21 festgestellt, aber nicht diskutiert wurde), wobei der als stabil gegenüber den anderen Phasen ermittelte Bereich für steigende Wechselwirkungsstärken gegen Null geht, der Bereich existierender Lösungen hingegen die durch den Stern gegebene Grenzbreite nicht unterschreitet. Die Verbreiterung der antiferromagnetischen Phase bei kleinen Wechselwirkungsstärken ist leicht zu verstehen. Für $\delta = 0$ läßt sich analytisch zeigen, daß der Grundzustand antiferromagnetisch ist. Diese Ordnung wird jedoch durch die Dotierung zusätzlicher Teilchen im unkorrelierten Fall zerstört. Für die Aufrechterhaltung der

magnetischen Ordnung ist Energie notwendig, die durch die Coulombwechselwirkung geliefert werden kann. Daher kann mit zunehmender Coulombwechselwirkung ein immer breiterer Bereich antiferromagnetisch stabilisiert werden. Es bleibt zu klären, wieso sich dieser Bereich trotzdem oberhalb des kritischen Wertes $U/t \approx 10$ wieder verschmälert. Hierfür muß das Verhalten der paramagnetischen Phase berücksichtigt werden. Diese ist zunächst für kleine Elektronenzahlen leichter zu stabilisieren, da es dann wegen der geringeren statistischen Wahrscheinlichkeit für Doppelbesetzungen geringere Abweichungen vom unkorrelierten System gibt. Betrachtet man nun den Renormierungsfaktor q der paramagnetischen Lösungen in Abbildung 4.5, so sieht man, daß es im Bereich des hier untersuchten kritischen Wertes von U/t , der in etwa mit der Brinkman-Rice-Grenze zusammenfällt, zu einer starken Lokalisation der Elektronen kommt. Dies bedeutet, daß zumindest für kleine Dotierungen erst eine gewisse Mindestwechselwirkungsstärke erreicht sein muß, um die Elektronen zu lokalisieren. Somit ergibt sich für kleine Dotierungen erst mit steigendem U/t ein Hang zum Paramagnetismus. Offenbar führt diese Veränderung in den paramagnetischen Lösungen bei höheren Stärken von U/t zu größerer Stabilität als der Antiferromagnetismus.

Um die ferromagnetische Phase gegenüber den beiden anderen zu stabilisieren, ist nach Abbildung 4.23 eine Mindeststärke der Coulombwechselwirkung von $U/t \approx 20$ notwendig. Oberhalb dieses Wertes gewinnt diese Phase jedoch rasch an Breite und drängt die antiferromagnetische Phase auf die Achse $\delta = 0$ zurück. Ferromagnetische Lösungen lassen sich allerdings, wie das Phasendiagramm zeigt, bis in den Punkt ($\delta = 0/U/t = 0$) hinein verfolgen. Dies steht im Gegensatz zu den Ergebnissen anderer Autoren (z.B. Kotliar und Ruckenstein [7]), die für schwache Coulombwechselwirkungen gar keine ferromagnetischen Lösungen angeben. Dies dürfte dadurch zu erklären sein, daß für die Ermittlung des Phasendiagramms oft nur Modellzustandsdichten anstelle von (2.6) verwendet wurden. Diese unterscheiden sich meist

gerade im Bereich der halben Bandfüllung von (2.6), wo diese eine logarithmische Singularität aufweist. Die dadurch verursachten Änderungen könnten die ferromagnetischen Lösungen gerade im Bereich um $\delta = 0$ herum natürlich beeinflussen. Weiterhin ergeben sich natürlich Unterschiede in der Größe des gefundenen ferromagnetischen Bereichs daraus, daß dieser hier mittels der freien Energie bestimmt wurde und nicht durch das Aufsuchen von Divergenzen in der Suszeptibilität.

Bei der vorstehenden Diskussion wurde ignoriert, daß Abbildung 4.22 die thermodynamische Instabilität der gefundenen antiferromagnetischen Phase beweist. Dies ist dadurch gerechtfertigt, daß zwar klar ist, daß in den als solchen gekennzeichneten Bereichen kein echter Antiferromagnetismus vorliegt, jedoch auch keine der anderen betrachteten Lösungen stabil ist, da deren freie Energie höher ist. In letzter Zeit kristallisiert sich heraus [16], daß in dem Bereich um die Achse $\delta = 0$ wahrscheinlich sogenannte Spiralzustände den Grundzustand bilden, bei denen sich die Magnetisierung von Gitterplatz zu Gitterplatz um einen festen Phasenwinkel dreht. Diese Zustände wurden in der vorliegenden Arbeit aber noch nicht untersucht.

4.2 Unendliche Raumdimension

Neben dem zweidimensionalen Fall wurden im Rahmen dieser Arbeit auch Lösungen der Sattelpunktgleichungen im Grenzfall unendlicher Raumdimension gesucht. In diesem Abschnitt sollen die erhaltenen Ergebnisse und insbesondere die Abweichungen von den Lösungen im zweidimensionalen Fall kurz vorgestellt werden.

4.2.1 Paramagnetische Lösungen

Die Abbildungen 4.24 und 4.25 zeigen die Besetzungswahrscheinlichkeiten der Hilfsbosonenzustände und die Lagrangemultiplikatoren λ' und λ für die Dotierung $\delta = 0.05$. Wie man sieht, ergeben sich hierbei kaum Unterschiede zu dem Verhalten der Lösungen für das zweidimensionale System, wenn man die veränderte Dotierung berücksichtigt. Die einzig wesentliche Änderung betrifft die Energieskala. Die vom Brinkman-Rice-Übergang herrührenden Veränderungen in den Kurvenverläufen finden nicht mehr bei $U/t \approx 13$ statt,

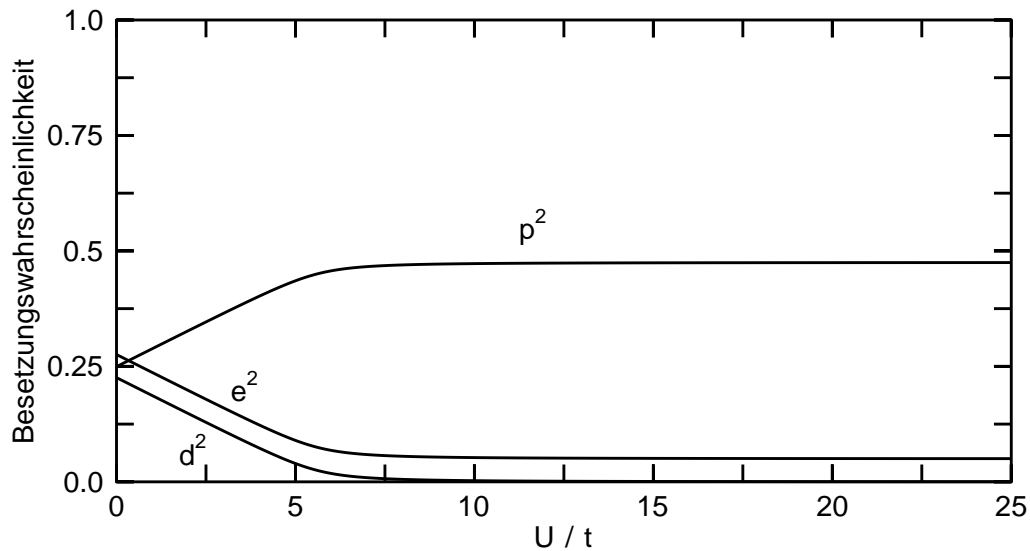


Abbildung 4.24: Quadrate der Bosefelder im paramagnetischen Fall und $D \rightarrow \infty$ für $\delta = 0.05$.

