

INAUGURAL-DISSERTATION
zur
Erlangung der Doktorwürde
der
Naturwissenschaftlich-Mathematischen
Gesamtfakultät
der
Ruprecht-Karls-Universität
Heidelberg

vorgelegt von
Dipl.Phys. Ina Grote
aus Stadthagen

Tag der mündl. Prüfung: 14.11.2002

Zugang zum Hubbardmodell mit Hilfe von Flußgleichungen

Gutachter:

Prof. Dr. Franz Wegner
Prof. Dr. Hans Günter Dosch

Zugang zum Hubbardmodell mit Hilfe von Flußgleichungen

Mit Hilfe der Flußgleichungen wird das Hubbardmodell im Rahmen einer störungstheoretischen Untersuchung auf die Form einer effektiven Hartree-Fock-Bogoliubov-Wechselwirkung gebracht. Die Stabilität des Systems wird analysiert und bezüglich der verschiedenen möglichen Phasen ausgewertet.

Für das Hubbardmodell mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung wird ein Bereich mit antiferromagnetischer Ordnung erhalten. Im BCS-Kanal wird eine d_+ -Wellen-Supraleitung errechnet. Weitere wichtige Phasen sind die Pomeranchuk-Instabilität, die die Gitterstruktur verändert, und die Bandsplitting-Instabilität.

Für das Hubbardmodell mit Übernächster-Nachbar-Wechselwirkung verschwindet der Antiferromagnetismus nahezu. Für starke Kopplung tritt Ferromagnetismus auf. Weitere Instabilitäten mit vergleichbarer Wechselwirkung werden ebenfalls dargestellt.

Approaching The Hubbard Model with Flow Equations

The Hubbard model is transformed into an effective Hartree-Fock-Bogoliubov-type interaction using the means of flow equations in second order perturbation theory. The stability of the system is analysed and evaluated in order to obtain the transition into various possible phases.

Looking at the Hubbard model with nearest-neighbor interaction one gets an antiferromagnetic transition. In the BCS-channel d_+ -superconductivity is obtained. Other important instabilities are the Pomeranchuk instability which changes the lattice structure and Band-splitting.

In the Hubbard model with next-nearest-neighbor interaction antiferromagnetism is nearly vanishes. Ferromagnetism appears for strong coupling. Other types of instabilities of comparable strength are also reported.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Flußgleichungen	7
2.1	Methode der Flußgleichungen	7
2.2	Wahl des Generator bei endlicher Temperatur	9
2.3	Flußgleichungen in 2. Ordnung Störungstheorie	13
3	Das Hubbardmodell	19
3.1	Einführung des Hubbardmodells	19
3.2	Freie Energie in Molekularfeldnäherung	23
3.3	Symmetrien auf dem Quadratgitter	25
4	Auswertung	29
4.1	Teilchen-Teilchen-Kanäle	29
4.1.1	mit Gesamtimpuls Null	30
4.1.2	mit Gesamtimpuls q_0	31
4.2	Teilchen-Loch-Kanäle	32
4.2.1	mit Impulstransfer Null	32
4.2.2	mit Impulstransfer q_0	33
4.3	Stabilitätsanalyse der Wechselwirkungskanäle	36

5	Numerik	39
5.1	Berechnung der Wechselwirkungen auf dem Gitter	39
5.2	Behandlung singulärer Punkte	40
5.3	Genauigkeit und Geschwindigkeit	42
6	Resultate	43
6.1	Hubbardmodell mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung	44
6.2	Hubbardmodell mit NNN-Wechselwirkung	46
6.2.1	für $t'/t = -1/6$	46
6.2.2	für $t'/t = -1/3$	49
6.2.3	für $t'/t = -5/12$	51
6.3	Vergleich verschiedener Gittereinteilungen	53
7	Zusammenfassung und Ausblick	57
A	Kommutatoren	59
	Literaturverzeichnis	61
	Abbildungsverzeichnis	63
	Tabellenverzeichnis	64

Kapitel 1

Einleitung

1986 veröffentlichten Bednorz und Müller ihre erste Arbeit über “Possible High T_c Superconductivity in the Ba-La-Cu-O-System“[1]. Seit dieser Zeit wurde die Hochtemperatursupraleitung in vielen experimentellen und theoretischen Studien untersucht. So konnte eine Erhöhung der Sprungtemperatur auf 134K erreicht und die für die Supraleitung charakteristischen Eigenschaften wie der Meissner-Ochsenfeld-Effekt, der Josephson-Wechselstrom-Effekt, das Fließen von Dauerströmen und ein praktisch verschwindender Gleichstromwiderstand nachgewiesen werden.

Ein wesentliches Strukturmerkmal dieser Hochtemperatursupraleiter sind parallele CuO_2 -Schichten, weshalb die Stoffe auch als Kuprate bekannt sind. Die übrigen Atome der Kuprate haben ihren Platz zwischen den Schichten. Sie stabilisieren die Struktur und tragen zur Ladungsbilanz bei.

Das experimentell ermittelte Phasendiagramm zeigt für das nichtdotierte Kuprat unterhalb der Néel-Temperatur einen antiferromagnetischen Isolator. Eine Dotierung des Stoffes verändert das chemische Potential und damit die Anzahl der Ladungsträger. Dadurch wird die antiferromagnetische Ordnung unterdrückt und das System wird unter Umständen metallisch oder supraleitend. Die Struktur der Hochtemperatursupraleiter ist orthorhombisch

Formel	T_c	Formel	T_c
$YBa_2Cu_3O_7$	92	$BiSr_2Cu_2O_6$ (1)	10
$Tl_2Ba_2Ca_1Cu_2O_8$	110	$Bi_2Sr_2Ca_1Cu_2O_8$ (2)	90
$Tl_2Ba_2Ca_2Cu_2O_{10}$	127	$Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10}$ (3)	120
$HgBa_2Ca_2Cu_3O_8$	134		

Tabelle 1.1: Hochtemperatursupraleiter mit ihrer jeweiligen Sprungtemperatur. In der rechten Spalte ist für die Bismut-Verbindungen in Klammern die Anzahl der CuO_2 -Schichten aufgeführt.

und entsteht beim Abkühlen der Probe aus einer tetragonalen Struktur [20]. Zusätzlich zum Isolator-Metall-Übergang existiert in einigen Kupraten eine Spinglasphase.

Bei der Suche nach der Ursache der Supraleitung geben die im folgenden beschriebenen Phänomene einige Anhaltspunkte:

- In vielen Kupraten kann man die seltenen Erden durch fast alle anderen Atome dieser Gruppe ersetzen, ohne daß sich die Sprungtemperatur wesentlich ändert. Dies zeigt, daß die Supraleitung auf Bereiche der Proben beschränkt ist, die mit den seltenen Erden wenig Wechselwirkung haben.
- Weiter ist es möglich, durch geeignete Präparationsbedingungen Proben mit unterschiedlichen Schichtfolgen herzustellen. Mit der Anzahl benachbarter Kupferoxid-schichten wächst die Sprungtemperatur im dem Bismut-System an (siehe Tabelle (1.1), rechte Spalte) [2].
- Innerhalb dieser Schichten ist die elektrische Leitfähigkeit um einige Größenordnungen größer als senkrecht dazu [3].

Aus diesen Gründen wird die Hauptursache der Herkunft der Supraleitung in der Inner-schichtwechselwirkung gesehen, die betrachteten Modelle sind in der Regel zweidimensional.

Ausgangspunkt dieser Arbeit ist die Modellierung der zweidimensionalen CuO_2 -Schichten unter Vernachlässigung der Wechselwirkung zwischen den Schichten. In einer Kupferoxid-schicht werden die $d_{x^2-y^2}$ -Orbitale der Kupferatome durch die p_σ -Orbitale der Sauerstoff-atome miteinander verbunden. Dies kann als Basis für ein 3-Band-Hubbardmodell benutzt werden.

Eine weitere Vereinfachung führt auf das hier betrachtete zweidimensionale Ein-Band-Hubbardmodell, mit dessen Hilfe das Elektronensystem und die daraus resultierenden Wechselwirkungen innerhalb der Kupferoxidschichten beschrieben werden. Dabei wird das System dargestellt durch nominelle Kupferatome auf einem Gitter, die durch einen Elektronenhüpfterm t verbunden werden und die eine kurzreichweitige Coulombabstoßung U für zwei Elektronen auf demselben Gitterplatz besitzen. Diese Reduzierung bedeutet, daß nur das Energieband, in dem die Fermienergie liegt, berücksichtigt wird. Führt man Monte-Carlo-Simulationen in dem Bereich nahe halber Füllung für das 3-Band-Hubbardmodell und das Ein-Band-Hubbardmodell durch, so stimmen beide Berechnungen in den charakteristischen Merkmalen überein [4], [5]. Dies legt nahe, die Wechselwirkungen in den CuO_2 -Schichten der Kuprate durch ein zweidimensionales Ein-Band-Hubbardmodell zu modellieren.

Um das Hubbardmodell untersuchen zu können, wird in Kapitel 2 der Zugang über die Methode der Flußgleichungen erläutert. Zunächst wird das Verfahren der kontinuierlichen Diagonalisierung mit einer einfachen Aufteilung in Diagonalteil und Nichtdiagonalteil zur

Wahl des Generators eingeführt. Im nächsten Abschnitt wird die Methode für endliche Temperaturen erweitert. Dazu ist eine andere Wahl des Generators der Transformation notwendig, eine Eliminationsfunktion wird definiert, die die diagonalen und nichtdiagonalen Beiträge kennzeichnet. Da die Flußgleichungen im allgemeinen nicht geschlossen sind, werden sie im Rahmen einer Störungstheorie bis zur zweiten Ordnung in der Wechselwirkung betrachtet und eine effektive Zweiteilchenwechselwirkung berechnet.

In Kapitel 3 wird das Hubbardmodell eingeführt. Zunächst wird die Herkunft des Modells und seine Bedeutung in der Festkörperphysik erläutert. Aufgrund der Betrachtung der Fermiflächen für verschiedene Parameter werden Erwartungen an die Ergebnisse formuliert. Neben der effektiven Wechselwirkung ist die Entropie relevant für die Analyse der Stabilität der Zustände. Diese wird mit Hilfe einer Molekularfeldnäherung berechnet. Ferner werden die Symmetrien der Zustände auf dem Quadratgitter betrachtet.

Die Auswertung für die erhaltenen Wechselwirkungskanäle wird in Kapitel 4 durchgeführt. Dabei legen die Bedingungen an die Eliminationsfunktion fest, welche Kanäle erhalten bleiben. Für diese werden dann die effektiven Wechselwirkungen und Entropien berechnet. Die Stabilitätsuntersuchung der Wechselwirkungskanäle wird dargestellt.

Das numerische Vorgehen dieser Arbeit wird in Kapitel 5 beschrieben. Zunächst werden die Berechnungen auf dem Quadratgitter erläutert. Im nächsten Abschnitt wird auf die Behandlung singulärer Punkte bei der Numerik eingegangen. Anschließend wird eine Aussage zu Genauigkeit und Geschwindigkeit des Programms gemacht.

Die Resultate werden in Kapitel 6 diskutiert. Die Berechnungen werden sowohl für das Hubbardmodell mit reiner Nächster-Nachbar-Wechselwirkung als auch für das Hubbardmodell mit verschiedenen Übernächste-Nachbar-Wechselwirkungen mit verschiedenen chemischen Potentialen durchgeführt. Im letzten Abschnitt des Kapitels wird die Abhängigkeit der Ergebnisse von der Größe des Gitters untersucht, indem die Resultate für verschiedene Gittereinteilungen verglichen werden.

In Kapitel 7 werden die Resultate zusammengefaßt und ein Ausblick auf mögliche weitere Untersuchungen des Hubbardmodells mit Hilfe der Flußgleichungen gegeben.

Kapitel 2

Flußgleichungen

In der Vielteilchenphysik stößt man häufig auf das Problem, den Hamiltonoperator eines Vielteilchensystems in Diagonal- oder Blockdiagonalform transformieren zu wollen. Die dafür notwendige Transformation ist für einige Fälle bekannt, z.B. die Schrieffer-Wolff-Transformation [6] oder die Foldy-Wouthuysen-Transformation [7]. Bei vielen anderen Hamiltonoperatoren ist die Transformation in Diagonalform nicht bekannt und eine systematische Herleitung dieser Transformation existiert nicht.

2.1 Methode der Flußgleichungen

Die Methode der Flußgleichungen von Wegner [8] dient dazu, den Hamiltonoperator eines Vielteilchensystems durch eine Folge infinitesimaler unitärer Transformationen zu diagonalisieren. Dabei wird nach jeder Transformation ein neuer, zu dem transformierten Hamiltonoperator passender Generator der Transformation gewählt, der den Hamiltonoperator näher an die Diagonalform bringen soll.

Eine kontinuierliche stetig differenzierbare Transformation mit dem Flußparameter l wird durch

$$H(l) = U(l)H(0)U^\dagger(l) \quad (2.1)$$

beschrieben, wobei die Transformation für $l = 0$ mit dem Hamiltonoperator des Vielteilchensystems startet. Das Ziel ist es, für $l \rightarrow \infty$ Diagonal- oder Blockdiagonalform des Hamiltonoperators zu erreichen. Differenziert man nach dem Flußparameter, so erhält man für die Flußgleichungen ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen in l

$$\frac{dH(l)}{dl} = [\eta(l), H(l)] \quad (2.2)$$

mit dem antihermiteschen Generator

$$\eta(l) = \frac{dU(l)}{dl}U^\dagger(l) = -\eta^\dagger(l) \quad . \quad (2.3)$$

Mit Hilfe der Gleichung (2.2) erhält man die Matrixelemente des Hamiltonoperators

$$\frac{dH_{kq}}{dl} = \sum_p (\eta_{kp} H_{pq} - H_{kp} \eta_{pq}) \quad . \quad (2.4)$$

Zunächst ist man in der Wahl des Generators völlig frei, jedoch soll η so gewählt werden, daß die Außerdiagonalelemente verschwinden. Teilt man den Hamiltonoperator in Diagonal- und Außerdiagonalteil

$$H(l) = H^d(l) + H^r(l) \quad (2.5)$$

und berücksichtigt, daß die Spur

$$\text{Sp}H^2 = \text{Sp}H^{d2} + \text{Sp}H^{r2} \quad (2.6)$$

unter einer unitären Transformation konstant ist, so muß $\text{Sp}(H^r)^2$ abnehmen und $\text{Sp}(H^d)^2$ zunehmen, um Diagonalform von H zu erreichen. Damit die Bedingung

$$\begin{aligned} \frac{d(\text{Sp}(H^d)^2)}{dl} &= \frac{d}{dl} \left(\sum_q H_{qq}^2 \right) \\ &= 2 \sum_q H_{qq} \sum_p (\eta_{qp} H_{pq} - H_{qp} \eta_{pq}) \\ &= 2 \sum_{qp} \eta_{pq} (H_{pp} H_{pq} - H_{qq} H_{pq}) \\ &\leq 0 \end{aligned} \quad (2.7)$$

erfüllt werden kann, wird der Generator

$$\eta_{pq} = H_{pq} (H_{pp} - H_{qq}) \quad (2.8)$$

$$\eta(l) = [H(l), H^r(l)] \quad (2.9)$$

gesetzt. Mit dieser Wahl des Generators werden die Außerdiagonalelemente des Hamiltonoperators kleiner mit wachsendem Flußparameter und verschwinden für $l \rightarrow \infty$.

Sind allerdings zwei oder mehr Einteilchenenergien entartet, so verschwinden die Außerdiagonalelemente, die diese Energien verbinden, nicht. Daher ist es von den Anfangsbedingungen abhängig, ob Diagonalform oder eine Blockdiagonalform erreicht wird. Sind die Einteilchenenergien nur fast entartet, so besteht die Möglichkeit, daß die Wechselwirkung zwischen diesen Energien dennoch verschwindet. Da die Einteilchenenergien sich ebenfalls mit dem Flußparameter l verändern, kann die beinahe Entartung im Verlauf der Flußgleichungen zeitweilig aufgehoben und dadurch die Wechselwirkungen unterdrückt werden.