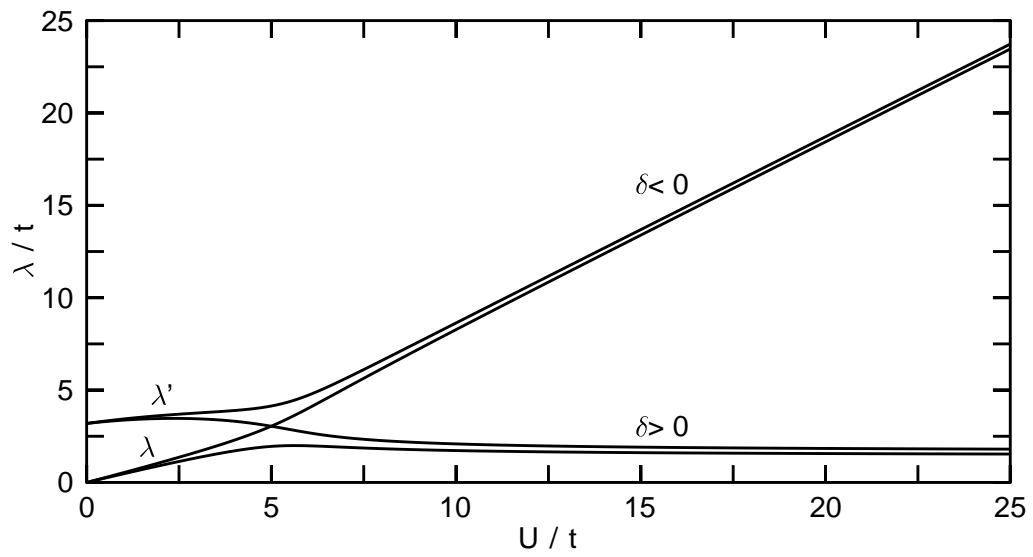


Abbildung 4.25: Lagrangemultiplikatoren im paramagnetischen Fall und $D \rightarrow \infty$ für $\delta = \pm 0.05$.

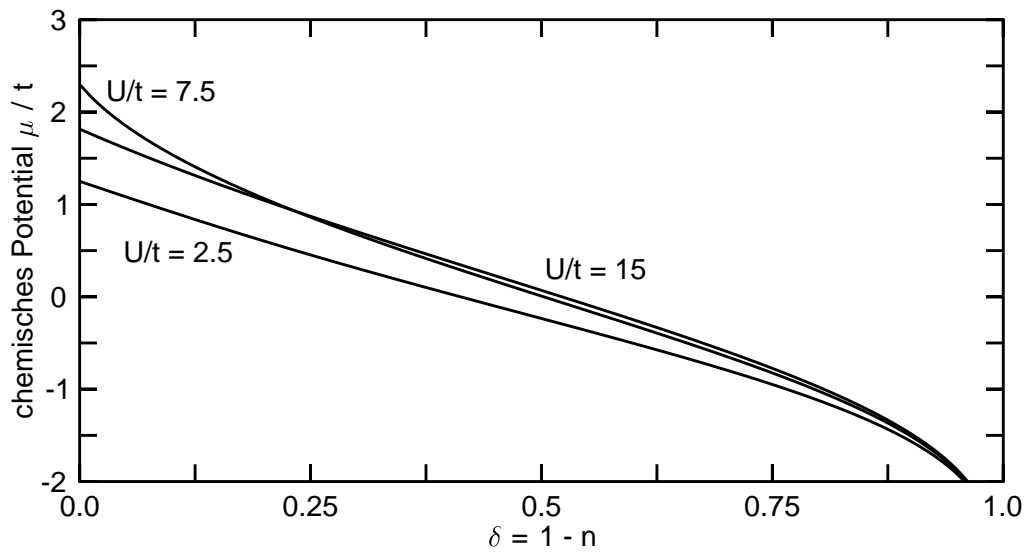


Abbildung 4.26: Chemisches Potential μ im paramagnetischen Fall und $D \rightarrow \infty$ für verschiedene Werte von U/t .

sondern bereits bei $U/t \approx 6$. Dies ist auf die Reskalierung des kinetischen Terms im Hamilton-Operator (2.7) zurückzuführen.

Das in Abbildung 4.26 wiedergegebene Verhalten des chemischen Potentials gibt wie in zwei Dimensionen keinen Hinweis auf eine thermodynamische Instabilität der paramagnetischen Lösungen. Der Verlauf der Kurven unterscheidet sich zwar von dem der Kurven in zwei Dimensionen, doch ist dies auf die unterschiedliche Form der Zustandsdichten zurückzuführen.

4.2.2 Ferromagnetische Lösungen

Für den ferromagnetischen Fall sind die Besetzungswahrscheinlichkeiten der Bosefelder bei der Dotierung $\delta = 0.05$ in Abbildung 4.27 aufgetragen. Hier erkennt man einige Veränderungen gegenüber dem zweidimensionalen Fall. Auch hier konnten für niedrige Werte von U/t keine ferromagnetischen Lösungen gefunden werden. Auffällig ist jedoch, daß trotz der noch moderaten Dotierung der ferromagnetische Bereich erst ein gutes Stück oberhalb des kritischen Wertes U/t des Metall-Isolator-Übergangs einsetzt. Der Abbruch

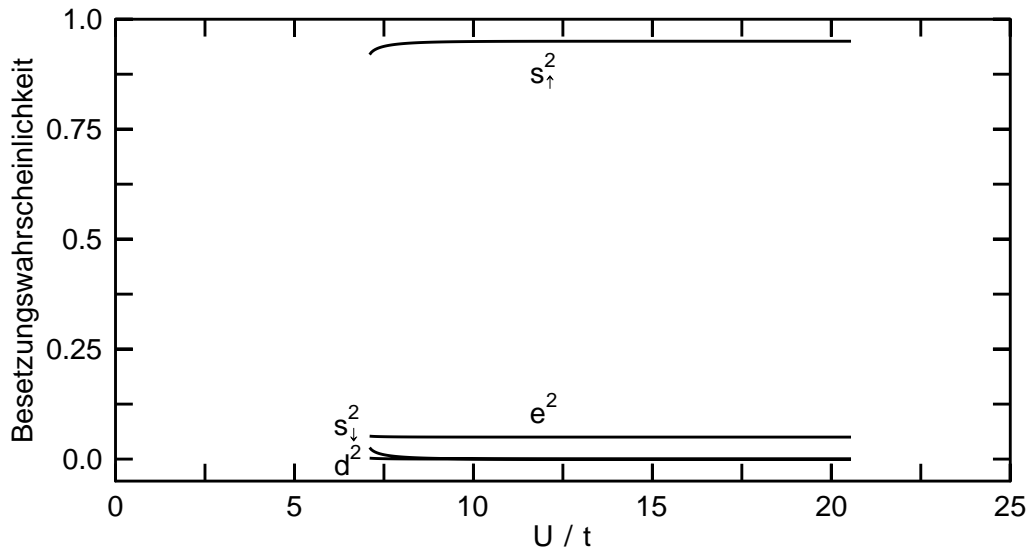


Abbildung 4.27: Quadrate der Bosefelder im ferromagnetischen Fall und $D \rightarrow \infty$ für $\delta = 0.05$.

der Kurven bei höheren Wechselwirkungsstärken darf nicht als ein Übergang in den voll polarisierten Zustand gedeutet werden. Dieser ist einem Argument von Fazekas et. al. [17] zufolge bei unendlicher Raumdimension für jedes endliche U/t instabil. Die Ergebnisse zeigen jedoch, daß er asymptotisch erreicht wird, und die sich daraus ergebenden numerischen Instabilitäten erzwingen bei niedrigen Dotierungen einen relative frühen Abbruch der Berechnungen. Weiterhin fällt in Abbildung 4.27 auf, daß die Magnetisierung von Anfang an sehr hoch ist und schnell gegen ihren Maximalwert geht.

Diese Beobachtungen werden durch die in Abbildung 4.28 aufgetragenen Lagrangemultiplikatoren unterstützt. Das prinzipielle Verhalten ist zwar dem im zweidimensionalen Fall sehr ähnlich, aber es zeigt sich von Anfang an eine starke Aufspaltung zwischen den Spinbändern, die wohl für die hohe Magnetisierung verantwortlich ist und sich im Verlauf der Kurven kaum ändert. Die Zacken an den Enden der Kurven sind auf den Einsatz derselben numerischen Instabilitäten zurückzuführen, die eine weitere Verfolgung der Lösungen zu höheren Wechselwirkungsstärken verhinderten.

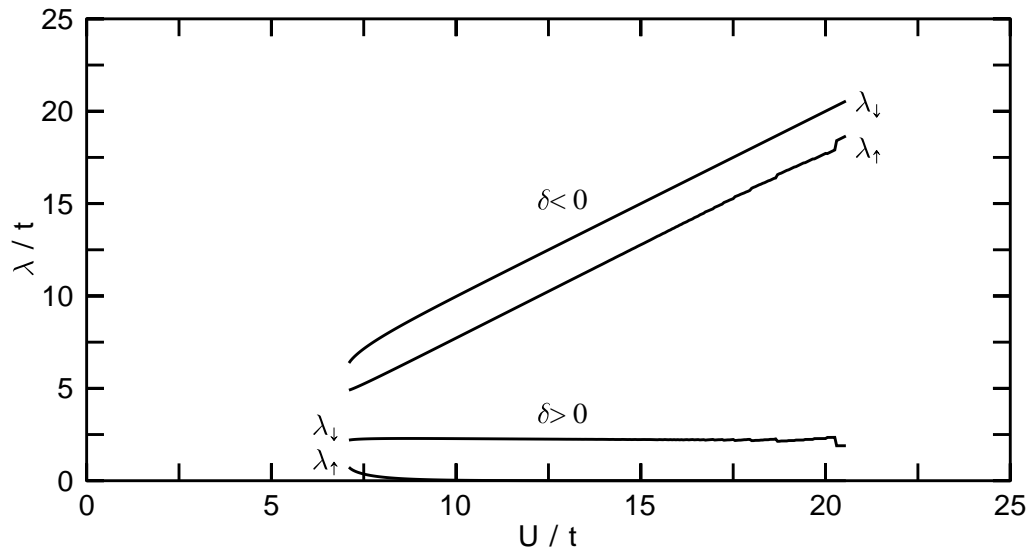


Abbildung 4.28: Lagrangemultiplikatoren im ferromagnetischen Fall und $D \rightarrow \infty$ für $\delta = \pm 0.05$.

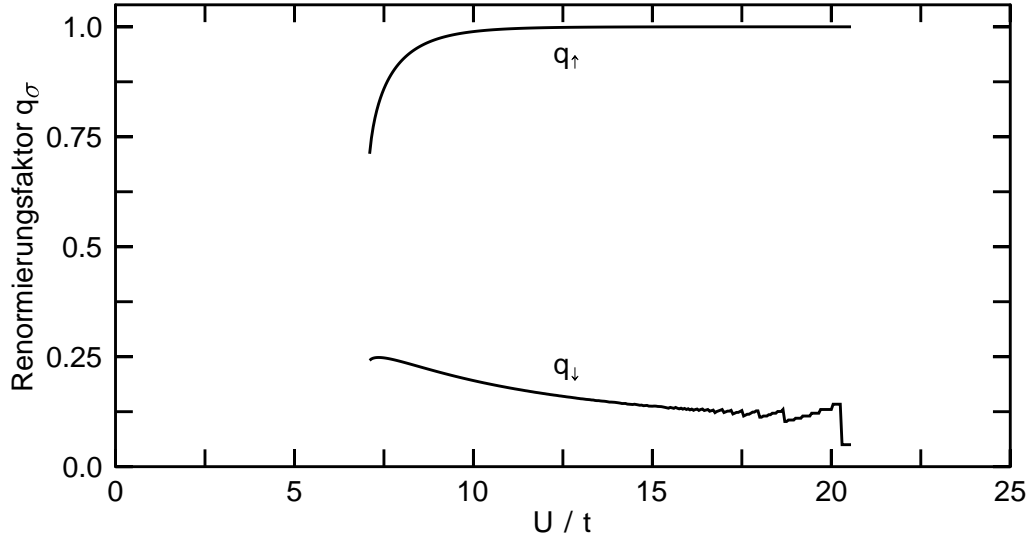


Abbildung 4.29: Renormierungsfaktoren q_σ im ferromagnetischen Fall und $D \rightarrow \infty$ für $\delta = 0.05$.

Diese Instabilitäten zeigen sich noch deutlicher in der Auftragung der Renormierungsfaktoren q_σ in Abbildung 4.29. Hier sind sie auch leicht zu verstehen. Durch die hohe Magnetisierung des Systems ist das Minoritätsband nahezu vollständig entleert. Da aber dessen Besetzung als Nenner im Ausdruck für q_\downarrow auftritt, wird hier nahezu durch Null dividiert, was den absoluten Fehler des ermittelten Wertes stark in die Höhe gehen läßt. Ansonsten verhält sich q_\downarrow bei unendlicher Raumdimension offenbar sehr ähnlich wie in zwei Raumdimensionen, d.h. die Renormierung des Minoritätsbandes nimmt kontinuierlich mit steigendem U/t zu. Das effektive Majoritätsband hingegen verhält sich anders als in zwei Dimensionen. Dort kommt es ebenfalls zunächst zu einem Abfall von q_\uparrow , dann zu einem langsamen Abfall, und erst kurz vor dem Erreichen des voll polarisierten Zustandes steigt q_\uparrow auf eins an. In Abbildung 4.29 steigt q_\uparrow anfangs rasch an und nähert sich dann schnell dem Wert Eins. Das ganze Verhalten kann zusammengefaßt werden in der Aussage, daß das System sich praktisch von Anfang an in der Nähe des voll polarisierten Zustands befindet, diesen jedoch bei endlichem U/t nicht

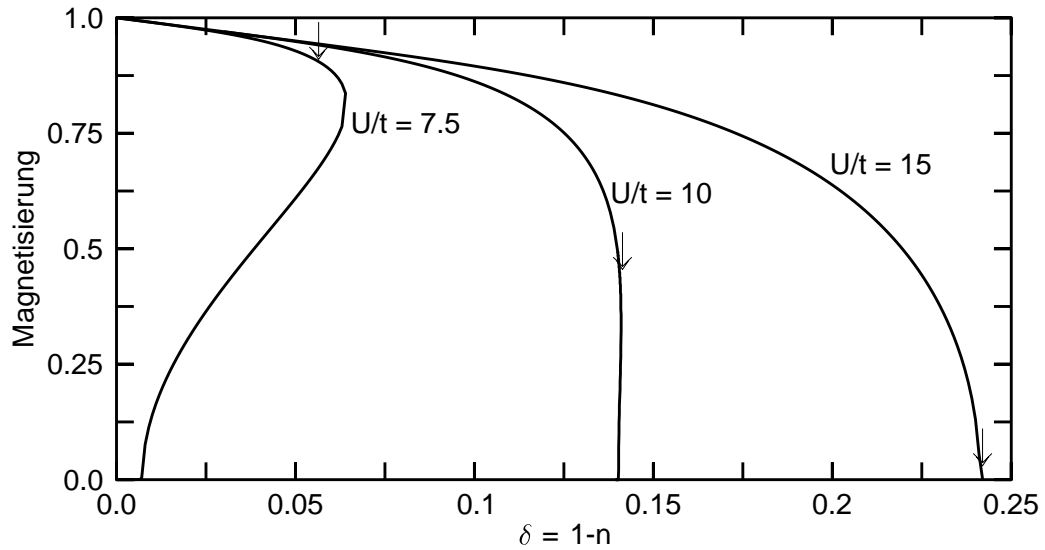


Abbildung 4.30: Magnetisierung im ferromagnetischen Fall und $D \rightarrow \infty$ für verschiedene Werte von U/t .

vollständig erreicht.

Dieses Verhalten schlägt sich auch in den in Abbildung 4.30 gezeigten Magnetisierungskurven nieder. Der auf einen Phasenübergang erster Ordnung hinweisende rückläufige Verlauf der Kurven ist zwar erhalten geblieben, der wieder durch Pfeile gekennzeichnete Phasenübergang setzt jedoch bei wesentlich höheren Magnetisierungen ein. Weiterhin ist der Bereich mit zwei ferromagnetischen Lösungen gegenüber dem Fall zweier Raumdimensionen stark verschmälert, bzw. bei höheren Wechselwirkungsstärken (etwa ab $U/t = 11.5$) numerisch nicht mehr nachweisbar.

Die Darstellung des chemischen Potentials (Abbildung 4.31) bestätigt die thermodynamische Stabilität der gefundenen Lösungen, wenn man von sehr kleinen Bereichen an den Enden der Kurven für $U/t = 7.5$ und $U/t = 10$ absieht. Die hier sichtbaren Anstiege können jedoch evt. auch durch numerische Fehler verursacht worden sein.