Untersucht man den Fall entarteter Energien im Rahmen einer Störungstheorie, so treten Singularitäten durch verschwindende Energienenner auf, die dazugehörigen Wechselwirkungen können nicht eliminiert werden. Auch für fast entartete Energien ist eine störungstheoretische Behandlung der Wechselwirkungen nicht möglich.

Durch die Berechnung der Kommutatoren treten auch Wechselwirkungen auf, die im ursprünglichen System nicht vorhanden waren. Die Flußgleichungen sind nicht mehr geschlossen, sondern erzeugen neue Matricelemente mit dazugehörigen Differentialgleichungen. Eine Möglichkeit die Gleichungen zu schließen besteht darin, im Rahmen einer störungstheoretischen Betrachtung eine Abbruchbedingung einzuführen und die höheren Wechselwirkungen zu vernachlässigen.

Das Konzept der Aufteilung des Hamiltonoperators in Diagonal- und Außerdiagonalteil läßt sich einfach für Systeme mit Temperatur $T = 0$ anwenden. In diesem Fall wird in einem Vielteilchensystem die Anzahl der Quasiteilchen, d.h. die Teilchen oberhalb und die Löcher unterhalb der Fermikante, gezählt. Alle Wechselwirkungen, die die Anzahl der Quasiteilchen erhalten, werden als diagonal angesehen. Wechselwirkungen, die die Anzahl der Quasiteilchen verändern, sind damit nichtdiagonal und sollen eliminiert werden.

Für Systeme mit endlicher Temperatur $T \neq 0$ ergeben sich Schwierigkeiten bei der Definition der Quasiteilchen, da die Fermikante keine scharfe Abgrenzung mehr bedeutet. Daher wird für diese Systeme eine andere Wahl des Generators bzw. eine andere Definition des Diagonalteils des Hamiltonoperators benötigt.

2.2 Wahl des Generator bei endlicher Temperatur

Bei endlicher Temperatur kann der Generator durch Anwendung der Gradientenmethode [15] bestimmt werden. Hierzu wird eine quadratische Form des Hamiltonoperators

$$G(H) = \frac{1}{2} \sum g_{ij,kl} H_{ji} H_{lk} \quad (2.10)$$

eingeführt. Im folgenden wird diese Form $G(H)$ so bestimmt, daß sie unter Anwendung der Flußgleichungen für $l \rightarrow \infty$ ein Minimum erreicht. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wird

$$g_{ij,kl} = g_{kl,ij} \quad (2.11)$$

vorausgesetzt. Aus der Bedingung, daß G reell sein soll und der Hamiltonoperator hermitesch ist, ergibt sich

$$g_{ij,kl} = g_{ji,lk}^* \quad (2.12)$$

Wendet man die Methode der Flußgleichungen auf G an, so erhält man die Differentialgleichung

$$\begin{aligned} \frac{dG}{dl} &= \sum g_{ij,kl} (\eta_{jm} H_{mi} - H_{jm} \eta_{mi}) H_{lk} \\ &= \sum \eta_{ji} (g_{mj,kl} H_{im} H_{lk} - g_{im,kl} H_{mj} H_{lk}) \end{aligned} \quad (2.13)$$

Um das Minimum für G zu erreichen, muß dG/dl (semi-)negativ sein. Daher wird der Generator

$$\begin{aligned} \eta_{ji} &= -(g_{mj,kl} H_{im} H_{lk} - g_{im,kl} H_{mj} H_{lk})^* \\ &= -g_{jm,lk} H_{mi} H_{kl} + g_{mi,lk} H_{jm} H_{kl} \end{aligned} \quad (2.14)$$

gewählt. Mit der neuen Definition der nichtdiagonalen Beiträge zum Hamiltonoperator

$$H_{ji}^r = g_{ji,lk} H_{kl} \quad (2.15)$$

erhält man wieder Gleichung (2.9) zur Bestimmung des Generators.

Während bislang der Außerdiagonalteil des Hamiltonoperators durch die Nicht-Erhaltung der Anzahl der Quasiteilchen definiert war, wird bei der Gradientenmethode der Außerdiagonalteil durch die Wahl von g bestimmt. Für die Beiträge, die erhalten bleiben sollen, verschwinden die Eigenwerte von g . Um zu gewährleisten, daß G unter dem Fluß abnimmt, müssen die übrigen Eigenwerte positiv sein. Dies wird durch die Wahl einer quadratischen Form für g erreicht. Hierzu ist die Bildung des Doppelkommutators des Hamiltonoperators mit dem hermiteschen Operator v geeignet

$$H^r = [v, [v, H]] \quad (2.16)$$

Dadurch werden alle Beiträge als diagonal angesetzt, die mit dem Operator v kommutieren.

Um sich die Wirkung von v besser vorstellen zu können, betrachtet man z.B. für v den Operator der Quasiteilchenanzahl. Wenn in dem Hamiltonoperator das Matrixelement H_{ij} die Zustände mit v_i und v_j Quasiteilchen verbindet, dann ist $H_{ij}^r = (v_i - v_j)^2 H_{ij}$ der Beitrag im Außerdiagonalteil. Für die Matrix g ergibt sich in Übereinstimmung mit den Bedingungen (2.11-2.12)

$$g_{ji,lk} = (v^2)_{jk} \delta_{li} - 2v_{jk} v_{li} + \delta_{jk} (v^2)_{li} \quad (2.17)$$

In H^r treten demnach nur Terme auf, in denen durch die Wechselwirkung die Anzahl der Quasiteilchen verändert wird. Für diese Wahl des Operators v entspricht die Methode der in Abschnitt (2.1) gemachten Definition von Diagonal- und Außerdiagonalteil für $T = 0$. Dies stellt nur eine mögliche Wahl des Operators v dar, es gibt jedoch noch weitere Möglichkeiten, die für endliche Temperaturen angewendet werden können.

Um ein System bei endlichen Temperaturen zu beschreiben, muß beachtet werden, daß hier die Fermikante keine scharfe Linie ist. Dadurch versagt das Konzept der Erhaltung der Anzahl der Quasiteilchen. Hier ist es sinnvoll, fermionische Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren zur Beschreibung des Systems zu benutzen. Dann wird anstelle des Operators der Quasiteilchenanzahl eine Summe von Einteilchenoperatoren für v verwendet

$$v = \sum v_k c_k^\dagger c_k \quad (2.18)$$

Nach Einführung der Eliminationsfunktion

$$r_{k_1 k_2 \dots q_1 q_2 \dots} = (v_{k_1} + v_{k_2} + \dots - v_{q_1} - v_{q_2} - \dots)^2 \quad (2.19)$$

wobei die Impulse k_1, k_2, \dots zu Erzeugungsoperatoren und q_1, q_2, \dots zu Vernichtungsoperatoren gehören, erhält man die außerdiagonalen Beiträge zum Hamiltonoperator

$$H_{k_1 k_2 \dots q_1 q_2 \dots}^r = r_{k_1 k_2 \dots q_1 q_2 \dots} H_{k_1 k_2 \dots q_1 q_2 \dots} \quad (2.20)$$

Die Eliminationsfunktion verschwindet für diagonale Beiträge. Je mehr ein Beitrag als nichtdiagonal angesehen wird, um so größer ist die Eliminationsfunktion für diesen. Während bei der Aufteilung zwischen Diagonal- und Nichtdiagonalteil bei $T = 0$ die Eliminationsfunktion nur die Werte $r = 0$ (diagonal) und $r = 1$ (nichtdiagonal) annehmen kann, findet hier ein kontinuierlicher Übergang statt. Die Größe der Eliminationsfunktion ist ein Indikator für die Dringlichkeit der Entfernung dieser Beiträge. Daher wird mit diesem Verfahren auch eine Reihenfolge eingeführt, in der die nichtdiagonalen Beiträge transformiert werden. Bricht man allerdings die Flußgleichungen durch eine störungstheoretische Betrachtung in niedriger Ordnung ab, so wird durch die gemachten Näherungen die Reihenfolge der Transformation teilweise aufgehoben.

Es kann notwendig sein, anstatt der v_k für die Operatoren mehrere Koeffizienten v_k^α einzuführen, um alle Bedingungen an die Eliminationsfunktion zur Definition von H^d und H^r erfüllen zu können. Dann erhält man den Nichtdiagonalteil des Hamiltonoperators durch

$$H^r = \sum_{\alpha} [v^{\alpha}, [v^{\alpha}, H]] \quad (2.21)$$

mit

$$v^{\alpha} = \sum_k v_k^{\alpha} c_k^{\dagger} c_k \quad . \quad (2.22)$$

Die Eliminationsfunktion bekommt die Form

$$r_{k_1 k_2 \dots q_1 q_2 \dots} = \sum_{\alpha} (v_{k_1}^{\alpha} + v_{k_2}^{\alpha} + \dots - v_{q_1}^{\alpha} - v_{q_2}^{\alpha} - \dots)^2 \quad . \quad (2.23)$$

Wenn man für die Beiträge zum Operator v_k^{α} die Funktionen

$$v_k^{\alpha} = (1 - p^2)^{1/4} \frac{p^{\alpha/2} H_{\alpha}(k/k_0)}{2^{\alpha/2} \sqrt{\alpha!}} \exp\left(-pk^2 / ((1 + p)k_0^2)\right) \quad (2.24)$$

mit den Hermite-Polynomen $H_{\alpha}(x)$ wählt, wobei in d Dimensionen Produkte von d Funktionen benötigt werden

$$v_{\mathbf{k}}^{\alpha_1 \dots \alpha_d} = v_{k_1}^{\alpha_1} \dots v_{k_d}^{\alpha_d} \quad , \quad (2.25)$$

so erhält man für die Eliminationsfunktion

$$r_{k_1 k_2 \dots q_1 q_2 \dots} = \sum_{i,j} r(k_i, k_j) - 2 \sum_{i,j} r(k_i, q_j) + \sum_{i,j} r(q_i, q_j) \quad (2.26)$$

$$r(k, k') = \exp\left(-\frac{p}{1 - p^2} (k - k')^2 / k_0^2\right) \quad (2.27)$$

mit den Parametern p und k_0 , die je nach Fragestellung geeignet gewählt werden.

Die so bestimmte Eliminationsfunktion hat die folgenden Eigenschaften:

- Wenn zwei Impulse k eines Erzeugers und q eines Vernichters gleich sind, ist der Beitrag Null und r verändert sich nicht durch die Entfernung dieser beiden Operatoren. Daraus folgt, daß die Eliminationsfunktion verschwindet, wenn alle Impulse k und q paarweise identisch sind. D.h. die Multiplikation eines Terms mit dem Besetzungszahloperator $c_k^\dagger c_k$ verändert r nicht, besteht ein Matrixelement ausschließlich aus verschiedenen Besetzungszahloperatoren, so verschwindet r und dieses Matrixelement bleibt erhalten.
- Wenn für alle Impulse $k - k' \gg k_0$ in (2.27) gilt, so tragen in (2.26) nur die Beiträge mit $i = j$ bei. Die Eliminationsfunktion ist näherungsweise gegeben durch die Summe der Anzahl der Erzeuger und Vernichter.
- Wenn die Anzahl der Erzeuger und Vernichter verschieden ist, ist der Faktor r für annähernd gleiche Impulse das Quadrat der Differenz der Anzahl an Erzeugern und Vernichtern.
- Aus der allgemeinen Definition der Eliminationsfunktion in (2.19) ergeben sich außerdem die Symmetrierelationen für die Vertauschung der Indices

$$r_{k_1 k_2 q_1 q_2} = r_{k_2 k_1 q_1 q_2} = r_{k_1 k_2 q_2 q_1} = r_{q_1 q_2 k_1 k_2} \quad . \quad (2.28)$$

Im Verlauf dieser Arbeit sind supraleitende und antiferromagnetische Zustände von Interesse. Daher muß sichergestellt werden, daß die für die Supraleitung verantwortlichen Paare von Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren mit verschwindendem Gesamtimpuls $c_k^\dagger c_{-k}^\dagger$ bzw. $c_q c_{-q}$ erhalten bleiben. Dies kann erreicht werden, indem die Summation in (2.23) nur über ungerade α durchgeführt wird. In d Dimensionen werden nur Beiträge berücksichtigt, in denen $\alpha_1 + \dots + \alpha_d$ ungerade ist. Da die Hermite-Polynome für gerade bzw. ungerade α gerade bzw. ungerade Funktionen in k sind, gilt für v_k

$$v_k^\alpha = -v_{-k}^\alpha \quad \alpha \text{ ungerade.} \quad (2.29)$$

Durch diese weitere Vorgabe für die Eliminationsfunktion verändert sich (2.27) in

$$r(k, k') = \frac{1}{2} \left(\exp \left(-\frac{p}{1-p^2} (k - k')^2 / k_0^2 \right) - \exp \left(-\frac{p}{1-p^2} (k + k')^2 / k_0^2 \right) \right) \quad (2.30)$$

Um Antiferromagnetismus untersuchen zu können, müssen die Terme der Form $c_k^\dagger c_{k+q_0}$ mit $q_0 = (\pi, \pi)$ erhalten bleiben. Dies wird erreicht durch die Bedingung

$$v_k^\alpha = v_{k+q_0}^\alpha \quad . \quad (2.31)$$

Durch diese Bedingungen an die Eliminationsfunktion bleibt diese zusätzlich auch bei Multiplikation mit Termen der Form $c_k^\dagger c_{-k}^\dagger$ bzw. $c_q c_{-q}$ und $c_k^\dagger c_{k+q_0}$ unverändert. Besteht ein Matrixelement nur aus o.g. Beiträgen oder Einteilchenoperatoren, so ist es erhalten.

Insgesamt sind durch die Einführung der Bedingungen (2.29) und (2.31) die Teilchen-Teilchen-Kanäle und die Teilchen-Loch-Kanäle sowohl mit verschwindendem Gesamtimpuls als auch mit Impuls $q_0 = (\pi, \pi)$ erhalten. Für diese Wechselwirkungskanäle werden im Hubbardmodell die freien Energien berechnet und die Stabilität des Systems untersucht.

2.3 Flußgleichungen in 2. Ordnung Störungstheorie

Wendet man die Methode der Flußgleichungen auf einen beliebigen Hamiltonoperator an, so ist nicht zu erwarten, daß sich geschlossene Gleichungen ergeben. Durch die Berechnung der Kommutatoren treten in der Regel höhere Wechselwirkungen auf, die im Anfangshamiltonoperator nicht vorhanden sind.

In diesem Abschnitt werden die Flußgleichungen für einen Hamiltonoperator mit Einteilchenenergien H_1 und Zweiteilchenwechselwirkungen H_2 bis zur 2. Ordnung Störungstheorie berechnet.

Der Hamiltonoperator wird mit den normalgeordneten Operatoren

$$N_{kq} = \frac{1}{2} \sum_s c_{ks}^\dagger c_{qs} \quad (2.32)$$

$$N_{kq} = \delta_{k,q} n_k + : N_{kq} : \quad (2.33)$$

beschrieben. Hierbei sind c_{ks}^\dagger und c_{ks} die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Fermionen mit Impuls $k = (k_x, k_y)$ und Spin $s \in \{\uparrow, \downarrow\}$, n_k ist die Grundzustandsbesetzungszahl des freien Systems.

Der Hamiltonoperator erhält die Form

$$H = H_1 + H_2 \quad (2.34)$$

$$H_1 = 2 \sum_k \epsilon_k : N_{kk} : \quad (2.35)$$

$$H_2 = \frac{2}{N} \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ q_1 q_2}} V_{k_1 k_2 q_1 q_2} : N_{k_1 q_1} N_{k_2 q_2} : \quad , \quad (2.36)$$

wobei ϵ_k die Energie eines nichtwechselwirkenden Teilchen mit Impuls k und $V_{k_1 k_2 q_1 q_2}$ die Zweiteilchenwechselwirkung sind. Dabei werden sowohl Energie als auch Zweiteilchenwechselwirkung als unabhängig vom Spin s angenommen. N ist das Volumen bzw. die Anzahl der Gitterplätze in der 1. Brillouinzone.