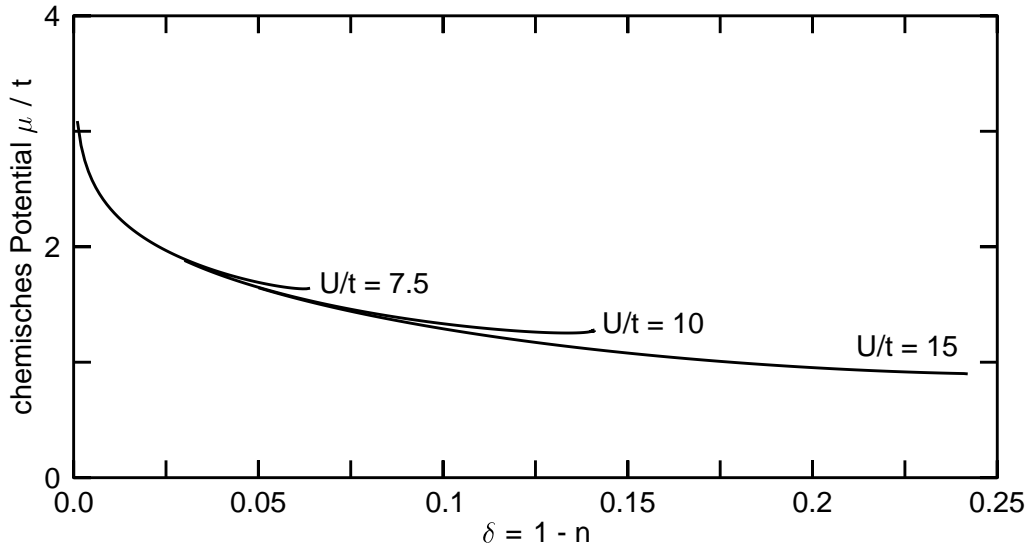


Abbildung 4.31: Chemisches Potential μ im ferromagnetischen Fall und $D \rightarrow \infty$ für verschiedene Werte von U/t .

4.2.3 Antiferromagnetische Lösungen

Die bei der Behandlung antiferromagnetischer Ordnung gefundenen Lösungen werden beispielsweise anhand der Dotierung $\delta = 0.05$ in den Abbildungen 4.32, 4.33, 4.34, 4.35 und 4.36 vorgestellt. Berücksichtigt man die gegenüber den Auftragen in 4.1.3 veränderte Dotierung, so ergibt sich, abgesehen von der Reskalierung der Energien, keine Änderung zum Fall zweier Raumdimensionen. Dies gilt leider auch für die Auftragung des chemischen Potentials 4.36, die die thermodynamische Instabilität der gefundenen Lösungen anzeigt. Auf die Instabilität des antiferromagnetischen Zustands bei unendlicher Raumdimension wurde allerdings auch schon in [17] hingewiesen.

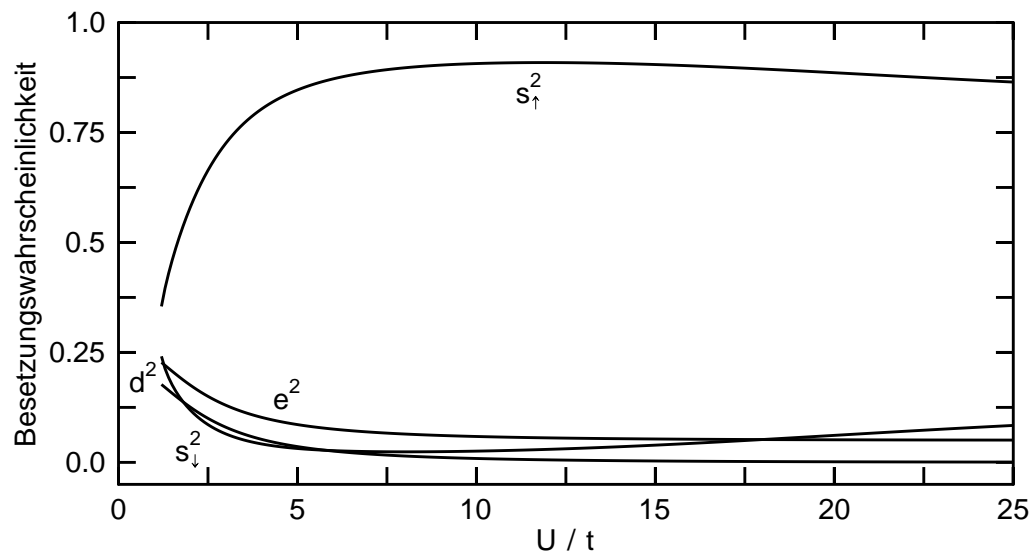


Abbildung 4.32: Quadrate der Bosefelder im antiferromagnetischen Fall und $D \rightarrow \infty$ für $\delta = 0.05$.

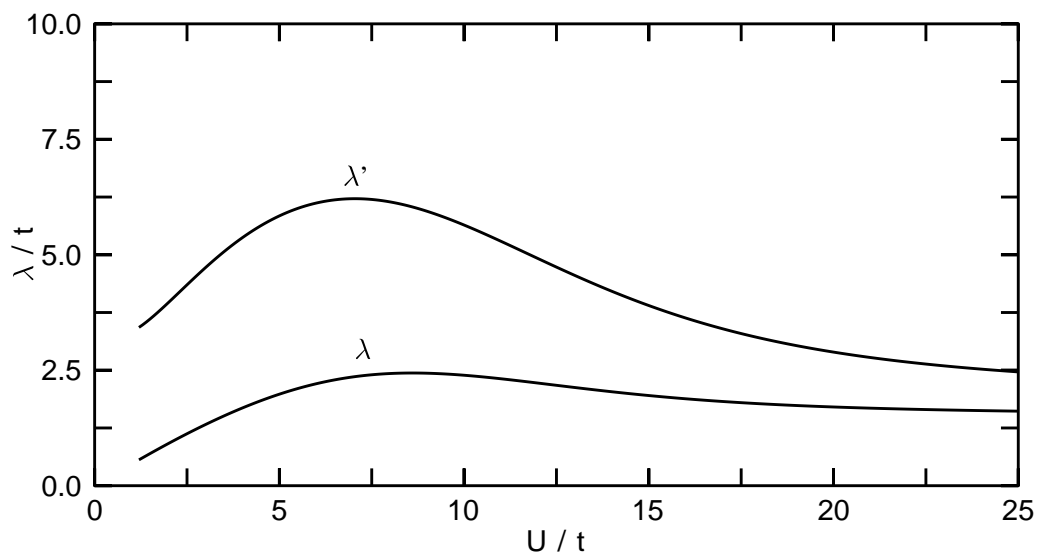


Abbildung 4.33: Lagrangemultiplikatoren im antiferromagnetischen Fall und $D \rightarrow \infty$ für $\delta = 0.05$.

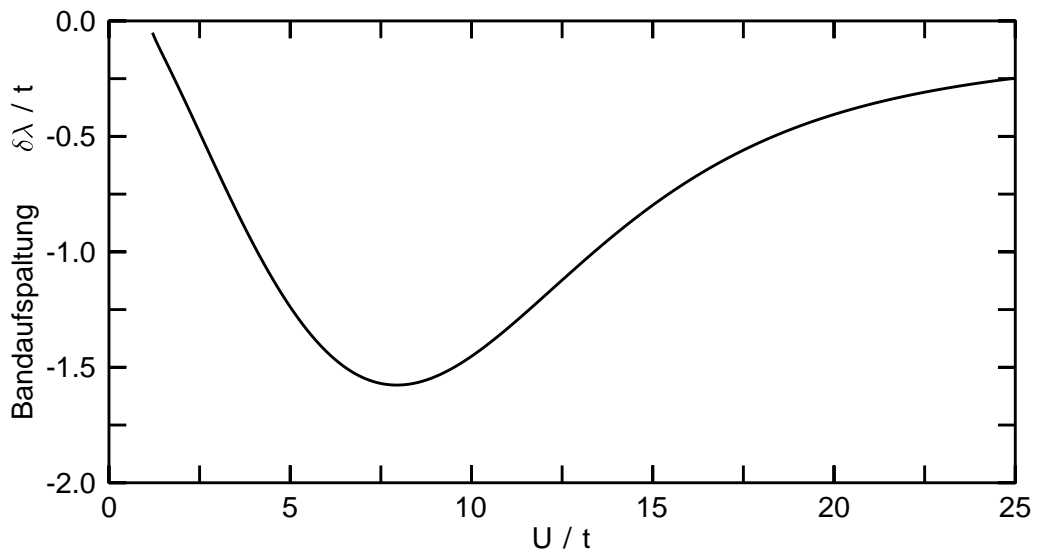


Abbildung 4.34: Bandaufspaltung $\delta\lambda$ im antiferromagnetischen Fall und $D \rightarrow \infty$ für $\delta = 0.05$.

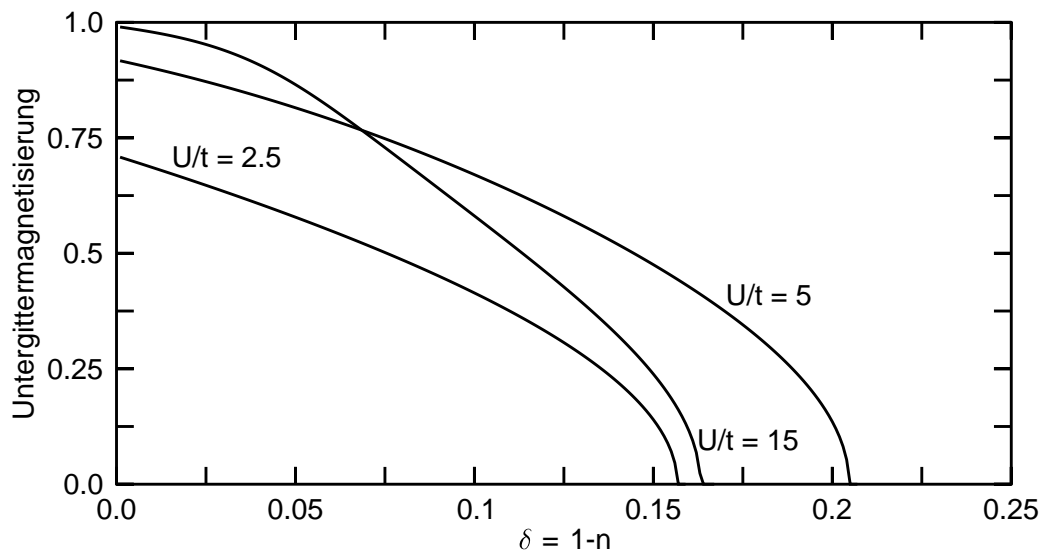


Abbildung 4.35: Untergittermagnetisierung im antiferromagnetischen Fall und $D \rightarrow \infty$ für verschiedene Werte von U/t .

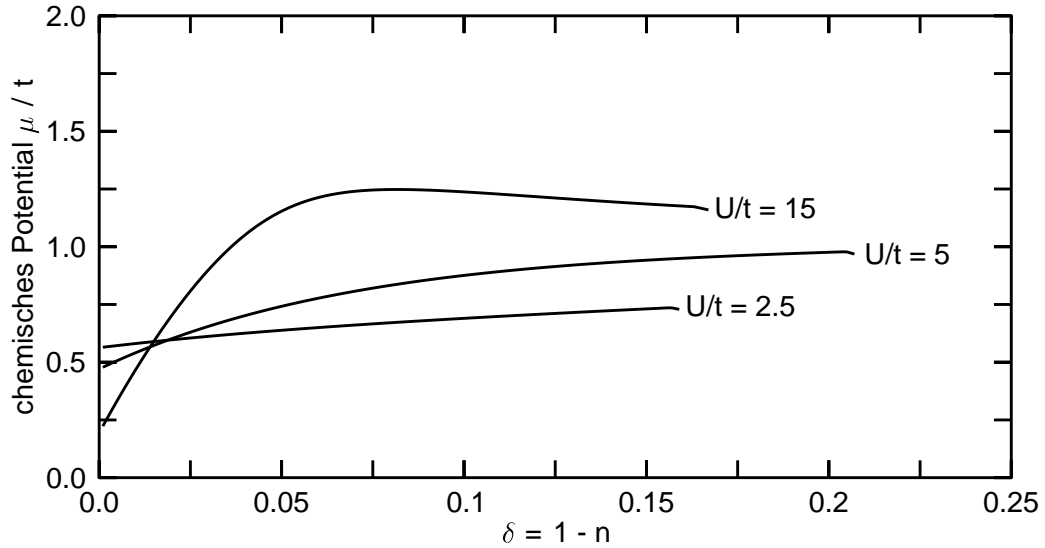


Abbildung 4.36: Chemisches Potential μ im antiferromagnetischen Fall und $D \rightarrow \infty$ für verschiedene Werte von U/t .

4.2.4 Magnetisches Phasendiagramm

Abbildung 4.37 zeigt nun das magnetische Phasendiagramm für den Fall unendlicher Raumdimension, wie es durch Vergleich der freien Energien aus den berechneten Lösungen der Sattelpunktgleichungssysteme gewonnen wurde. Wie in Abbildung 4.23 sind die eigentlichen Phasentrennlinien durch dicke durchgezogene Linien, die Verlängerungen der Trennlinien zweier Phasen in die dritte durch gepunktete Linien und die Grenze des Bereichs, in dem ferromagnetische Lösungen gefunden wurden, durch eine gestrichelte Linie dargestellt. Ebenso sind die Grenzwerte der Trennlinien zwischen der paramagnetischen Phase und den beiden magnetischen Phasen durch Stern und Kreuz bezeichnet. Einen Bereich vollständiger Spinpolarisation gibt es, wie oben schon erwähnt, im Fall unendlicher Raumdimension nicht für endliche Werte von U/t .

Die Form und Ausdehnung des gefundenen antiferromagnetischen Bereichs (AF) hat sich offenbar gegenüber dem Phasendiagramm für das zweidimensionale System praktisch nicht verändert, sieht man von der veränderten

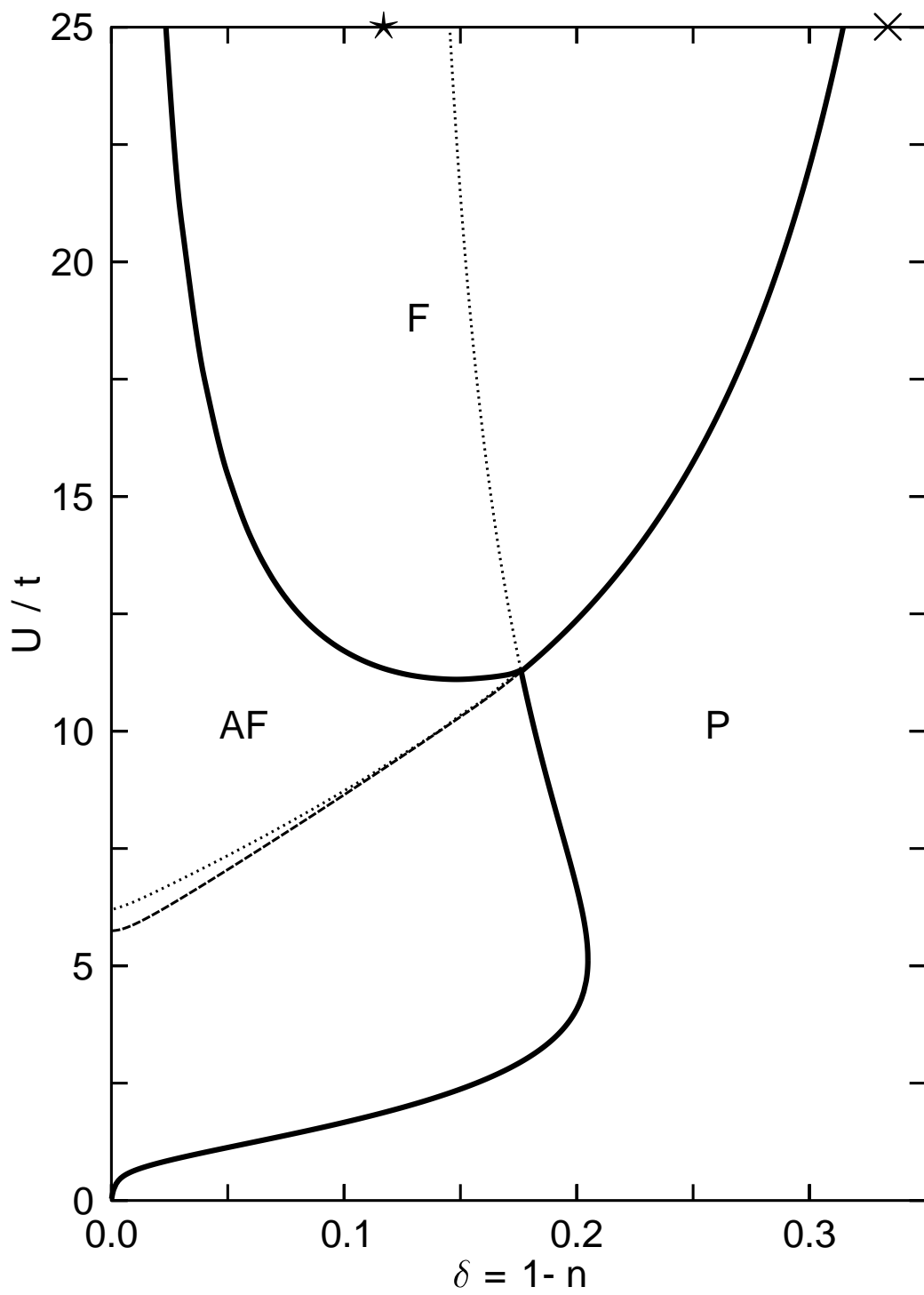


Abbildung 4.37: Magnetisches Phasendiagramm im Fall $D \rightarrow \infty$.