Die Berechnung der Flußgleichungen kann in verschiedene Teile gegliedert werden.

$$\begin{aligned} \frac{dH(l)}{dl} &= [\eta(l), H(l)] \\ &= [[H_1(l) + H_2(l), H_2^r(l)], H_1(l) + H_2(l)] \end{aligned} \quad (2.37)$$

Im folgenden werden die Beiträge zu den Flußgleichungen für die Einteilchenenergien und Zweiteilchenwechselwirkungen nach Potenzen der Wechselwirkungsstärke V angeordnet.

Um die Flußgleichungen zu berechnen, ist es zunächst notwendig, den Generator der Transformation

$$\begin{aligned}\eta(l) &= [H(l), H^r(l)] \\ &= [H_1(l), H_2^r(l)] + [H_2(l), H_2^r(l)]\end{aligned}\quad (2.38)$$

zu ermitteln. Zur Berechnung der Kommutatoren verwendet man die Gleichungen (A.4) und (A.6). Bei der Berechnung des Kommutators zwischen den Zweiteilchenwechselwirkungen fällt auf, daß aufgrund der Symmetrie (2.28) die Eliminationsfunktion in allen Einteilchenbeiträgen gleich ist und sich diese Beiträge gegenseitig aufheben. Für den Generator treten nur Beiträge im Zweiteilchenkanal auf. Dies stimmt mit dem Ansatz eines antihermiteschen Operators für η überein.

$$\begin{aligned}\eta(l) &= [H_1, H_2^r] + [H_2, H_2^r] \\ &= \frac{2}{N} \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ q_1 q_2}} (Vr \Delta \epsilon)_{k_1 k_2 q_1 q_2} : N_{k_1 q_1} N_{k_2 q_2} : \\ &\quad + \frac{2}{N^2} \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ q_1 q_2}} \sum_{k_3 q_3} : N_{k_1 q_1} N_{k_2 q_2} : \\ &\quad \times \left(2(n_{k_3} - n_{q_3})(V_{k_3 k_1 q_3 q_1} (Vr)_{q_3 k_2 k_3 q_2} - V_{q_3 k_2 k_3 q_2} (Vr)_{k_3 k_1 q_3 q_1}) \right. \\ &\quad - (n_{k_3} - n_{q_3})(V_{k_3 k_1 q_3 q_1} (Vr)_{q_3 k_2 q_2 k_3} - V_{q_3 k_2 q_2 k_3} (Vr)_{k_3 k_1 q_3 q_1}) \\ &\quad - (n_{k_3} - n_{q_3})(V_{k_1 k_3 q_3 q_1} (Vr)_{q_3 k_2 k_3 q_2} - V_{q_3 k_2 k_3 q_2} (Vr)_{k_1 k_3 q_3 q_1}) \\ &\quad + (1 - n_{k_3} - n_{q_3})(V_{k_1 k_2 k_3 q_3} (Vr)_{k_3 q_3 q_1 q_2} - V_{k_3 q_1 q_1 q_2} (Vr)_{k_1 k_1 k_3 q_3}) \\ &\quad \left. - (n_{k_3} - n_{q_3})(V_{k_3 k_1 q_2 q_3} (Vr)_{k_2 q_3 k_3 q_1} - V_{k_2 q_3 k_3 q_1} (Vr)_{k_3 k_1 q_2 q_3}) \right)\end{aligned}\quad (2.39)$$

$$= \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ q_1 q_2}} (\eta_{k_1 k_2 q_1 q_2}^{(1)} + \eta_{k_1 k_2 q_1 q_2}^{(2)}) : N_{k_1 q_1} N_{k_2 q_2} : \quad (2.40)$$

mit der Energiedifferenz

$$(\Delta \epsilon)_{k_1 k_2 q_1 q_2} = \epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - \epsilon_{q_1} - \epsilon_{q_2} \quad . \quad (2.41)$$

Die Aufteilung ist so gewählt worden, daß $\eta^{(1)}$ Beiträge zur Ordnung V enthält, $\eta^{(2)}$ zur Ordnung V^2 .

Nun folgt die Berechnung der Kommutatoren für die Flußgleichungen

$$\begin{aligned}\frac{dH(l)}{dl} &= [\eta(l), H(l)] \\ &= [\eta^{(1)}(l) + \eta^{(2)}(l), H_1(l)] + [\eta^{(1)}(l) + \eta^{(2)}(l), H_2(l)] \quad . \quad (2.42)\end{aligned}$$

Dabei ist der Term $[\eta^{(2)}, H_2]$ von dritter Ordnung in der Wechselwirkung und wird im folgenden nicht mehr berücksichtigt.

Die Flußgleichungen für die Beiträge zur Einteilchenenergie bis zur Ordnung V^2 lauten

$$\begin{aligned} \frac{d\epsilon_k(l)}{dl} = & \frac{1}{N} \sum_{k_2 k_3 k_4} (n_{k_2} (1 - n_{k_3} - n_{k_4}) + n_{k_3} n_{k_4}) \\ & \times \left((\eta_{k_2 k k_3 k_4}^{(1)} V_{k_3 k_4 k_2 k} - \eta_{k_3 k_4 k_2 k}^{(1)} V_{k_2 k k_3 k_4}) \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} (\eta_{k_2 k k_3 k_4}^{(1)} V_{k_4 k_3 k_2 k} - \eta_{k_4 k_3 k_2 k}^{(1)} V_{k_2 k k_3 k_4}) \right) \quad . \quad (2.43) \end{aligned}$$

In erster Ordnung in der Wechselwirkungsstärke V treten keine Veränderungen der Einteilchenenergien auf. Erst die Beiträge zweiter Ordnung in V modifizieren die Einteilchenenergien $\epsilon_k^{(2)}$. Da jedoch die Flußgleichungen für die Zweiteilchenwechselwirkungen ebenfalls nur bis zur Ordnung V^2 betrachtet werden, erfolgt keine Rückkopplung durch $\epsilon_k^{(2)}$. Von einer genaueren Untersuchung der Einteilchenenergien wird im Rahmen dieser Arbeit abgesehen.

Die Flußgleichungen für die Zweiteilchenwechselwirkungen bis zu zweiter Ordnung in V sind

$$\begin{aligned} \frac{dV_{k_1 k_2 q_1 q_2}(l)}{dl} = & -(Vr(\Delta\epsilon)^2)_{k_1 k_2 q_1 q_2} \\ & + \frac{1}{N} \sum_{k_3 q_3} \\ & \times \left(2(n_{k_3} - n_{q_3}) ((Vr\Delta\epsilon)_{k_3 k_1 q_3 q_1} V_{q_3 k_2 k_3 q_2} - (Vr\Delta\epsilon)_{q_3 k_2 k_3 q_2} V_{k_3 k_1 q_3 q_1}) \right. \\ & - (n_{k_3} - n_{q_3}) ((Vr\Delta\epsilon)_{k_3 k_1 q_3 q_1} V_{q_3 k_2 q_2 k_3} - (Vr\Delta\epsilon)_{q_3 k_2 q_2 k_3} V_{k_3 k_1 q_3 q_1}) \\ & - (n_{k_3} - n_{q_3}) ((Vr\Delta\epsilon)_{k_1 k_3 q_3 q_1} V_{q_3 k_2 k_3 q_2} - (Vr\Delta\epsilon)_{q_3 k_2 k_3 q_2} V_{k_1 k_3 q_3 q_1}) \\ & + (1 - n_{k_3} - n_{q_3}) ((Vr\Delta\epsilon)_{k_1 k_2 k_3 q_3} V_{k_3 q_3 q_1 q_2} - (Vr\Delta\epsilon)_{k_3 q_1 q_1 q_2} V_{k_1 k_1 k_3 q_3}) \\ & \left. - (n_{k_3} - n_{q_3}) ((Vr\Delta\epsilon)_{k_3 k_1 q_2 q_3} V_{k_2 q_3 k_3 q_1} - (Vr\Delta\epsilon)_{k_2 q_3 k_3 q_1} V_{k_3 k_1 q_2 q_3}) \right) \\ & - (\eta^{(2)} \Delta\epsilon)_{k_1 k_2 q_1 q_2} \quad (2.44) \\ = & -(Vr(\Delta\epsilon)^2)_{k_1 k_2 q_1 q_2} \\ & + \frac{1}{N} \sum_{k_3 q_3} \left(2(n_{k_3} - n_{q_3}) f(k_3, k_1, q_3, q_1; q_3, k_2, k_3, q_2; l) \right. \\ & - (n_{k_3} - n_{q_3}) f(k_3, k_1, q_3, q_1; q_3, k_2, q_2, k_3; l) \\ & - (n_{k_3} - n_{q_3}) f(k_1, k_3, q_3, q_1; q_3, k_2, k_3, q_2; l) \\ & + (1 - n_{k_3} - n_{q_3}) f(k_1, k_2, k_3, q_3; k_3, q_3, q_1, q_2; l) \\ & \left. - (n_{k_3} - n_{q_3}) f(k_3, k_1, q_2, q_3; k_2, q_3, k_3, q_1; l) \right) \quad (2.45) \end{aligned}$$

mit

$$f(\{a\}; \{b\}; l) = V(\{a\}; l)V(\{b\}; l) \times (r(\{a\})(2\Delta\epsilon(\{a\}) + \Delta\epsilon(\{b\})) - r(\{b\})(2\Delta\epsilon(\{b\}) + \Delta\epsilon(\{a\}))) \quad (2.46)$$

Dabei ist zu beachten, daß für alle Impulsfigurationen $\{a\}$ und $\{b\}$, die in (2.45) vorkommen,

$$\Delta\epsilon(\{a\}) + \Delta\epsilon(\{b\}) = (\Delta\epsilon)_{k_1 k_2 q_1 q_2} \quad (2.47)$$

gilt und mit dieser Relation der Beitrag $\eta^{(2)}\Delta\epsilon$ aufgespalten werden kann und in der Funktion f enthalten ist.

Betrachtet man die Änderung der Zweiteilchenwechselwirkung in 1. Ordnung in V , so erhält man die Lösung

$$V_{k_1 k_2 q_1 q_2}^{(1)}(l) = V(0)_{k_1 k_2 q_1 q_2} \exp\left(-l(r(\Delta\epsilon)^2)_{k_1 k_2 q_1 q_2}\right) \quad (2.48)$$

$V^{(1)}$ nimmt abhängig von der Eliminationsfunktion und der Energiedifferenz exponentiell ab mit wachsendem Flußparameter l .

Nun setzt man die erhaltene Lösung der 1. Ordnung in die Flußgleichungen ein. Betrachtet werden die Terme, die erhalten bleiben sollen, d.h. für die die Bedingung $r_{k_1 k_2 q_1 q_2} = 0$ gilt.

Mit dieser zusätzlichen Bedingung kann die Integration über den Flußparameter l durchgeführt werden, somit erhält man

$$V_{k_1 k_2 q_1 q_2}^{(2)}(\infty) = \frac{1}{N} \sum_{k_3 q_3} \left(\begin{aligned} &2(n_{k_3} - n_{q_3})F(k_3, k_1, q_3, q_1; q_3, k_2, k_3, q_2; l) \\ &- (n_{k_3} - n_{q_3})F(k_3, k_1, q_3, q_1; q_3, k_2, q_2, k_3; l) \\ &- (n_{k_3} - n_{q_3})F(k_1, k_3, q_3, q_1; q_3, k_2, k_3, q_2; l) \\ &+ (1 - n_{k_3} - n_{q_3})F(k_1, k_2, k_3, q_3; k_3, q_3, q_1, q_2; l) \\ &- (n_{k_3} - n_{q_3})F(k_3, k_1, q_2, q_3; k_2, q_3, k_3, q_1; l) \end{aligned} \right) \quad (2.49)$$

mit

$$F(\{a\}; \{b\}; l) = V(\{a\}; l)V(\{b\}; l) \times \frac{r(\{a\})(2\Delta\epsilon(\{a\}) + \Delta\epsilon(\{b\})) - r(\{b\})(2\Delta\epsilon(\{b\}) + \Delta\epsilon(\{a\}))}{r(\{a\})\Delta\epsilon(\{a\})^2 + r(\{b\})\Delta\epsilon(\{b\})^2} \quad (2.50)$$

Als Anfangsbedingung für die Wechselwirkung wird

$$V(0)_{k_1 k_2 q_1 q_2} = U\delta_{k_1+k_2, q_1+q_2} \quad (2.51)$$

gesetzt.

Mit den Symmetrierelationen (2.28) für r und den entsprechenden Überlegungen zur Energiedifferenz $\Delta\epsilon$

$$(\Delta\epsilon)_{k_1 k_2 q_1 q_2} = (\Delta\epsilon)_{k_2 k_1 q_1 q_2} = (\Delta\epsilon)_{k_1 k_2 q_2 q_1} = -(\Delta\epsilon)_{q_1 q_2 k_1 k_2} \quad (2.52)$$

genügt die Funktion F folgenden Bedingungen

$$F(a_1, a_2, a_3, a_4; \{b\}; l) = F(a_2, a_1, a_3, a_4; \{b\}; l) = F(a_1, a_2, a_4, a_3; \{b\}; l) \quad (2.53)$$

$$F(\{a\}; b_1, b_2, b_3, b_4; l) = F(\{a\}; b_2, b_1, b_3, b_4; l) = F(\{a\}; b_2, b_1, b_3, b_4; l) \quad (2.54)$$

Damit heben sich die ersten drei Terme in (2.49) weg und es bleibt

$$V_{k_1 k_2 q_1 q_2}^{(2)}(\infty) = \frac{1}{N} \sum_{k_3 q_3} \left((1 - n_{k_3} - n_{q_3}) F(k_1, k_2, k_3, q_3; k_3, q_3, q_1, q_2; l) - (n_{k_3} - n_{q_3}) F(k_3, k_1, q_2, q_3; k_2, q_3, k_3, q_1; l) \right) \quad (2.55)$$

Betrachtet man nur Beiträge mit $r_{k_1 k_2 q_1 q_2} = 0$, so gilt für die Eliminationsfunktion in (2.55)

$$r(\{a\}) = r(\{b\}) \quad (2.56)$$

Hieraus folgt, daß sich die Eliminationsfunktion herauskürzt und die explizite Form der Funktion nicht in die Berechnungen einfließt. Dies schließt die Abhängigkeit von einer willkürlich gewählten Eliminationsfunktion aus. In die Berechnungen sind lediglich die beiden Bedingungen an die Eliminationsfunktion (2.29) und (2.31) eingegangen, die dafür sorgen, daß die für die Supraleitung und den Antiferromagnetismus relevanten Terme erhalten bleiben.

Die Gleichung für die Funktion F vereinfacht sich unter Berücksichtigung von (2.56) zu

$$F(\{a\}; \{b\}; l) = V(\{a\}; l) V(\{b\}; l) \frac{\Delta\epsilon(\{a\}) - \Delta\epsilon(\{b\})}{\Delta\epsilon(\{a\})^2 + \Delta\epsilon(\{b\})^2} \quad (2.57)$$

Damit erhält die effektive Wechselwirkung für die Terme mit $r_{k_1 k_2 q_1 q_2} = 0$ die Form

$$V_{k_1 k_2 q_1 q_2}^{(2)}(\infty) = \frac{1}{N} U^2 \sum_{k_3 q_3} \left((1 - n_{k_3} - n_{q_3}) \delta_{k_1+k_2, k_3+q_3} \times \frac{(\Delta\epsilon)_{k_1 k_2 k_3 q_3} - (\Delta\epsilon)_{k_3 q_3 q_1 q_2}}{(\Delta\epsilon)_{k_1 k_2 k_3 q_3}^2 + (\Delta\epsilon)_{k_3 q_3 q_1 q_2}^2} - (n_{k_3} - n_{q_3}) \delta_{k_3+k_1, q_2+q_3} \times \frac{(\Delta\epsilon)_{k_3 k_1 q_2 q_3} - (\Delta\epsilon)_{k_2 q_3 k_3 q_1}}{(\Delta\epsilon)_{k_2 q_3 k_3 q_1}^2 + (\Delta\epsilon)_{k_3 k_1 q_2 q_3}^2} \right) \quad (2.58)$$

Nach der Erweiterung der Flußgleichungen für endliche Temperaturen und Kalkulation bis zur 2. Ordnung Störungstheorie erhält man mit (2.58) eine Gleichung für die als diagonal angesetzten Zweiteilchenwechselwirkungen. Nach der Einführung des Hubbardmodells

wird diese Gleichung in den verschiedenen betrachteten Wechselwirkungskanälen ausgewertet.