Energieskala ab. Lediglich der Phasenübergang von der antiferromagnetischen in die ferromagnetische (F) Phase hat sich etwas zur Achse halber Bandfüllung hin verschoben und dehnt sich, ausgehend vom Tripelpunkt der drei Phasen, nicht mehr so weit zu schwachen Wechselwirkungsstärken hin aus. Auch die Form der ferromagnetischen Phase hat sich nur wenig verändert. Neben der gerade beschriebenen Verbreiterung in Richtung halber Bandfüllung hat sie sich jedoch auch in Richtung größerer Dotierungen ausgedehnt. Dies spricht für eine zunehmende Stabilität des Ferromagnetismus im Hubbardmodell bei hohen Raumdimensionen. Die Tatsache, daß die Verlängerung der para- / ferromagnetischen Trennlinie in die antiferromagnetische Phase nicht mehr auf den Ursprung des Koordinatensystems führt, sondern die Achse $\delta = 0$ bei einem von Null verschiedenen Wert für U/t schneidet, unterstützt die in 4.1.4 aufgestellte These, daß das im zweidimensionalen Fall beobachtete Verhalten auf die Singularität der Zustandsdichte im zweidimensionalen Fall zurückzuführen ist.

4.3 Berechnung des Hallkoeffizienten

Im letzten Teil dieser Arbeit wurde der Hallkoeffizient des Hubbardmodells als Beispiel eines Transportkoeffizienten auf der Basis der Hilfsbosonenmethode mit Sattelpunktsnäherung für den paramagnetischen Fall und $D = 2$ berechnet. Motiviert wurde dieses durch [18].

Nach Fukuyama [19] läßt sich der Hallkoeffizient R_H des Hubbardmodells in Relaxationszeitnäherung ausdrücken durch

$$R_H = \frac{\sigma_{xy}}{B\sigma_{xx}^2} , \quad (4.1)$$

wobei die auftretenden Elemente des Leitfähigkeitstensors σ gegeben sind durch

$$\sigma_{xy} = -2e^3 B \tau^2 \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \left(\frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_y^2} - \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_y} \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_y \partial k_x} \right) \right] \delta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \quad (4.2)$$

$$\sigma_{xx} = 2e^2\tau \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \right)^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) . \quad (4.3)$$

Hierin meint e kein Bosefeld, sondern die Elementarladung. Setzt man nun die Bandstruktur (3.4) ein und wertet die Integration über die δ -Funktionen aus, so erhält man

$$R_H = - \frac{\pi^2 \Omega \int_a^b \sqrt{1 - \left(\frac{\lambda - \mu}{2tq} - \cos \xi \right)^2} \cos \xi d\xi}{e \left(\int_a^b \sqrt{1 - \left(\frac{\lambda - \mu}{2tq} - \cos \xi \right)^2} d\xi \right)^2} , \quad (4.4)$$

wobei das Volumen der Elementarzelle durch Ω und die Integralgrenzen durch

$$a = \begin{cases} 0 & , \text{ falls } \frac{\lambda - \mu}{2tq} < 0 \\ \arccos \left(\frac{\lambda - \mu}{2tq} - 1 \right) & , \text{ falls } \frac{\lambda - \mu}{2tq} > 0 \end{cases} \quad (4.5)$$

$$b = \begin{cases} \arccos \left(\frac{\lambda - \mu}{2tq} + 1 \right) & , \text{ falls } \frac{\lambda - \mu}{2tq} < 0 \\ \pi & , \text{ falls } \frac{\lambda - \mu}{2tq} > 0 \end{cases} \quad (4.6)$$

gegeben sind. Wie man sieht, hängt das Ergebnis nur über den Ausdruck $\frac{\lambda - \mu}{2tq}$ von den Systemparametern ab. Dieser Ausdruck ist jedoch bei $T = 0$ nur von der Teilchenzahl, nicht aber von der Stärke der Coulombwechselwirkung abhängig. Eine Darstellung des Ergebnisses (4.4) in Einheiten von e und Ω zeigt Abbildung 4.38. Man erkennt, daß der Hallkoeffizient Null wird für halbe Bandfüllung und für leeres bzw. komplett gefülltes Band wie $1/n$ divergiert. Dabei ist das (nicht eingezeichnete) Vorzeichen des Hallkoeffizienten negativ für Lochdotierung und positiv für Elektronendotierung. Dieses Verhalten kann man verstehen, wenn man die vorliegende Bandstruktur berücksichtigt. Denn bei halber Bandfüllung liegt eben nicht ein gefülltes unteres und ein leeres oberes Hubbardband vor, sondern ein halb gefülltes Cosinusband. Daher ist in diesem Fall die Bandkrümmung Null, was zum Verschwinden des Hallkoeffizienten führt. Sind hingegen nur sehr wenige Elektronen im System vorhanden, so kann das Cosinusband quadratisch approximiert werden, woraus ein $1/n$ -Verhalten des Hallkoeffizienten folgt. Ähnliches gilt im

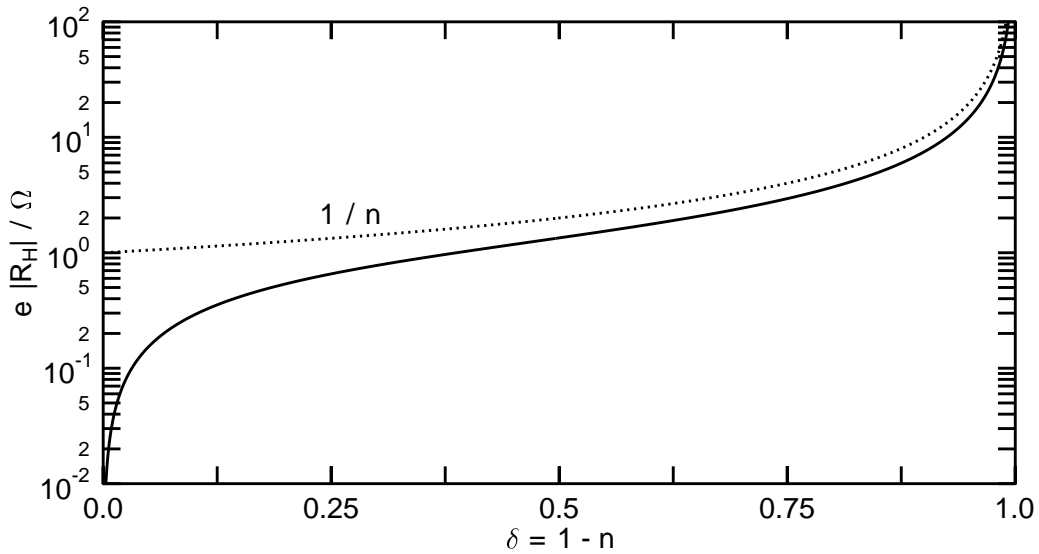


Abbildung 4.38: Normierter Hallkoeffizient für die Sattelpunktlösung des zweidimensionalen Hubbardmodells in Hilfsbosonendarstellung.