Vorher sind noch die freien Parameter Energie und Wechselwirkungsstärke zu bestimmen. Sie werden im nächsten Kapitel mit den Parametern des Hubbardmodells verknüpft.

Kapitel 3

Das Hubbardmodell

Das Hubbardmodell beschreibt ein stark wechselwirkendes Elektronensystem. Zunächst wird das Hubbardmodell eingeführt und sein Verhalten in verschiedenen Bereichen des Phasendiagramms beschrieben. Durch eine Transformation in den Impulsraum werden die Parameter des Hubbardmodells mit der effektiven Wechselwirkung verbunden.

3.1 Einführung des Hubbardmodells

Das Hubbardmodell wurde 1963 unabhängig voneinander von Hubbard [9], Gutzwiller [10] und Kanamori [11] vorgeschlagen. Für die Einführung des Hubbardmodells wurden im wesentlichen drei Annahmen getroffen:

- Das Modell wird in einem streng periodischen Gitter betrachtet. Die kinetische Energie der Elektronen, also die Bandstruktur, wird dadurch beschrieben, daß die Elektronen von einem Gitterplatz auf einen anderen hüpfen können. In dieser Arbeit wird das Ein-Band-Hubbardmodell untersucht, die Zustände der anderen Bänder werden vernachlässigt. Wenn die Bandstruktur der Energiebänder derart ist, daß die Fermifläche nur ein Energieband schneidet, kann dieses Modell somit die niedrig liegenden Anregungen beschreiben.
- Die langreichweitige Coulombwechselwirkung wird durch eine kurzreichweitige Elektron-Elektron-Wechselwirkung ersetzt, die nur dann wirkt, wenn beide Elektronen denselben Gitterplatz besetzen. Dies kann dadurch motiviert werden, daß die Coulombwechselwirkungen durch die übrigen Elektronen des Gitters, die in demselben Energieband liegen, abgeschirmt wird.
- Die Wechselwirkung der Elektronen mit den Phononen wird vernachlässigt, d.h. der Effekt der Gitterschwingungen bleibt außer Acht.

Dadurch ist zu erwarten, daß mit Hilfe des Hubbardmodells die Phänomene, die auf einer kurzreichweitigen Elektron-Elektron-Wechselwirkung und der Gitterstruktur des Festkörpers beruhen, beschrieben werden können. Schon 1963 wurde es zur Beschreibung von Übergangsmetallen, des Metall-Isolator-Übergangs und des Ferromagnetismus verwendet. Neben dem Ferromagnetismus zeigt das Hubbardmodell Antiferromagnetismus, Ferrimagnetismus und Paramagnetismus. Seit der Entdeckung der Hochtemperatursupraleitung wird es auch zur Erklärung der Eigenschaften dieser Materialien in den nichtsupraleitenden Phasen herangezogen, außerdem beinhaltet es auch d-Wellen-Supraleitung.

Das zweidimensionale Hubbardmodell besitzt in Ortsdarstellung den Hamiltonoperator

$$H = \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} \sum_s t_{\mathbf{i}\mathbf{j}} c_{\mathbf{i}s}^\dagger c_{\mathbf{j}s} + U' \sum_{\mathbf{j}} n_{\mathbf{j}\uparrow} n_{\mathbf{j}\downarrow} \quad . \quad (3.1)$$

$c_{\mathbf{i}s}^\dagger$ and $c_{\mathbf{i}s}$ sind die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Fermionen mit Spinprojektion $s \in \{\uparrow, \downarrow\}$ auf dem Gitterplatz \mathbf{i} . $n_{\mathbf{j}\uparrow}$ ist die Besetzungszahl des Gitterplatzes \mathbf{j} mit Spin \uparrow . Das Hubbardmodell enthält die Hüpfamplitude

$$t_{\mathbf{i}\mathbf{j}} = \begin{cases} -t & \mathbf{i}, \mathbf{j} \text{ nächste Nachbarn} \\ -t' & \mathbf{i}, \mathbf{j} \text{ übernächste Nachbarn} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.2)$$

und die repulsive Wechselwirkung $U' > 0$. U' entspricht der Coulombwechselwirkung zweier Elektronen auf demselben Gitterplatz, durch diesen Term wird die doppelte Besetzung der Gitterplätze unterdrückt.

Auf den ersten Blick erscheinen im Hubbardmodell nur die Hüpfamplituden t und t' sowie die Coulombabstoßung U' als freie Parameter. Diese sind nicht unabhängig voneinander, vielmehr hängt das Modell nur von den Quotienten t'/t und U'/t ab. Dennoch sind weitere Parameter für die Eigenschaften entscheidend, zum einen die Elektronendichte oder das chemische Potential, zum anderen die Struktur des Gitters, auf dem das Modell betrachtet wird.

Aufgrund von Untersuchungen mit verschiedenen Methoden ist über das Phasendiagramm des Hubbardmodells auf dem Quadratgitter folgendes bekannt:

Bei genügend starker Wechselwirkung kann man zeigen, daß im Hubbardmodell bei halber Füllung bei jedem Atom ein Elektron lokalisiert ist. In diesem Zustand, in dem jeder Gitterplatz einfach besetzt ist, sind virtuelle Hüpfprozesse möglich, deren Energiegewinn von der Größenordnung t^2/U' ist. Allerdings ist dieses Hüpfen aufgrund des Fermiprinzips lediglich dann möglich, wenn die Elektronen auf benachbarten Gitterplätzen entgegengesetzten Spin besitzen. Das bedeutet, die Energieabsenkung durch virtuelle Hüpfprozesse erhält man nur für eine antiferromagnetische Ordnung, das Hubbardmodell ist im Néelzustand.

Entfernt man sich von der halben Füllung, so wird der antiferromagnetische Grundzustand durch die Bewegung der Löcher und Elektronen destabilisiert. Durch die kurzreichweitige

repulsive Coulombwechselwirkung kann Supraleitung entstehen, man nennt dieses Phänomen Kohn-Luttinger-Instabilität. Diese Supraleitung tritt allerdings nicht wie im Fall der BCS-Theorie mit einem isotropen Ordnungsparameter auf. Bei der Kohn-Luttinger-Instabilität besitzt der Ordnungsparameter eine Symmetrie, die einem höheren Drehimpuls entspricht. Scalapino [12] gibt einen Überblick über die d-Wellen-Supraleitung. Ein Beispiel für die Untersuchung der Supraleitung mit Hilfe des Hubbardmodells ist die Renormalisierungsgruppenanalyse von Halboth und Metzner [13], mit dieser Methode kann außerdem eine Pomeranchuk-Instabilität nachgewiesen werden, die für den Phasenübergang vom orthorhombischen zum tetragonalen System verantwortlich ist [14].

Das Phasendiagramm des Hubbardmodells spiegelt demnach die wesentlichen experimentell ermittelten Merkmale der Hochtemperatursupraleiter wieder. Daher wird dieses Modell mit Hilfe der Methode der Flußgleichungen betrachtet und die erhaltenen Resultate mit den bereits bekannten Ergebnissen verglichen.

Für weitere Berechnungen ist eine Transformation von der Wannierdarstellung in die Blochdarstellung erforderlich, um einen Hamiltonoperator der Form (2.34-2.36) zu erhalten.

$$\begin{aligned}
 H &= 2 \sum_k \epsilon_k : N_{kk} : \\
 &+ \frac{2}{N} \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ q_1 q_2}} V_{k_1 k_2 q_1 q_2} : N_{k_1 q_1} N_{k_2 q_2} :
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

Die Energie eines nichtwechselwirkenden Teilchens ist über die Dispersionsrelation mit der Hüpfamplitude verbunden.

$$\epsilon_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - 4t'(\cos k_x \cos k_y) \tag{3.4}$$

Die Dispersionsrelation besitzt Sattelpunkte für $k = (0, \pi)$ und $k = (\pi, 0)$. Diese führen zu van-Hove-Singularitäten in der nichtwechselwirkenden Zustandsdichte für die Energie $\epsilon_{vH} = 4t'/t$.

Für die Zweiteilchenwechselwirkung erhält man durch die Transformation die Relation

$$V_{k_1 k_2 q_1 q_2} = \frac{U'}{N} \delta_{k_1+k_2, q_1+q_2} \tag{3.5}$$

$$= U \delta_{k_1+k_2, q_1+q_2} \tag{3.6}$$

Da für die auftretenden Phänomene die Anregungen nahe der Fermienergie relevant sind, ist es sinnvoll, die aus (3.4) resultierende Form der Fermifläche zu diskutieren. Betrachtet man die Fermikante des zweidimensionalen Hubbardmodells für verschiedene Hüpfamplituden und chemische Potentiale in Abb. (3.1), so erhält man die folgenden Ergebnisse:

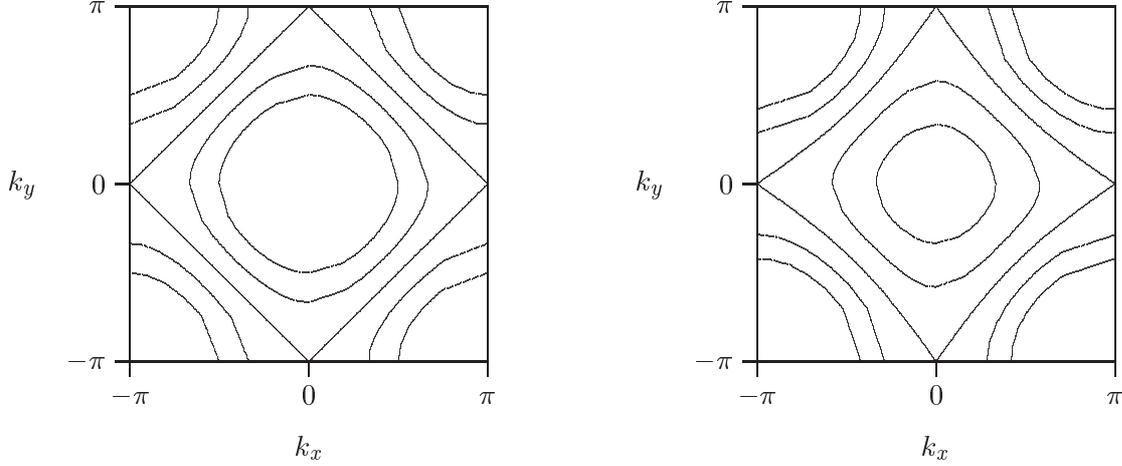


Abbildung 3.1: Fermifläche des nichtwechselwirkenden Hubbardmodells für $t'/t = 0$ mit den chemischen Potentiale $\mu = \{-2, 00; -1, 00; 0, 00; 1, 00; 2, 00\}$ (links) und $t'/t = -1/6$ mit den chemischen Potentiale $\mu = \{-2, 67; -1, 67; -0, 67; 0, 33; 1, 33\}$ (rechts).

- Für die Wechselwirkung nur mit nächsten Nachbarn $t'/t = 0$ weist das Hubbardmodell für $\mu = 0$ halbe Füllung auf. Die quadratische Fermifläche enthält die van Hove-Singularitäten. Zu jedem Elektron auf der Fermikante kann ein passendes Loch mit geeignetem Impuls zur Bildung eines antiferromagnetischen Teilchen-Loch-Paares mit Impulstransfer $q_0 = (\pi, \pi)$ gefunden werden. Die Kombination von zwei Teilchen auf der Fermikante zu einem supraleitenden Teilchen-Teilchen-Paar mit verschwindendem Gesamtimpuls ist ebenfalls für alle Impulse auf der Fermikante möglich. Die beiden Wechselwirkungen konkurrieren für diese Wahl der Hüpfamplitude und des chemischen Potentials. Aus Experimenten ist bekannt, daß der Antiferromagnetismus in diesem Bereich des Phasendiagramms dominiert.
- Ist für $t'/t = 0$ das chemische Potential verschieden von Null, so weicht das Hubbardmodell von der halben Füllung ab. Die Fermifläche ist nicht länger quadratisch und damit nimmt die Anzahl der Möglichkeiten zur Bildung eines antiferromagnetischen Teilchen-Loch-Paares mit Teilchen auf oder in der Nähe der Fermikante ab. Hingegen bleibt die Bildung des supraleitenden Teilchen-Teilchen-Paares von der Änderung der Form der Fermifläche unberührt, da die Symmetrie bezüglich des Ursprungs erhalten bleibt. Je nach Wahl des chemischen Potentials und der damit einhergehenden Abweichung der Fermifläche von der quadratischen Form wird aufgrund der Betrachtung der Fermifläche eine Unterdrückung des Antiferromagnetismus und ein Auftreten der Supraleitung erwartet.
- Kommt zusätzlich die Wechselwirkung zwischen übernächsten Nachbarn $t'/t \neq 0$ dazu, so wird die Fermifläche verschoben. Ist $t'/t < 0$, so wird die Fermifläche für $\mu = 0$ nach außen verschoben. Für das chemische Potential $\mu = \epsilon_{vH} = 4t'/t$ enthält die Fermifläche die van Hove-Singularitäten. Die Spiegelungssymmetrie am Ursprung ist auch bei dieser Form der Fermifläche erhalten, damit ist es weiterhin möglich,

eine große Zahl an Möglichkeiten für die Bildung von Teilchen-Teilchen-Paaren auf der Fermikante mit verschwindendem Gesamtimpuls zu finden. Die Bildung von Teilchen-Loch-Paaren mit Impulstransfer $q_0 = (\pi, \pi)$ ist dagegen nur für wenige Impulse auf der Fermikante möglich, der antiferromagnetische Beitrag ist am größten für chemische Potentiale zwischen $\mu = 0$ und $\mu = \epsilon_{vH}$.

Durch die Gleichungen (3.4) und (3.5-3.6) werden die Parameter des Hubbardmodells mit den Anfangsbedingungen der Flußgleichungen verknüpft. Als freie Parameter bleiben noch die Hüpfamplitude t'/t , das chemische Potential μ und die Wechselwirkungsstärke U/t .

t'/t	ϵ_{vH}	μ
0	0	$0 \left[\frac{1}{24} \right] \frac{1}{6} \left[\frac{1}{12} \right] \frac{1}{2}$
$-\frac{1}{6}$	$-\frac{2}{3}$	$-1 \left[\frac{1}{3} \right] \frac{1}{3}; \epsilon_{vH} \pm \frac{1}{12}; 0 \pm \frac{1}{12}$
$-\frac{1}{3}$	$-\frac{4}{3}$	$-\frac{5}{3} \left[\frac{1}{3} \right] \frac{1}{3}; \epsilon_{vH} \pm \frac{1}{12}; 0 \pm \frac{1}{12}$
$-\frac{5}{6}$	$-\frac{10}{3}$	$-2 \left[\frac{1}{3} \right] \frac{1}{3}; \epsilon_{vH} \pm \frac{1}{12}; 0 \pm \frac{1}{12}$

Tabelle 3.1: Aufstellung der benutzten Werte für die Hüpfamplitude und das chemische Potential.

In der vorliegenden Arbeit wird das Hubbardmodell sowohl für reine nächste-Nachbar-Wechselwirkung als auch für Übernächste-Nachbar-Wechselwirkung betrachtet (3.1). Zu jeder Hüpfamplitude wird ein Wertesatz für das chemische Potential gewählt, der sowohl $\mu = 0$ als auch $\mu = \epsilon_{vH}$ mit der näheren Umgebung dieser Punkte enthält.