Fall des fast gefüllten Bandes, wenn man statt der Elektronen Löcher betrachtet. Das gefundene Verhalten des Hallkoeffizienten deckt sich in keiner Weise mit den experimentellen Befunden bei Hochtemperatursupraleitern (s. z.B. [20]). Dort findet man einen bei halber Bandfüllung divergierenden Hallkoeffizienten. Diese Diskrepanz ist aber leicht zu erklären. Einerseits ist das hier untersuchte Einband-Hubbardmodell mit Sicherheit nicht in der Lage, die komplexen physikalischen Phänomene der keramischen Hochtemperatursupraleiter zu erklären. Andererseits dürfte die in dieser Arbeit zugrunde gelegte Molekularfeldnäherung die Wellenfunktionen so stark deformieren, daß nicht mehr erwartet werden kann, daß die Transporteigenschaften richtig wiedergegeben werden.

Kapitel 5

Zusammenfassung und Kritik

Im Rahmen dieser Arbeit wurde das Hubbardmodell in der Hilfsbosonenformulierung mit Sattelpunktsnäherung untersucht, wobei paramagnetische, ferromagnetische und antiferromagnetische Ordnungszustände für zwei und unendlich viele Raumdimensionen zugrunde gelegt wurden. Es gelang, die sich für diese Fälle ergebenden Sattelpunktgleichungssysteme numerisch mit hoher Genauigkeit in einem weiten Bereich der Coulombwechselwirkungsstärke zu lösen, der sich vom unkorrelierten Grenzfall bis zu hohen Kopplungsstärken erstreckte. Ergänzend wurden noch Untersuchungen im Grenzfall unendlicher Coulombwechselwirkung durchgeführt. Die erhaltenen Ergebnisse erlauben es, die relevanten physikalischen Größen in den verschiedenen magnetischen Ordnungszuständen zu diskutieren und zu vergleichen. Darüber hinaus konnten durch direkten Vergleich der freien Energien die magnetischen Phasendiagramme für die betrachteten Fälle bestimmt werden. Die Ergebnisse zeigen im ganzen eine hohe Übereinstimmung mit Arbeiten anderer Autoren. Die weitgehende Übereinstimmung der gefundenen Phasendiagramme für zwei Dimensionen und unendliche Raumdimension gibt weiterhin Anlaß zu der Hoffnung, daß auch das Phasendiagramm des wichtigen Falls dreier Raumdimensionen unter der gleichen Methodik ähnlich herauskäme.

Durch die flächendeckende Untersuchung der Lösungen in der $\delta - U$ -Ebene konnten allerdings einige Aussagen anderer Arbeiten, insbesondere hinsichtlich des Verhaltens der ferromagnetischen Phase beim Übergang in die paramagnetische, korrigiert werden. Darüber hinaus wurde in dieser Arbeit noch der Hallkoeffizient des zweidimensionalen Hubbardmodells unter der Sattelpunktsnäherung berechnet. Das Resultat zeigt jedoch, daß diese Näherung zu grob ist, um zu vernünftigen Aussagen über Transportphänomene zu gelangen.

Eine weitere Schwäche der durchgeführten Berechnungen zeigt die thermodynamische Instabilität der gefundenen antiferromagnetischen Zustände. Hier zeigt sich, daß es notwendig wäre, neben den betrachteten magnetischen Phasen weitere Grundzustände in die Betrachtung mit einzubeziehen. Insbesondere bietet es sich an, Spiralphasen als Verallgemeinerung von Ferro- und Antiferromagnetismus zu betrachten. In letzter Zeit angestellte Überlegungen zeigen, daß zumindest die analytische Formulierung der entsprechenden Sattelpunktsgleichungen keine Schwierigkeiten bereitet. Wie weit das entstehende Gleichungssystem allerdings numerisch stabil zu behandeln ist, müßte erst überprüft werden. Außer Spiralphasen wäre noch die Einführung supraleitender Zustände eine sinnvolle Erweiterung des Spektrums der betrachteten Phasen.

Neben einer Vergrößerung der Zahl der betrachteten Grundzustände wäre es interessant, auch den Fall dreier Raumdimensionen zu behandeln. Zwar läßt sich in diesem Fall die Zustandsdichte des unkorrelierten Systems nicht mehr nur mit speziellen Funktionen, sondern nur mit zusätzlichen Integrationen berechnen. Jedoch könnte dieses Problem mit Hilfe einer Wertetabelle und Interpolation umgangen werden.

Ein anderer Weg, die hier vorgestellte Arbeit fortzuführen und zu verbessern, bestünde darin, bei der Berechnung der Zustandssumme über die Sattelpunktsnäherung hinauszugehen, d.h. Fluktuationen der Bosefelder zu

erfassen. Rechnungen in dieser Richtung findet man bei Lavagna [9], [10] und bei Lilly [15]. Allerdings werden die zu lösenden Gleichungen sehr aufwendig, und es müssen weitere Näherungen gemacht werden, deren Einfluß auf die Ergebnisse nicht mehr ohne weiteres kontrollierbar ist. Trotzdem scheint dies ein möglicher Weg zu sein, detailliertere Aussagen über die Eigenschaften des Hubbardmodells zu bekommen. Im Rahmen solcher Rechnungen erscheint auch ein Übergang zu endlichen Temperaturen sinnvoller zu sein als bei Rechnungen mit Sattelpunktsnäherung, da die Ergebnisse der Sattelpunktsnäherung mit einiger Sicherheit nur für sehr tiefe Temperaturen überhaupt relevant sein können.

Letztlich muß noch auf ein Problem der Hilfsbosonenformulierung des Hubbardmodells hingewiesen werden. In der hier verwendeten Form nach Kotliar und Ruckenstein [7] ist der Hamilton-Operator (2.12) nicht mehr invariant gegenüber Drehungen der Spinquantisierungsachse, im Gegensatz zum ursprünglichen Hamilton-Operator des Hubbardmodells (2.2), der spinrotationsinvariant ist. Dies liegt daran, daß die Hilfsbosonen für die einzelnen besetzten Gitterplätze p_σ unabhängig voneinander sind und skalaren Charakter haben, während sich die Elektronen bei Drehung der Spinquantisierungsachse als Spinor transformieren. Dieses Problem kann nach Li et. al. [21] beseitigt werden, indem anstelle der beiden Operatoren p_σ ein 2x2 Matrixoperator eingeführt wird. Im Rahmen der Sattelpunktsnäherung sollte dies jedoch ohne Belang sein, da hier dieser Matrixoperator als diagonal angesehen werden kann mit den beiden skalaren p -Operatoren als Diagonalelementen.

Anhang A

Partielle Ableitungen der Renormierungsfaktoren

A.1 Der paramagnetische Fall

$$\begin{aligned}\frac{\partial q}{\partial e} &= \frac{2s^2(e+d)}{(1-d^2-s^2)(1-e^2-s^2)} + \frac{2es^2(e+d)^2}{(1-d^2-s^2)(1-e^2-s^2)^2} \\ \frac{\partial q}{\partial d} &= \frac{2s^2(e+d)}{(1-d^2-s^2)(1-e^2-s^2)} + \frac{2ds^2(e+d)^2}{(1-d^2-s^2)^2(1-e^2-s^2)} \\ \frac{\partial q}{\partial s} &= \frac{2s(e+d)^2}{(1-d^2-s^2)(1-e^2-s^2)} \\ &\quad + \frac{2s^3(e+d)^2}{(1-d^2-s^2)^2(1-e^2-s^2)} + \frac{2s^3(e+d)^2}{(1-d^2-s^2)(1-e^2-s^2)^2}\end{aligned}$$

A.2 Der ferromagnetische Fall

$$\begin{aligned}\frac{\partial q_\sigma}{\partial e} &= \frac{2p_\sigma(ep_\sigma + dp_{-\sigma})}{(1-d^2-p_\sigma^2)(1-e^2-p_{-\sigma})} + \frac{2e(ep_\sigma + dp_{-\sigma})^2}{(1-d^2-p_\sigma^2)(1-e^2-p_{-\sigma})^2} \\ \frac{\partial q_\sigma}{\partial d} &= \frac{2p_{-\sigma}(ep_\sigma + dp_{-\sigma})}{(1-d^2-p_\sigma^2)(1-e^2-p_{-\sigma})} + \frac{2d(ep_\sigma + dp_{-\sigma})^2}{(1-d^2-p_\sigma^2)^2(1-e^2-p_{-\sigma})}\end{aligned}$$

$$\frac{\partial q_\sigma}{\partial p_\sigma} = \frac{2e(ep_\sigma + dp_{-\sigma})}{(1-d^2-p_\sigma^2)(1-e^2-p_{-\sigma})} + \frac{2p_\sigma(ep_\sigma + dp_{-\sigma})^2}{(1-d^2-p_\sigma^2)^2(1-e^2-p_{-\sigma})}$$

$$\frac{\partial q_\sigma}{\partial p_{-\sigma}} = \frac{2d(ep_\sigma + dp_{-\sigma})}{(1-d^2-p_\sigma^2)(1-e^2-p_{-\sigma})} + \frac{2p_{-\sigma}(ep_\sigma + dp_{-\sigma})^2}{(1-d^2-p_\sigma^2)(1-e^2-p_{-\sigma})^2}$$

A.3 Der antiferromagnetische Fall

$$\frac{\partial q}{\partial e} = \frac{p_\uparrow(ep_\downarrow + dp_\uparrow) + p_\downarrow(ep_\uparrow + dp_\downarrow)}{\left[(1-d^2-p_\uparrow^2)(1-e^2-p_\downarrow^2)(1-d^2-p_\downarrow^2)(1-e^2-p_\uparrow^2)\right]^{1/2}} + \frac{e(ep_\uparrow + dp_\downarrow)(ep_\downarrow + dp_\uparrow)\left[(1-e^2-p_\downarrow^2) + (1-e^2-p_\uparrow)\right]}{\left[(1-d^2-p_\uparrow^2)(1-e^2-p_\downarrow^2)^3(1-d^2-p_\downarrow^2)(1-e^2-p_\uparrow^2)^3\right]^{1/2}}$$

$$\frac{\partial q}{\partial d} = \frac{p_\downarrow(ep_\downarrow + dp_\uparrow) + p_\uparrow(ep_\uparrow + dp_\downarrow)}{\left[(1-d^2-p_\uparrow^2)(1-e^2-p_\downarrow^2)(1-d^2-p_\downarrow^2)(1-e^2-p_\uparrow^2)\right]^{1/2}} + \frac{d(ep_\uparrow + dp_\downarrow)(ep_\downarrow + dp_\uparrow)\left[(1-d^2-p_\uparrow^2) + (1-d^2-p_\downarrow)\right]}{\left[(1-d^2-p_\uparrow^2)^3(1-e^2-p_\downarrow^2)(1-d^2-p_\downarrow^2)^3(1-e^2-p_\uparrow^2)\right]^{1/2}}$$

$$\frac{\partial q}{\partial p_\uparrow} = \frac{e(ep_\downarrow + dp_\uparrow) + d(ep_\uparrow + dp_\downarrow)}{\left[(1-d^2-p_\uparrow^2)(1-e^2-p_\downarrow^2)(1-d^2-p_\downarrow^2)(1-e^2-p_\uparrow^2)\right]^{1/2}} + \frac{p_\uparrow(ep_\uparrow + dp_\downarrow)(ep_\downarrow + dp_\uparrow)\left[(1-d^2-p_\uparrow^2) + (1-e^2-p_\uparrow)\right]}{\left[(1-d^2-p_\uparrow^2)^3(1-e^2-p_\downarrow^2)(1-d^2-p_\downarrow^2)(1-e^2-p_\uparrow^2)^3\right]^{1/2}}$$

$$\frac{\partial q}{\partial p_\downarrow} = \frac{d(ep_\downarrow + dp_\uparrow) + e(ep_\uparrow + dp_\downarrow)}{\left[(1-d^2-p_\uparrow^2)(1-e^2-p_\downarrow^2)(1-d^2-p_\downarrow^2)(1-e^2-p_\uparrow^2)\right]^{1/2}} + \frac{p_\downarrow(ep_\uparrow + dp_\downarrow)(ep_\downarrow + dp_\uparrow)\left[(1-e^2-p_\downarrow^2) + (1-d^2-p_\downarrow)\right]}{\left[(1-d^2-p_\uparrow^2)(1-e^2-p_\downarrow^2)^3(1-d^2-p_\downarrow^2)^3(1-e^2-p_\uparrow^2)\right]^{1/2}}$$

Literaturverzeichnis

- [1] M.C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. **10**, 159 (1963).
- [2] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. **A276**, 238 (1963).
- [3] J.G. Bednorz und K.A. Müller, Z. Phys. **B64**, 189 (1986).
- [4] U. Wolff, Nucl. Phys. **B225**, 391 (1985).
- [5] W. Metzner und D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett **62**, 324 (1989).
- [6] S.E. Barnes, J. Phys. **F6**, 1375 (1976) und **F7**, 2637 (1977).
- [7] G. Kotliar und A.E. Ruckenstein, Phys. Rev. Lett. **57**, 1362 (1986).
- [8] M.C. Gutzwiller, Phys. Rev. **137**, 1726 (1965).
- [9] M. Lavagna, Helv. Phys. Acta. **63**, 310 (1990).
- [10] M. Lavagna, Phys. Rev. **B41**, 142 (1990).
- [11] Abramowitz, Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Applied Mathematics Series, vol 55 (Washington: Buereau of Standards; reprinted 1968 by Dover Publications, New York), Kapitel 17.
- [12] J. Stoer, *Einführung in die Numerische Mathematik I*, vierte verbesserte Auflage, (Heidelberger Taschenbücher; Bd. 105), Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo (1983), Kapitel 5.

- [13] W.F. Brinkman und T.M. Rice, Phys. Rev. **B2**, 4302 (1970).
- [14] L.D. Landau und E.M. Lifschitz, *Lehrbuch der theoretischen Physik, Band V*, 8. berichtigte und ergänzte Auflage, Akademie-Verlag, Berlin (1979/1987), §96.
- [15] L. Lilly, Dissertation, Würzburg (1991).
- [16] B. Möller, *Ferromagnetismus im Hubbard-Modell*, Vortrag auf den Korrelationstagen, Friederichroda (1992).
- [17] P. Fazekas, B. Menge und E. Müller-Hartmann, Z.Phys. **B78**, 69 (1990).
- [18] S. Behera, M. Das und P. Entel, *Hall Effect in Correlated Fermion Systems*, in *Strongly Correlated Electronic Systems* (Eds. M. Das und D. Neilson), Nova Science Publishers Inc., New York (1992).
- [19] H. Fukuyama, Prog. Theor. Phys., **42**, 1284 (1969).
- [20] S. Uchida, H. Takagi, Y. Tokura, N.Koshihara und T. Arima, in *Strong Correlation and Superconductivity*, Vol. 89 (Eds. H. Fukuyama, S. Maekawa und A. Molozemoff), Springer Series in Solid State Science, Springer Verlag, New York, (1989), S. 194.
- [21] T. Li, P. Wölfle und P. Hirschfeld, Phys. Rev. **B40**, 6817 (1989).
- [22] R. Meyer und P. Entel, zu erscheinen in Phys. Rev. **B47**, (1993).

Danksagung

Mein erster Dank gilt Herrn Prof. Dr. Peter Entel für die Stellung des interessanten Themas dieser Arbeit. Des weiteren danke ich ihm für seine ständige Diskussionsbereitschaft im Rahmen der Betreuung dieser Arbeit und seine zahlreichen wertvollen Literaturhinweise.

Mein besonderer Dank gilt weiterhin Herrn Alfred Hucht, Frau Dr. Marianne Schröter und Herrn Dirk Talkenberger (Danke für den Tee), deren nie nachlassendes Interesse an meiner Arbeit und deren offene Ohren in schwierigen Zeiten wesentlich zum Gelingen meiner Diplomarbeit beigetragen haben. Den beiden Letztgenannten bin ich außerdem für ihre Hilfe bei der Fehlersuche im Manuskript zu Dank verpflichtet.

Beiträge zu dem Versuch das Satzsystem \LaTeX dazu zu bringen, das zu tun, was ich gerne wollte, leisteten mir Herr Egbert Hoffmann, Herr Michael Staats und Herr Dirk Talkenberger Hilfe. Ohne sie sähe das Layout dieser Arbeit wohl anders aus. Danke nochmals!

Schließlich möchte ich allen Mitgliedern der Arbeitsgruppe für theoretische Tieftemperaturphysik an der Universität-Gesamthochschule Duisburg ein Lob für das angenehme Arbeitsklima aussprechen.