3.2 Freie Energie in Molekularfeldnäherung

Ziel dieser Arbeit ist die Stabilitätsuntersuchung der verschiedenen Wechselwirkungskanäle des Hubbardmodells mit Hilfe der Flußgleichungen. Während die Zweiteilchenwechselwirkung des Hubbardmodells von drei Impulsvariablen abhängt, sind in der effektiven Wechselwirkung nach der Anwendung der Flußgleichungen nur noch zwei unabhängige Impulsvariable vorhanden. Die Fluktuationen der Impulse werden bei der Berechnung der effektiven Wechselwirkungen aussummiert. Durch diese Elimination der Fluktuationen vereinfachen sich die weiteren Berechnungen wesentlich.

Für die Untersuchung der Stabilität des Systems ist es notwendig, das Minimum der freien Energie

$$F = E - TS \quad (3.7)$$

zu finden.

Dabei ist die Entropie

$$S(\langle c_m^\dagger c_n^\dagger \rangle, \langle c_m^\dagger c_n \rangle) \quad (3.8)$$

abhängig von den Fluktuationen der Ordnungsparameter Teilchen-Teilchen-Dichte und Teilchen-Loch-Dichte. Die Schwierigkeit bei der Kalkulation der Entropie liegt in der Wechselwirkung zwischen den einzelnen Teilchen.

Um die Berechnung der Entropie durchführen zu können, wird das Vielteilchensystem reduziert auf ein Einteilchensystem, bei dem die Wechselwirkungen zwischen den Teilchen durch die Einführung eines mittleren Potentialfeldes berücksichtigt werden. Diese Art der Näherung ist als Molekularfeldnäherung bekannt. Das Hartree-Fock-Verfahren ist eine Molekularfeldnäherung für wechselwirkende Elektronensysteme, die dabei auf ein effektives Einteilchenproblem abgebildet werden. Der Grundzustand des Systems wird nach dem Variationsprinzip ermittelt.

Zur Bestimmung des Minimums der freien Energie im Rahmen der Molekularfeldnäherung geht man vom symmetrischen Zustand aus und untersucht die Stabilität des Systems gegen Fluktuationen der Ordnungsparameter. Besitzt ein Zustand mit von Null verschiedenen Fluktuationen eine niedrigere freie Energie als der symmetrische Zustand, so ist der symmetrische Zustand nicht stabil.

Um die Entropie des Systems zu berechnen, werden zunächst die Erwartungswerte der Operatoren nach Fluktuationen der Ordnungsparameter entwickelt.

$$\langle c_m^\dagger c_n \rangle = \delta_{mn} n_m^0 + \gamma \nu_{mn} \quad (3.9)$$

$$\langle c_m^\dagger c_n^\dagger \rangle = \gamma \Delta_{mn} \quad (3.10)$$

$$\langle c_n c_m \rangle = \gamma \Delta_{mn}^* \quad (3.11)$$

γ ist ein Entwicklungsparameter für die Berechnung der Entropie. Aufgrund der Vertauschungsrelationen für fermionische Operatoren gilt für die Fluktuationen Δ bzw. ν im Teilchen-Teilchen-Kanal (pp-Kanal) bzw. im Teilchen-Loch-Kanal (ph-Kanal)

$$\Delta_{mn} = -\Delta_{nm} \quad (3.12)$$

$$\nu_{mn} = \nu_{nm}^* \quad . \quad (3.13)$$

Durch eine Bogoliubov-Transformation der Operatoren

$$c_k^\dagger = u_{kl} a_l^\dagger + v_{kl} a_l \quad (3.14)$$

$$c_k = u_{kl}^* a_l + v_{kl}^* a_l^\dagger \quad (3.15)$$

werden neue Quasiteilchen eingeführt, für die die Vertauschungsrelationen

$$\{a_k^\dagger, a_l\} = \delta_{kl} \quad (3.16)$$

für fermionische Operatoren gelten sollen. Um ein System mit entkoppelten Teilchen zu erhalten, setzt man für die Erwartungswerte

$$\langle a_k^\dagger a_l \rangle = \delta_{kl} (n_k^0 + \gamma \nu_{kl}) \quad (3.17)$$

$$\langle a_k^\dagger a_l^\dagger \rangle = 0 \quad . \quad (3.18)$$

Während im ursprünglichen System alle Teilchen durch ihre Zweiteilchenwechselwirkungen untereinander gekoppelt sind, enthält das durch die Hartree-Fock-Bogoliubov-Näherung erhaltene System Quasiteilchen und Quasilöcher in einem gemittelten Potential. Damit geht die Berechnung der Entropie über in eine Summation über die Impulse k der Elektronen und Löcher mit der Besetzungswahrscheinlichkeit $\langle a_k^\dagger a_k \rangle$ bzw. $1 - \langle a_k^\dagger a_k \rangle$.

Bestimmt man die Koeffizienten u_{kl} und v_{kl} so, daß die Bedingungen (3.16-3.18) bis zur zweiten Ordnung in γ erfüllt sind, und setzt die erhaltenen Gleichungen ein, so bleibt für die Entropie nach der Entwicklung um den Gleichgewichtszustand

$$\begin{aligned} S &= -k_B \sum_k (n_k^0 + \gamma \nu_{kk} + \gamma^2 x_k) \ln(n_k^0 + \gamma \nu_{kk} + \gamma^2 x_k) \\ &\quad - k_B \sum_k (1 - n_k^0 - \gamma \nu_{kk} - \gamma^2 x_k) \ln(1 - n_k^0 - \gamma \nu_{kk} - \gamma^2 x_k) \end{aligned} \quad (3.19)$$

mit

$$x_k = \sum_{m \neq k} \frac{|\nu_{km}|^2}{n_k^0 - n_m^0} + \sum_m \frac{|\Delta_{km}|^2}{n_k^0 + n_m^0 - 1} \quad . \quad (3.20)$$

Die Entwicklung von (3.19) in eine Taylorreihe bis zur zweiten Ordnung in γ liefert

$$S = S_0 + k_B \beta \sum_k (\epsilon_k - \mu) \nu_{kk} - k_B \sum_k S_k \quad (3.21)$$

$$S_0 = -k_B \sum_k \left(n_k^0 \ln(n_k^0) + (1 - n_k^0) \ln(1 - n_k^0) \right) \quad (3.22)$$

$$S_k = -x_k \beta (\epsilon_k - \mu) + \frac{1}{2} \nu_{kk}^2 \frac{1}{n_k^0 (1 - n_k^0)} \quad . \quad (3.23)$$

3.3 Symmetrien auf dem Quadratgitter

Alle Berechnungen für das Hubbardmodell werden in der 1. Brillouinzone auf einem zweidimensionalen Quadratgitter durchgeführt. Dieses besitzt als Symmetriegruppe die zyklische Gruppe $C_4 = 4mm$, die als Symmetrieelemente eine 4-zählige Rotationsachse R und vier Spiegelungen enthält. Gleichwertige Spiegelungen sind die x-Achse (M_x) und y-Achse (M_y) sowie die Winkelhalbierende $x = y$ (M_+) und die Winkelhalbierende $x = -y$ (M_-).

Unterscheidet man die Zustände zunächst aufgrund ihrer Parität, so erhält man für die Zustände mit gerader Parität eindimensionale Darstellungen, für die Zustände ungerader Parität dagegen zweidimensionale Darstellungen.

Die Zustände mit gerader Parität werden ferner unterschieden in s-Wellen, die symmetrisch bezüglich Rotation R sind, und d-Wellen, die sich bei Rotation um R antisymmetrisch verhalten. Zusätzlich kann man gleichzeitig Eigenzustände zur Spiegelung an den Geraden M_x, M_y und M_+, M_- wählen. Die Zustände, die bei einer Spiegelung an M_x, M_y in sich selbst übergehen, werden mit einem $+$ gekennzeichnet, die übrigen mit $-$.

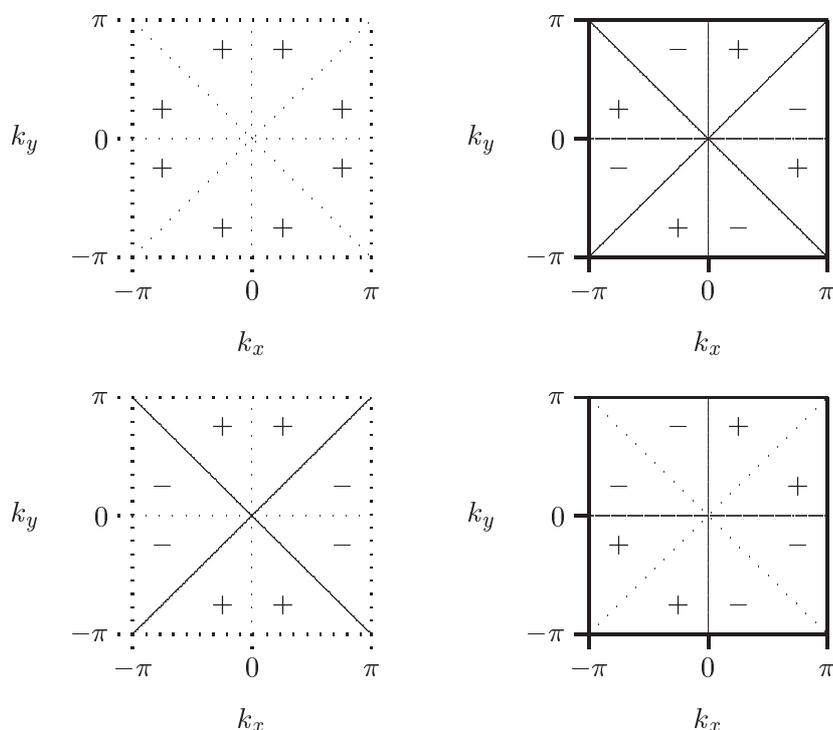


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung der verschiedenen Symmetrien gerader Parität mit Vorzeichen der Phasen und Knotenlinien, oben links s_+ , oben rechts s_- , unten links d_+ , unten rechts d_- .

In Abbildung (3.2) wird eine schematische Darstellung der Symmetrien gerader Parität gezeigt, in Tabelle (3.2) folgt ein Überblick über die Notation und die Zusammenhänge mit den Symmetrien.

Die Zustände ungerader Parität $R^2 = -1$ sind p-Wellen und haben eine zweidimensionale Darstellung. Für sie können keine gemeinsamen Eigenvektoren zu M_x, M_y und M_+, M_- gewählt werden.

Die Kenntnisse über die Symmetrien des Quadratgitters können bei der Berechnung der effektiven Wechselwirkungen ausgenutzt werden. Dies wird deutlich, wenn man die Matrix der Wechselwirkungselemente V in vier Untermatrizen A, B, C, D aufteilt.

$$V = \begin{pmatrix} A & B & C & D \\ D & A & B & C \\ C & D & A & B \\ B & C & D & A \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

Durch diese Einteilung wird die Rotationssymmetrie des Gitters um 90° dargestellt.

	Basisfunktionen	R	M_x, M_y	M_+, M_-
s_+	1	+1	+1	+1
s_-	$\sin k_x \sin k_y (\cos k_x - \cos k_y)$	+1	-1	-1
$d_+ = d_{x^2-y^2}$	$\cos k_x - \cos k_y$	-1	+1	-1
$d_- = d_{xy}$	$\sin k_x \sin k_y$	-1	-1	+1

Tabelle 3.2: Irreduzible Darstellungen mit Beispielen für die Basisfunktionen für die Symmetrie C_4 .

Betrachtet man die Elemente der Matrizen A , B , C und D , so erhält man

$$A(k, q) = V(k, q) \quad (3.25)$$

$$B(k, q) = V(k, R(q)) \quad (3.26)$$

$$C(k, q) = V(k, R^2(q)) \quad (3.27)$$

$$D(k, q) = V(k, R^3(q)) \quad (3.28)$$

Für die Eigenwerte und Eigenvektoren erhält man die Lösungen

$$V \begin{pmatrix} \psi \\ \psi \\ \psi \\ \psi \end{pmatrix} = (A + B + C + D) \begin{pmatrix} \psi \\ \psi \\ \psi \\ \psi \end{pmatrix} \quad (3.29)$$

mit s-Wellen-Symmetrie,

$$V \begin{pmatrix} \psi \\ -\psi \\ \psi \\ -\psi \end{pmatrix} = (A - B + C - D) \begin{pmatrix} \psi \\ -\psi \\ \psi \\ -\psi \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

mit d-Wellen-Symmetrie und

$$V \begin{pmatrix} \psi \\ \pm i\psi \\ -\psi \\ \mp i\psi \end{pmatrix} = (A \pm iB - C \mp iD) \begin{pmatrix} \psi \\ \pm i\psi \\ -\psi \\ \mp i\psi \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

mit p-Wellen-Symmetrie.

Daraus ist ersichtlich, daß die Matrixelemente der effektiven Wechselwirkung als Linearkombinationen mit unterschiedlichen Vorzeichen für die unterschiedlichen Wellen erhalten werden können. Zusätzlich zur Rotationssymmetrie wird wieder die Spiegelungssymmetrie berücksichtigt.

Für die Beiträge gerader Parität erhält man Kombinationen der Terme

$$\begin{aligned} & V(k, q) + V(k, R^2(q)) \\ & \pm V(k, R(q)) + V(k, R^3(q)) \\ & \pm V(k, M_x(q)) + V(k, R^2 M_x(q)) \\ & \pm V(k, M_+(q)) + V(k, R^2 M_+(q)) \end{aligned}$$

Je nach Symmetrie müssen die Terme mit unterschiedlichen Vorzeichen kombiniert werden, die Vorzeichen können aus der Tabelle (3.2) abgelesen werden.

Für die Beiträge ungerader Parität erhält man Kombinationen der Terme

$$\begin{aligned} & V(k, q) - V(k, R^2(q)) \\ & \pm V(k, M_+(q)) - V(k, R^2 M_+(q)) \end{aligned} \tag{3.32}$$

Da die Eigenwerte für die Zustände, die symmetrisch bzw. antisymmetrisch zur Spiegelung M_+ sind, entartet sind, genügt es, einen vollständigen Satz der Eigenwerte zu berechnen.

Kapitel 4

Auswertung

Für die Untersuchung der Stabilität ist die Berechnung der effektiven Wechselwirkung (2.58) und der Entropie (3.21-3.23) in den verschiedenen Wechselwirkungskanälen notwendig.

Benutzt man die Eliminationsfunktion in der Form

$$r_{k_1 k_2 q_1 q_2} = \sum_{\alpha} (v_{k_1}^{\alpha} + v_{k_2}^{\alpha} - v_{q_1}^{\alpha} - v_{q_2}^{\alpha})^2 \quad (4.1)$$

mit den genannten Bedingungen

$$v_k^{\alpha} = -v_{-k}^{\alpha} \quad \alpha \text{ ungerade} \quad (4.2)$$

und

$$v_k^{\alpha} = v_{k+q_0}^{\alpha} \quad , \quad (4.3)$$

so sind außer der Supraleitung und dem Antiferromagnetismus noch weitere Wechselwirkungen erhalten. Insgesamt werden die Zweiteilchenwechselwirkungen in Teilchen-Teilchen-Kanälen und Teilchen-Loch-Kanälen mit Gesamtimpuls Null und Impuls $q_0 = (\pi, \pi)$ und verschiedenen Symmetrien betrachtet.

4.1 Teilchen-Teilchen-Kanäle

Zunächst werden die erhaltenen Teilchen-Teilchen-Kanäle mit Gesamtimpuls Null und Gesamtimpuls q_0 betrachtet.

4.1.1 mit Gesamtimpuls Null

Um die Supraleitung zu untersuchen, wird der Teilchen-Teilchen-Kanal mit Gesamtimpuls und Gesamtspin Null betrachtet. Daher gehen wir von den Erwartungswerten für die Einteilchenoperatoren

$$\langle c_{k,s_1}^\dagger c_{-k,s_2}^\dagger \rangle = \epsilon_{s_1,s_2} \Delta_k^{s*} + (\epsilon \sigma^\alpha)_{s_1,s_2} \Delta_k^{t\alpha*} \quad (4.4)$$

$$\langle c_{-k,s_2} c_{k,s_1} \rangle = \epsilon_{s_2,s_1} \Delta_k^s + (\sigma^\alpha \epsilon)_{s_2,s_1} \Delta_k^{t\alpha} \quad (4.5)$$

aus, wobei σ^α die Pauli-Spinmatrizen sind und $\epsilon = \sigma^y$ ist. Für die Fluktuationen Δ wird bezüglich des Spins in Singlett- und Tripletzustände unterschieden. Diese genügen dann den Symmetrierelationen

$$\Delta_k^s = \Delta_{-k}^s \quad (4.6)$$

$$\Delta_k^{t\alpha} = -\Delta_{-k}^{t\alpha} \quad , \quad (4.7)$$

d.h. die s- und d-Wellen besitzen Singlettcharakter, die p-Wellen hingegen Tripletcharakter.

Die Wechselwirkung in diesem Kanal kann man in der Form

$$H_{SL} = \frac{1}{2N} \sum_{k,q,s_1,s_2} V_{SL}(k,q) : c_k^\dagger c_{-k}^\dagger c_q c_{-q} : \quad (4.8)$$

mit

$$V_{SL}(k,q) = V_{k,-k,q,-q}^{(2)} \quad (4.9)$$

schreiben. Bei der Berechnung der effektiven Wechselwirkung gilt für den ersten Term in (2.58) aufgrund der Nebenbedingung $k_3 = -q_3$. Damit ist die Eliminationsfunktion für diesen Term gleich Null und dieser Beitrag verschwindet. Lediglich der zweite Term der effektiven Wechselwirkung trägt bei, für die Wechselwirkung bleibt

$$V_{SL}(k,q) = \sum_{k_3 q_3} (n_{q_3} - n_{k_3}) \frac{\epsilon_{k_3} - \epsilon_{q_3}}{(\epsilon_{k_3} - \epsilon_{q_3})^2 + (\epsilon_k - \epsilon_q)^2} \delta_{q_3, -k-q-k_3} \quad . \quad (4.10)$$

Bei der Berechnung der Energie erhält man

$$\begin{aligned} E_{SL} &= \frac{1}{2N} \sum_{k,q,s_1,s_2} V_{SL}(k,q) (\epsilon_{s_1,s_2} \Delta_k^{s*} + (\epsilon \sigma^\alpha)_{s_1,s_2} \Delta_k^{t\alpha*}) (\epsilon_{s_2,s_1} \Delta_q^s + (\sigma^\alpha \epsilon)_{s_2,s_1} \Delta_q^{t\alpha}) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{k,q} V_{SL}(k,q) (\Delta_k^{s*} \Delta_q^s + \Delta_k^{t\alpha*} \Delta_q^{t\alpha}) \quad . \end{aligned} \quad (4.11)$$

Für die Entropie setzt man $m = -k$ und erhält mit der Notation $\Delta_{k,-k} = \Delta_k$ den Beitrag

$$S_k = -\beta \frac{\epsilon_k - \mu}{n_k^0 + n_{-k}^0 - 1} (\Delta_k^{s*} \Delta_k^s + \Delta_k^{t\alpha*} \Delta_k^{t\alpha}) \quad . \quad (4.12)$$

4.1.2 mit Gesamtimpuls q_0

In diesem Abschnitt wird der Teilchen-Teilchen-Kanal mit Gesamtimpuls q_0 untersucht. Dabei werden die Erwartungswerte

$$\langle c_{k,s_1}^\dagger c_{q_0-k,s_2}^\dagger \rangle = \epsilon_{s_1,s_2} \Delta_k^{s*} + (\epsilon \sigma^\alpha)_{s_1,s_2} \Delta_k^{t\alpha*} \quad (4.13)$$

$$\langle c_{q_0-k,s_2} c_{k,s_1} \rangle = \epsilon_{s_2,s_1} \Delta_k^s + (\sigma^\alpha \epsilon)_{s_2,s_1} \Delta_k^{t\alpha} \quad (4.14)$$

betrachtet, aus denen die Symmetriebedingungen für die Fluktuationen

$$\Delta_k^s = \Delta_{q_0-k}^s \quad (4.15)$$

$$\Delta_k^{t\alpha} = -\Delta_{q_0-k}^{t\alpha} \quad (4.16)$$

folgen. Für die Wechselwirkung erhält man die Form

$$H_Y = \frac{1}{2N} \sum_{k,q,s_1,s_2} V_Y(k,q) : c_{ks_1}^\dagger c_{q_0-ks_2}^\dagger c_{qs_1} c_{q_0-qs_2} : \quad (4.17)$$

mit

$$V_Y(k,q) = V_{k,q_0-k,q,q_0-q}^{(2)} \quad (4.18)$$

In diesem Kanal trägt in Gleichung (2.58) nur der erste Term bei, alle Beiträge des zweiten Terms verschwinden, da die Eliminationsfunktion für diesen Term Null ist. So bleibt für die Wechselwirkung

$$V_Y(k,q) = \sum_{k_3 q_3} (n_{q_3} - n_{k_3}) \frac{\epsilon_{k_3} - \epsilon_{q_3} + \frac{1}{2}(\Delta\epsilon)_{k,q,q_0-k,q_0-q}}{(\epsilon_{k_3} - \epsilon_{q_3} + \frac{1}{2}(\Delta\epsilon)_{k,q,q_0-k,q_0-q})^2 + \frac{1}{4}(\Delta\epsilon)_{k,q_0-k,q,q_0-q}^2} \times \delta_{q_3,k+q+k_3-q_0} \quad (4.19)$$

Für die freie Energie benötigt man noch die Kenntnis der Energie

$$\begin{aligned} E_Y &= \frac{1}{2N} \sum_{k,q,s_1,s_2} V_Y(k,q) (\epsilon_{s_1,s_2} \Delta_k^{s*} + (\epsilon \sigma^\alpha)_{s_1,s_2} \Delta_k^{t\alpha*}) (\epsilon_{s_2,s_1} \Delta_q^s + (\sigma^\alpha \epsilon)_{s_2,s_1} \Delta_q^{t\alpha}) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{k,q} V_Y(k,q) (\Delta_k^{s*} \Delta_q^s + \Delta_k^{t\alpha*} \Delta_q^{t\alpha}) \end{aligned} \quad (4.20)$$

und der Entropie

$$S_k = -\beta \frac{\epsilon_k - \mu}{n_k^0 + n_{q_0-k}^0 - 1} (\Delta_k^{s*} \Delta_k^s + \Delta_k^{t\alpha*} \Delta_k^{t\alpha}) \quad (4.21)$$

wobei in der Summation $m = q_0 - k$ gesetzt und die Notation $\Delta_{k,q_0-k} = \Delta_k$ genutzt wird.

Führt man nun die Summation nur über die halbe Brillouinzone mit $|k| < |q_0 - k|$ durch, dargestellt durch \sum' , so erhält man für die Energie

$$\begin{aligned} E_Y &= \frac{1}{N} \sum'_{k,q} (V_Y(k,q) + V_Y(k,q_0 - q)) \Delta_k^{s*} \Delta_q^s \\ &\quad + \frac{1}{N} \sum'_{k,q} (V_Y(k,q) - V_Y(k,q_0 - q)) \Delta_k^{t\alpha*} \Delta_q^{t\alpha} \end{aligned} \quad (4.22)$$

und die Entropie

$$S_Y = -2k_B \sum_k^I S'_k (\Delta_k^{s*} \Delta_k^s + \Delta_k^{t\alpha*} \Delta_k^{t\alpha}) \quad (4.23)$$

mit der Definition $S_k = S'_k (\Delta_k^{s*} \Delta_k^s + \Delta_k^{t\alpha*} \Delta_k^{t\alpha})$.

Diese Symmetrie bezüglich der Vertauschung der Impulse $q \leftrightarrow q_0 - q$ kann auch bei der numerischen Rechnung ausgenutzt werden und wird im folgenden mit q_+ - bzw. q_- -Symmetrie bezeichnet. Hierbei fällt auf, daß in diesem Wechselwirkungskanal die q_+ -Terme Spinsinglett und die q_- -Terme Spintriplett sind.

4.2 Teilchen-Loch-Kanäle

Es folgt die Auswertung der Teilchen-Loch-Kanälen mit Impulstransfer Null und Impulstransfer q_0 .

4.2.1 mit Impulstransfer Null

Im Teilchen-Loch-Kanal mit Impulstransfer Null treten sowohl Wechselwirkungen mit Spintransfer $S = 0$ und $S = 1$ auf. Dabei geht man von den Erwartungswerten

$$\langle c_{k,s_1}^\dagger c_{k,s_2} \rangle = \delta_{s_1,s_2} (n_k^0 + \nu_k^s) + \sigma_{s_1,s_2}^\alpha \nu_k^{t\alpha} \quad (4.24)$$

aus und bekommt für die Fluktuationen

$$\nu_k^{s*} = \nu_k^s \quad (4.25)$$

$$\nu_k^{t\alpha*} = \nu_k^{t\alpha} \quad . \quad (4.26)$$

Die Wechselwirkung besitzt die Gestalt

$$\begin{aligned} H_{HF} &= \frac{1}{2N} \sum_{k,q,s_1,s_2} V_H(k,q) : c_{k s_1}^\dagger c_{q s_2}^\dagger c_{k s_1} c_{q s_2} : \\ &+ \frac{1}{2N} \sum_{k,q,s_1,s_2} V_F(k,q) : c_{k s_1}^\dagger c_{q s_2}^\dagger c_{q s_1} c_{k s_2} : \end{aligned} \quad (4.27)$$

mit

$$V_H(k,q) = V_{k,q,k,q}^{(2)} \quad (4.28)$$

$$V_F(k,q) = V_{k,q,q,k}^{(2)} \quad . \quad (4.29)$$

Hier wird deutlich, daß der Hartree-Term nur Spinübertrag Null enthält, der Fock-Term hingegen Spintransfer $S = 0$ und $S = 1$ beinhaltet. Die Eliminationsfunktion ist für den

zweiten Term der Wechselwirkung im Hartree-Kanal und für den ersten Term im Fock-Kanal gleich Null. Somit bleibt für die Wechselwirkungen im Hartree- und Fock-Term

$$V_F(k, q) = \sum_{k_3 q_3} (n_{q_3} + n_{k_3} - 1) \frac{(\Delta\epsilon)_{k_3, q_3, k, q}}{(\Delta\epsilon)_{k_3, q_3, k, q}^2} \delta_{q_3, k+q-k_3} \quad (4.30)$$

und

$$V_H(k, q) = \sum_{k_3 q_3} (n_{q_3} - n_{k_3}) \frac{(\Delta\epsilon)_{k_3, k, q, q_3}}{(\Delta\epsilon)_{k_3, k, q, q_3}^2} \delta_{q_3, k-q+k_3} \quad . \quad (4.31)$$

Der Beitrag der Energie zur freien Energie ist

$$\begin{aligned} E_{HF} &= \frac{2}{N} \sum_{k, q} V_H(k, q) \nu_k^s \nu_q^s \\ &\quad - \frac{1}{2N} \sum_{k, q, s_1, s_2} V_F(k, q) (\delta_{s_1, s_2} \nu_k^s + \sigma_{s_1, s_2}^\alpha \nu_k^{t\alpha}) (\delta_{s_2, s_1} \nu_q^s + \sigma_{s_2, s_1}^\alpha \nu_q^{t\alpha}) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{k, q} (2V_H(k, q) - V_F(k, q)) \nu_k^s \nu_q^s - \frac{1}{N} \sum_{k, q} V_F(k, q) \nu_k^{t\alpha} \nu_q^{t\alpha} \quad . \quad (4.32) \end{aligned}$$

Für die Entropie folgt

$$S_k = -\frac{1}{2} \nu_k^s \nu_k^s \frac{1}{n_k^0 (1 - n_k^0)} ((\nu_k^s)^2 + (\nu_k^{t\alpha})^2) \quad . \quad (4.33)$$

Wählt man

$$V_{HF}(k, q) = 2V_H(k, q) - V_F(k, q) \quad , \quad (4.34)$$

so besitzt der Fockbeitrag V_F Singlettcharakter, der Hartree-Fock-Beitrag V_{HF} hingegen Tripletcharakter.

4.2.2 mit Impulstransfer q_0

Abschließend werden die Wechselwirkungen für Teilchen-Loch-Kanäle mit Impulstransfer q_0 und Spintransfer $S = 0$ sowie $S = 1$ untersucht. Die entsprechenden Erwartungswerte sind

$$\langle c_{k, s_1}^\dagger c_{k+q_0, s_2} \rangle = \delta_{s_1, s_2} \nu_k^s + \sigma_{s_1, s_2}^\alpha \nu_k^{t\alpha} \quad . \quad (4.35)$$

Daraus resultiert für die Fluktuationen

$$\nu_k^{s*} = \nu_{k+q_0}^s \quad (4.36)$$

$$\nu_k^{t\alpha*} = \nu_{k+q_0}^{t\alpha} \quad . \quad (4.37)$$

Die Wechselwirkung läßt sich in der Form

$$\begin{aligned} H_{AC} &= \frac{1}{2N} \sum_{k,q,s_1,s_2} V_A(k,q) : c_{ks_1}^\dagger c_{q+q_0s_2}^\dagger c_{qs_1} c_{k+q_0s_2} : \\ &+ \frac{1}{2N} \sum_{k,q,s_1,s_2} V_C(k,q) : c_{ks_1}^\dagger c_{q+q_0s_2}^\dagger c_{k+q_0s_1} c_{qs_2} : \end{aligned} \quad (4.38)$$

schreiben, mit den Wechselwirkungen

$$V_A(k,q) = V_{k,q+q_0,q,k+q_0}^{(2)} \quad (4.39)$$

$$V_C(k,q) = V_{k,q+q_0,k+q_0,q}^{(2)} \quad . \quad (4.40)$$

Während V_C nur Wechselwirkungen mit Spinsinglett enthält, beinhaltet V_A Terme mit Spinsinglett und -triplett. Die Eliminationsfunktion verschwindet in V_A für den zweiten Beitrag, in V_C für den ersten Beitrag. So resultiert für die Wechselwirkungen

$$\begin{aligned} V_A(k,q) &= \sum_{k_3q_3} (n_{q_3} + n_{k_3} - 1) \frac{\epsilon_{k_3} + \epsilon_{q_3} + \frac{1}{2}(\Delta^+ \epsilon)_{k,q,k+q_0,q+q_0}}{(\epsilon_{k_3} + \epsilon_{q_3} + \frac{1}{2}(\Delta^+ \epsilon)_{k,q,k+q_0,q+q_0})^2 + \frac{1}{4}(\Delta \epsilon)_{k,q+q_0,q,k+q_0}^2} \\ &\quad \times \delta_{q_3,k+q-k_3+q_0} \end{aligned} \quad (4.41)$$

mit der Energiesumme

$$(\Delta^+ \epsilon)_{k_1k_2q_1q_2} = \epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} + \epsilon_{q_1} + \epsilon_{q_2} \quad (4.42)$$

und

$$\begin{aligned} V_C(k,q) &= \sum_{k_3q_3} (n_{q_3} - n_{k_3}) \frac{\epsilon_{k_3} - \epsilon_{q_3} + \frac{1}{2}(\Delta \epsilon)_{k,k+q_0,q,q+q_0}}{(\epsilon_{k_3} - \epsilon_{q_3} + \frac{1}{2}(\Delta \epsilon)_{k,k+q_0,q,q+q_0})^2 + \frac{1}{4}(\Delta \epsilon)_{k,q+q_0,q,k+q_0}^2} \\ &\quad \times \delta_{q_3,k-q+k_3} \quad . \end{aligned} \quad (4.43)$$

Bei der Berechnung der Energie erhält man

$$\begin{aligned} E_{AC} &= \frac{2}{N} \sum_{k,q} V_C(k,q) \nu_k^s \nu_q^{s*} \\ &\quad - \frac{1}{2N} \sum_{k,q,s_1,s_2} V_A(k,q) (\delta_{s_1,s_2} \nu_k^s + \sigma_{s_1,s_2}^\alpha \nu_k^{t\alpha}) (\delta_{s_2,s_1} \nu_q^{s*} + \sigma_{s_2,s_1}^\alpha \nu_q^{t\alpha*}) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{k,q} (2V_C(k,q) - V_A(k,q)) \nu_k^s \nu_q^{s*} - \frac{1}{N} \sum_{k,q} V_A(k,q) \nu_k^{t\alpha} \nu_q^{t\alpha*} \quad . \end{aligned} \quad (4.44)$$

Definiert man

$$V_{AC}(k,q) = 2V_C(k,q) - V_A(k,q) \quad , \quad (4.45)$$

so besitzt der Beitrag V_{AC} Singlett-Charakter, V_A dagegen Triplet-Charakter.

Auch hier wird die Summation über die halbe Brillouinzone für Energie- und Entropieterm eingeführt.

$$\begin{aligned}
E_{AC} &= \frac{1}{N} \sum'_{k,q} V_{AC}(k,q) (\nu_k^s \nu_q^{s*} + \nu_k^{s*} \nu_q^s) \\
&+ \frac{1}{N} \sum'_{k,q} V_{AC}(k,q+q_0) (\nu_k^s \nu_q^s + \nu_k^{s*} \nu_q^{s*}) \\
&- \frac{1}{N} \sum'_{k,q} V_A(k,q) (\nu_k^{t\alpha} \nu_q^{t\alpha*} + \nu_k^{t\alpha*} \nu_q^{t\alpha}) \\
&- \frac{1}{N} \sum'_{k,q} V_A(k,q+q_0) (\nu_k^{t\alpha} \nu_q^{t\alpha} + \nu_k^{t\alpha*} \nu_q^{t\alpha*}) \quad (4.46)
\end{aligned}$$

Um die Terme zusammenfassen zu können, ist eine Aufteilung von ν in Real- und Imaginärteil erforderlich. Damit erhält die Energie die Form

$$\begin{aligned}
E_{AC} &= \frac{1}{N} \sum'_{k,q} (V_{AC}(k,q) + V_{AC}(k,q+q_0)) \operatorname{Re}(\nu_k^s) \operatorname{Re}(\nu_q^s) \\
&+ \frac{1}{N} \sum'_{k,q} (V_{AC}(k,q) - V_{AC}(k,q+q_0)) \operatorname{Im}(\nu_k^s) \operatorname{Im}(\nu_q^s) \\
&- \frac{1}{N} \sum'_{k,q} (V_A(k,q) + (V_A(k,q+q_0))) \operatorname{Re}(\nu_k^{t\alpha}) \operatorname{Re}(\nu_q^{t\alpha}) \\
&- \frac{1}{N} \sum'_{k,q} (V_A(k,q) - (V_A(k,q+q_0))) \operatorname{Im}(\nu_k^{t\alpha}) \operatorname{Im}(\nu_q^{t\alpha}) \quad . \quad (4.47)
\end{aligned}$$

Die zugehörige Entropie ist

$$S_k = \beta \frac{\epsilon_k - \epsilon_{k+q_0}}{n_k^0 - n_{k+q_0}^0} (\nu_k^s \nu_q^{s*} + \nu_k^{t\alpha} \nu_q^{t\alpha*}) \quad . \quad (4.48)$$

Für die Entropie gilt bei Summation über die halbe Brillouinzone

$$S_{AC} = -k_B \sum'_k \beta \frac{\epsilon_k - \epsilon_{k+q_0}}{n_k^0 - n_{k+q_0}^0} \left(\operatorname{Re}(\nu_k^s)^2 + \operatorname{Im}(\nu_k^s)^2 + \operatorname{Re}(\nu_k^{t\alpha})^2 + \operatorname{Im}(\nu_k^{t\alpha})^2 \right) \quad . \quad (4.49)$$

In Tabelle (4.1) werden die durchgeführten Auswertung zusammengefaßt. In der ersten Spalte wird die im folgenden benutzte Bezeichnung genannt, in der zweiten Spalte die zugehörige Wechselwirkung in der Operatordarstellung. In Spalte drei wird gekennzeichnet, ob es sich um einen Teilchen-Teilchen- oder Teilchen-Loch-Kanal handelt. Die Spalten vier und fünf zeigen Spinsymmetrie (Singlett/Triplett) und die q_{\pm} -Symmetrie.

Bezeichnung	Operatordarst.		Spinsym.	q -Sym.
$V_{SL}(k, q)$	$c_k^\dagger c_{-k}^\dagger c_q c_{-q}$	pp	si/tr	
$V_Y(k, q)$	$c_k^\dagger c_{q_0-k}^\dagger c_q c_{q_0-q}$	pp	si/tr	q_\pm
$V_F(k, q)$	$c_k^\dagger c_q^\dagger c_k c_q$	ph	si/tr	
$V_H(k, q)$	$c_k^\dagger c_q^\dagger c_q c_k$	ph	si	
$V_A(k, q)$	$c_k^\dagger c_{q_0+k}^\dagger c_q c_{k+q_0}$	ph	si/tr	q_\pm
$V_C(k, q)$	$c_k^\dagger c_{q_0+k}^\dagger c_{k+q_0} c_q$	ph	si	q_\pm

Tabelle 4.1: Aufstellung der betrachteten Wechselwirkungskanäle mit den benutzten Bezeichnungen, zugehörigen Operatordarstellungen und Symmetrien.

4.3 Stabilitätsanalyse der Wechselwirkungskanäle

Durch die vorangegangenen Rechnungen wurde die freie Energie des Hubbardmodells im Rahmen einer Hartree-Fock-Bogoliubov-Näherung bestimmt. Im folgenden wird die Stabilität des symmetrischen Zustands untersucht. Dabei ist nach dem Variationsprinzip der Zustand mit der niedrigsten freien Energie die beste Beschreibung für den Grundzustand des Systems im Rahmen der gemachten Näherungen. Liegt ein Zustand mit Fluktuationen energetisch niedriger als der symmetrische Zustand, so ist der symmetrische Zustand nicht stabil. Dies ist ein Anzeichen für einen Phasenübergang in einen Zustand mit gebrochener Symmetrie.

Die Fluktuationsterme der Entropie lassen sich mit

$$S = -k_B \sum_k S'_k \Delta_k^* \Delta_k \quad \text{bzw.} \quad (4.50)$$

$$S = -k_B \sum_k S'_k \nu_k^* \nu_k \quad (4.51)$$

beschreiben. Dabei werden die Definitionen $S_k = S'_k \Delta_k^* \Delta_k$ für den Teilchen-Teilchen-Kanal und $S_k = S'_k \nu_k^* \nu_k$ für den Teilchen-Loch-Kanal benutzt.

Bei der Berechnung der Energie bekommt man die allgemeine Form

$$E = \frac{U^2}{Nt} \sum_{k,q} V'_X(k, q) \Delta_k^* \Delta_q \quad \text{bzw.} \quad (4.52)$$

$$E = \frac{U^2}{Nt} \sum_{k,q} V'_X(k, q) \nu_k^* \nu_q \quad (4.53)$$

mit

$$V_X(k, q) = \frac{U^2}{t} V_X'(k, q) \quad , \quad (4.54)$$

dabei steht V_X für einen beliebigen Wechselwirkungskanal.

Die freie Energie ist somit eine bilineare Funktion in den Fluktuationen

$$F = E - TS \quad (4.55)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{k,q} \left(U + \frac{U^2}{t} V_X'(k, q) \right) \Delta_k^* \Delta_q + \sum_k k_B T S_k' \Delta_k^* \Delta_k \quad (4.56)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{k,q} \left(U + \frac{U^2}{t} V_X'(k, q) + k_B T S_k' \delta_{k,q} \right) \Delta_k^* \Delta_q \quad (4.57)$$

für die Teilchen-Teilchen-Kanäle und

$$F = \frac{1}{N} \sum_{k,q} \left(U + \frac{U^2}{t} V_X'(k, q) \right) \nu_k^* \nu_q + \sum_k k_B T S_k' \nu_k^* \nu_k \quad (4.58)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{k,q} \left(U + \frac{U^2}{t} V_X'(k, q) + k_B T S_k' \delta_{k,q} \right) \nu_k^* \nu_q \quad (4.59)$$

für die Teilchen-Loch-Kanäle.

Um die Stabilität der freien Energie zu untersuchen, müssen die Eigenwerte der Matrix

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N} \left(U + \frac{U^2}{t} V_X'(k, q) + k_B T S_k' \delta_{k,q} \right) \\ &= k_B T \left(\frac{U}{t} A_{k,q} + \frac{U^2}{t^2} B_{k,q} + \delta_{k,q} \right) \sqrt{S_k'} \sqrt{S_q'} \end{aligned} \quad (4.60)$$

mit

$$A_{k,q} = \frac{t}{N k_B T \sqrt{S_k' S_q'}} \quad (4.61)$$

$$B_{k,q} = \frac{t V_X'(k, q)}{N k_B T \sqrt{S_k' S_q'}} \quad (4.62)$$

betrachtet werden.

Der Entropiekoeffizient S_k' ist für alle Werte positiv. Für niedrige Wechselwirkung U/t sind somit alle Eigenwerte positiv. Das System wird dann instabil, wenn der niedrigste Eigenwert kleiner oder gleich Null ist. Für die kritische Wechselwirkung $(U/t)_C$ gilt also

$$\det \left(\frac{U}{t} A_{k,q} + \frac{U^2}{t^2} B_{k,q} + \delta_{k,q} \right) = 0 \quad . \quad (4.63)$$

Dies verhält sich äquivalent zu der Bedingung, daß der niedrigste Eigenwert von

$$\frac{U}{t}A_{k,q} + \frac{U^2}{t^2}B_{k,q} \quad (4.64)$$

gleich -1 sein soll.

Führt man die Berechnung der Eigenwerte für die verschiedenen Symmetrien durch, so muß der Beitrag erster Ordnung in der Wechselwirkung nur bei den s_+ -Wellen berücksichtigt werden. Dies hat zur Folge, daß die Berechnung der Eigenwerte iterativ für den gewählten Bereich $U/t = 0.1[0.1]10$ durchgeführt werden muß. Bei der Auswertung für die übrigen Symmetrien trägt der Term erster Ordnung nicht bei. Dadurch kann die kritische Wechselwirkung ermittelt werden, indem der niedrigste Eigenwert λ z.B. für $U/t = 1$ berechnet wird. Dann erhält man $(U/t)_C = 1/\sqrt{\lambda}$.

Die kritische Wechselwirkung $(U/t)_C$ gibt demnach für alle Beiträge außer den s_+ -Wellen eine Grenze an, oberhalb der das System in dem betrachteten Wechselwirkungskanal mit Fluktuationen eine niedrigere freie Energie besitzt als der symmetrische Zustand. Damit ist der symmetrische Zustand instabil und es findet ein Phasenübergang mit einer spontanen Symmetriebrechung statt. Bei den s_+ -Wellen können die Beiträge erster und zweiter Ordnung unterschiedliche Vorzeichen haben, dadurch kann ein Bereich für die Wechselwirkung entstehen, innerhalb dessen der betrachtete Zustand stabil ist. Dies ist z.B. bei den Resultaten für den antiferromagnetischen Wechselwirkungskanal zu beobachten.

mit der Bedingung

$$\cot(2\Phi) = \frac{a_{qq} - a_{pp}}{2a_{pq}}, \quad (5.2)$$

wobei $s = \sin \Phi$ und $c = \cos \Phi$ bedeutet.

Jede spätere Transformation kann wieder dort Beiträge erzeugen, wo die Außerdiagonalelemente schon eliminiert wurden. Dennoch läßt sich zeigen, daß die Summe der Außerdiagonalelemente mit jeder Jacobi-Rotation abnimmt, bis die Matrix im Rahmen der festgelegten Genauigkeit Diagonalform annimmt.

Zur Wahl der Reihenfolge, in welcher die Elemente eliminiert werden sollen, gibt es unterschiedliche Vorgehensweisen. In dem von Jacobi 1846 entwickelten Verfahren sucht man für jeden Schritt der Transformation nach dem größten Außerdiagonalelement in der oberen Dreiecksmatrix und eliminiert dieses. Dies ist eine gute Strategie für die Berechnungen per Hand, bei Berechnungen mit dem Computer führt allerdings die Suche nach dem größten Element dazu, daß die benötigte Rechenzeit von der Ordnung N^2 anstatt von der Ordnung N ist. Eine andere Möglichkeit ist die zyklische Jacobi-Methode, bei der die Elemente in einer fest vorgegebenen Reihenfolge abgearbeitet werden. Auch hier konvergiert die Matrix mit einer Rechenzeit der Ordnung N^2 gegen die Diagonalform. In dieser Arbeit wird die zyklische Jacobi-Methode angewandt.

5.2 Behandlung singulärer Punkte

Bei der Berechnung der effektiven Wechselwirkung treten Summen der Form

$$\sum_{k_3, q_3} \frac{f(k, q, k_3, q_3) z(k, q, k_3, q_3)}{z^2(k, q, k_3, q_3) + e^2(k, q)} \delta_{k+q, k_3+q_3} \quad (5.3)$$

auf, dabei sind der Faktor f und der Energieterm des Zähler z abhängig von den Summationsindices, während der Energieterm e unabhängig von den Summationsindices ist. Für spezielle Wahl der Impulsindices k und q kann der Energieterm e im Nenner der Summe verschwinden, somit muß das Hauptwertintegral

$$\int d^2 k_3 d^2 q_3 \frac{f(k, q, k_3, q_3)}{z(k, q, k_3, q_3)} \delta_{k+q, k_3+q_3} \quad (5.4)$$

berechnet werden.

Um Singularitäten bei der Summation zu umgehen, wird eine Mittelung über Punkte in der Umgebung im Impulsraum durchgeführt (Abbildung 5.1). Dafür wird jeweils zwischen dem betrachteten Punkt und seinen nächsten Nachbarn ein Hilfspunkt eingeführt. Diese Hilfspunkte besitzen die Impulse $(k_x \pm \delta, k_y)$ bzw. $(k_x, k_y \pm \delta)$ mit dem Impulsabstand $\delta = \pi/2N_H$. Definiert man $\delta_x = (\delta, 0)$ und $\delta_y = (0, \delta)$, so kann man in Tabelle (5.1) die bei

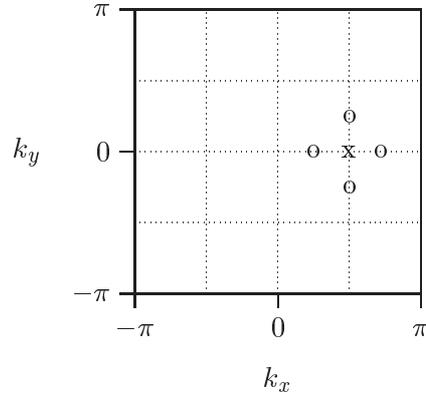


Abbildung 5.1: Einteilung der 1. Brillouinzone in $2N_H \times 2N_H$ Gitterpunkte, hier mit $N_H = 2$. Mit x wird ein Gitterpunkt herausgegriffen, mit o die Hilfspunkte für die Mittelung zu diesem Gitterpunkt markiert.

der Mittelung benutzten Impulskonfigurationen zusammenfassen. Dabei wird die Konfiguration für den betrachteten Punkt mit $\{a_0\}$ und die übrigen mit $\{a\}$ bezeichnet. Bei der Mittelung werden die effektiven Wechselwirkungen mit Impulsen auf diesen Hilfspunkten berechnet und mit dem Gewicht g berücksichtigt. Auf diese Art werden 24 Impulskonfigurationen neben der ursprünglich betrachteten in die Berechnung einbezogen, daher wird das Gewicht $g = 1/24$ gewählt. Auch für $g = 1/100$ werden Rechnungen durchgeführt, die Ergebnisse dieser Rechnungen für die verschiedenen Gewichte weichen nicht wesentlich voneinander ab.

Mit dieser Notation erhält man für die Summation die Form

$$\sum_{k_3, q_3} \frac{f(\{a_0\})z(\{a_0\}) + g \sum_{\{a\}} f(\{a\})z(\{a\})}{z^2(\{a_0\}) + e^2(\{a_0\}) + g \sum_{\{a\}} z^2(\{a\}) + e^2(\{a\})} \delta_{k+q, k_3+q_3} \quad (5.5)$$

Weiterhin hängt e nicht von den Summationindices ab, mit dieser Schreibweise soll lediglich verdeutlicht werden, daß auch dieser Beitrag bei der Mittelung verschiedene Werte annimmt.

Impulskonfigurationen				Gewicht
k	q	k_3	q_3	1
$k \pm \delta_{x/y}$	q	$k_3 \pm \delta_{x/y}$	q_3	g
$k \pm \delta_{x/y}$	q	k_3	$q_3 \pm \delta_{x/y}$	
k	$q \pm \delta_{x/y}$	$k_3 \pm \delta_{x/y}$	q_3	
k	$q \pm \delta_{x/y}$	k_3	$q_3 \pm \delta_{x/y}$	
$k \pm \delta_{x/y}$	$q \mp \delta_{x/y}$	k_3	q_3	
k	q	$k_3 \pm \delta_{x/y}$	$q_3 \mp \delta_{x/y}$	

Tabelle 5.1: Aufstellung der Impulskonfigurationen für die Mittelung durch die Hauptwertberechnung mit jeweiliger Gewichtung.

Da im Nenner nur quadratische Terme auftreten, sind alle Beiträge positiv, der Nenner ist für fast alle Punkte größer als Null. In den Kanälen V_H , V_F und V_Y gibt es Impulskonfigurationen $\{k, q\}$, für die der Nenner trotz der Mittelung verschwindet. Mit diesen Punkten wird so verfahren, daß die Mittelung über die vier nächsten Gitterpunkte gebildet wird.

Die Berechnung der effektiven Wechselwirkungen mit Hilfe der Mittelung über die Umgebung der Punkte wird in dieser Arbeit nicht auf die singulären Punkte beschränkt, sondern für alle Gitterpunkte angewandt.

5.3 Genauigkeit und Geschwindigkeit

Das Programm kann im wesentlichen eingeteilt werden in die Berechnung der effektiven Wechselwirkungen und in die Diagonalisierung der Matrizen der verschiedenen Symmetrien. Wie bereits erwähnt, hängt die Rechenzeit bei der Diagonalisierung einer $N \times N$ -Matrix von N^2 ab. Durch die Aufteilung in die verschiedenen Symmetrien ist $N = N_H/4$ für die größte zu diagonalisierende Matrix. Dagegen hängt die Berechnung der effektiven Wechselwirkungen von N_H^6 ab, d.h. die Ermittlung der Matrixelemente braucht den größten Teil der Rechenzeit.

Um die Genauigkeit der numerischen Berechnungen einschätzen zu können, sind einige Anmerkungen notwendig.

- Bei tiefen Temperaturen durchläuft die Besetzungszahl der Fermionen starke Änderungen in der Nähe der Fermikante. Daher muß untersucht werden, ob hier die Ergebnisse von der Gittereinteilung abhängig sind.
- Dazu kommt, daß für die Kanäle V_H , V_F und V_Y der Nenner für einige Impulskonfigurationen trotz Hauptwertberechnung verschwindet und nur durch die Mittelung über die nächsten Gitterpunkte ein Wert für die effektive Wechselwirkung bestimmt werden kann. Daher kann davon ausgegangen werden, daß die Ergebnisse in diesen Kanälen geringere Genauigkeit besitzen.
- Desweiteren besitzt der Entropiefaktor im Kanal V_{HF}, V_F eine exponentielle Abhängigkeit von $\beta(\epsilon - \mu)$, während im supraleitenden Kanal die Abhängigkeit der Form $2|\beta(\epsilon - \mu)|$ besteht. Die Entropiefaktoren der anderen Kanäle liegen zwischen den genannten Abhängigkeiten. Durch die starken Schwankungen der Entropiefaktoren besteht auch eine starke Abhängigkeit von der Gittereinteilung und der damit gewählten Gitterpunkte, für die die Entropie berechnet wird.

In der Tat kann beobachtet werden, daß die Ergebnisse in den Kanälen V_{HF} und V_F für Temperaturen $T/t < 0.05$ für unterschiedliche Gittereinteilungen zum Teil wesentlich voneinander abweichen. Dieser Effekt wird in Abschnitt (6.3) an einigen Beispielen demonstriert.

Kapitel 6

Resultate

In diesem Kapitel werden die Resultate der numerischen Berechnung der Flußgleichungen für das zweidimensionale Hubbardmodell auf dem Quadratgitter gezeigt. Die nachfolgenden Abbildungen sind, soweit nicht anders angegeben, für eine Gittereinteilung mit $N_H = 12$ berechnet. Dargestellt wird die kritische Wechselwirkung $(U/t)_C$ als Funktion der Temperatur T/t für verschiedene chemische Potentiale μ/t . In Abschnitt (6.1) werden die Ergebnisse für das Hubbardmodell mit reiner Nächster-Nachbar-Wechselwirkung gezeigt, in Abschnitt (6.2) folgen die Ergebnisse für verschiedene Übernächste-Nachbar-Wechselwirkungen. Im letzten Abschnitt dieses Kapitels wird die Abhängigkeit der Ergebnisse von der Gittereinteilung untersucht.

In der Tabelle (6.1) werden die häufig beobachteten Zustände mit niedrig liegenden kritischen Wechselwirkungen zusammengefaßt und ihre Darstellung in den folgenden Abbildungen gezeigt. Treten andere Zustände mit $(U/t)_C \leq 10$ auf, so werden sie durch eine graue durchgezogene Linie dargestellt.

Wechselwirkung	Kanal	Darstellung
Ferromagnetismus	ph tr 0 s_+
Antiferromagnetismus	ph tr q_+ s_+
Pomeranchuk-Instabilität	ph si 0 d_+	-----
Pomeranchuk-Instabilität	ph si 0 d_-	-----
Pomeranchuk-Instabilität	ph si 0 s_-	- - - - -
Bandsplitting	ph si q_- p	-----
Supraleitung	pp si 0 d_+	-----
Flußphasen	ph tr q_- d_+
Flußphasen	ph si q_- d_+

Tabelle 6.1: Wechselwirkungskanäle mit niedrigem U_c/t mit ihren Symmetrien und ihre Darstellung in den Diagrammen.

6.1 Hubbardmodell mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung

In diesem Abschnitt werden die Resultate für das Hubbardmodell mit reiner Nächster-Nachbar-Wechselwirkung gezeigt.

Für das Hubbardmodell bei halber Füllung (Abb. 6.1, links) erkennt man für tiefe Temperaturen eine dominierende antiferromagnetische Wechselwirkung. Dies stimmt mit den Erwartungen aus der Betrachtung der Fermifläche und Berechnungen mit Hilfe anderer Methoden überein. Betrachtet man die effektive Wechselwirkung genauer, so ist zu erkennen, daß im antiferromagnetischen Kanal der Beitrag zweiter Ordnung den Antiferromagnetismus unterdrückt. Daher verschwindet dieser für große Wechselwirkungen U/t . Das kann auch dadurch begründet werden, daß der Energiegewinn durch das virtuelle Hüpfen der Elektronen im antiferromagnetischen Grundzustand proportional zu t^2/U ist und somit für große Wechselwirkungen abnimmt. Bemerkenswert ist, daß in der störungstheoretischen Betrachtung der Flußgleichungen der Grenzfall für starke Kopplung im Fall des Antiferromagnetismus enthalten ist.

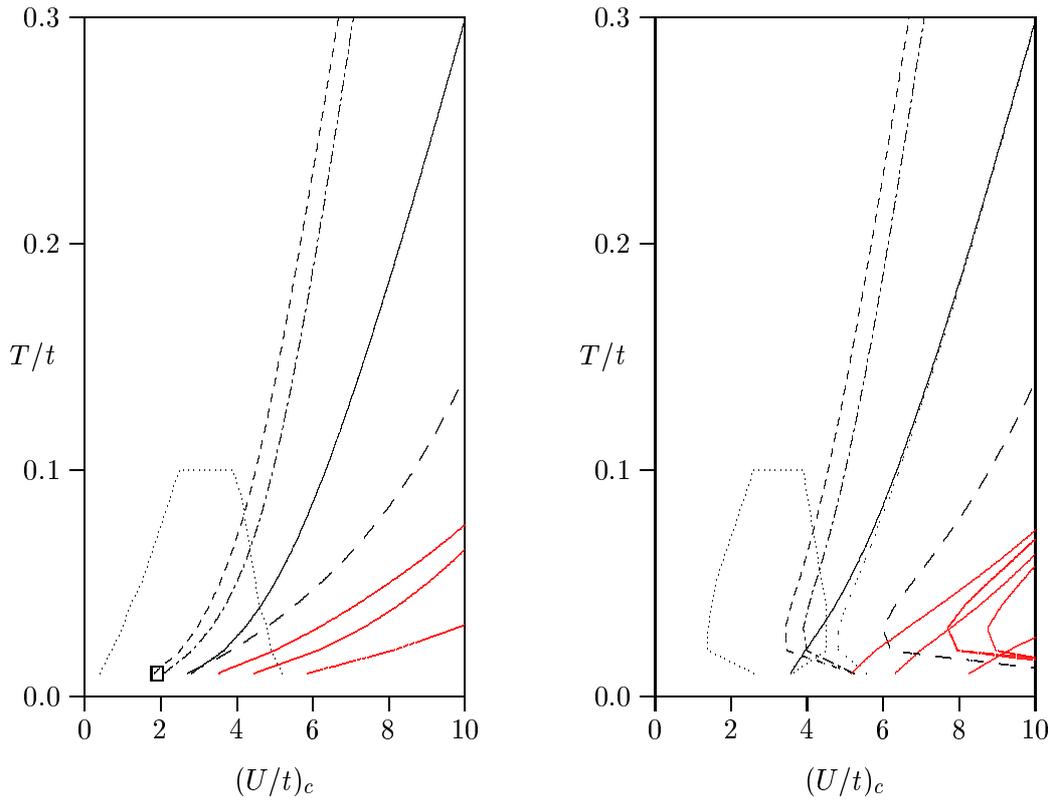


Abbildung 6.1: Kritische Wechselwirkungsstärke $(U/t)_C$ in Abhängigkeit von der Temperatur für Nächste-Nachbar-Wechselwirkung mit $t'/t = 0$ für die chemischen Potentiale $\mu/t = 0$ (links) und $\mu/t = 1/24$ (rechts).

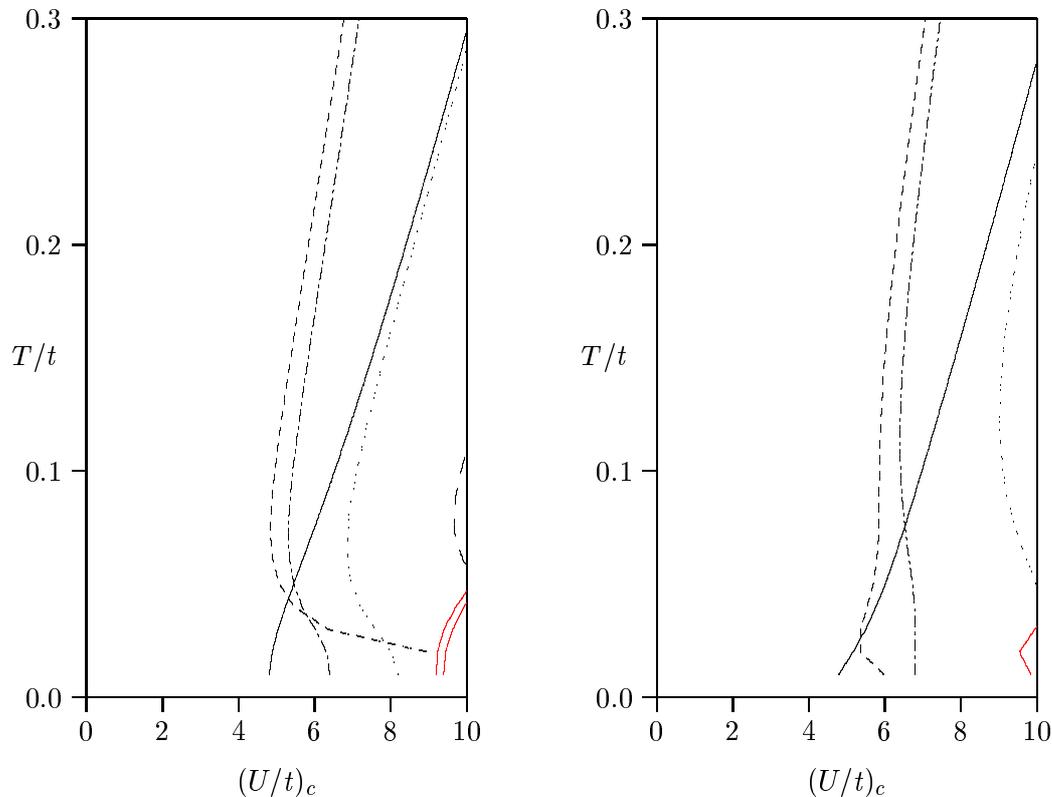


Abbildung 6.2: Kritische Wechselwirkungsstärke $(U/t)_C$ in Abhängigkeit von der Temperatur für Nächst-Nachbar-Wechselwirkung mit $t'/t = 0$ für die chemischen Potentiale $\mu/t = 1/8$ (links) und $\mu/t = 1/4$ (rechts).

Bei kleiner Änderung des chemischen Potentials (Abb. 6.1, rechts) wird der Antiferromagnetismus schwächer. Entfernt man sich weiter von der halben Füllung, verschwindet der Antiferromagnetismus bei $\mu/t = 1/8$ schließlich ganz (Abb. 6.2). Auch dies wurde bereits aufgrund der Betrachtungen der Fermikante erwartet.

Bei halber Füllung ist die nächste Instabilität eine homogene d_+ -Welle aus dem Teilchen-Loch-Kanal mit Spinsinglett. Diese Instabilität führt zu einer Deformation der Fermikante. Dadurch kann es zu einem Phasenübergang des Systems von rhomboedrischer zu tetragonaler Struktur kommen, daher wird diese Instabilität mit der Pomaranchuk-Instabilität identifiziert. Dies Ergebnis entspricht der Beobachtung mit Hilfe der Renormalisierungsgruppenanalyse von Halboth und Metzner [14].

Die nächste Instabilität ist eine p-Welle aus dem Teilchen-Loch-Kanal mit Singlett-Charakter und q_- -Symmetrie. Diese Instabilität führt zu einer abwechselnden Vergrößerung und Verkleinerung der Hüpfamplituden entlang der x- oder y-Achse. Diese Instabilität ruft eine Aufspaltung des Energiebandes hervor, dabei können sich die entstehenden Bänder weiter an einigen Punkten berühren.

Als nächstes folgt die d_+ -Wellen-Instabilität im Supraleitungskanal. Dies ist für alle un-

tersuchten chemischen Potentiale die stärkste Instabilität der supraleitenden Wechselwirkung. D.h. die beobachtete supraleitende $d_{x^2-y^2}$ -Instabilität, die auch aufgrund der Analyse durch andere Methoden erwartet wurde, wird auch mit der Untersuchung des Hubbardmodell mittels Flußgleichungen erhalten.

Entfernt man sich von halber Füllung, so ist die Supraleitung für tiefe Temperaturen die niedrigste Instabilität. Für höhere Temperaturen liegen die Pomeranchuk-Instabilität und die Bandsplitting-Instabilität weiter bei niedrigeren kritischen Wechselwirkungen als die Supraleitung. Daher muß untersucht werden, ob das Auftreten dieser Instabilitäten die Supraleitung unterdrückt oder ob die Instabilitäten gleichzeitig existent sind. Zusätzlich muß die Gitterabhängigkeit der Resultate für tiefe Temperaturen berücksichtigt werden.

Die nächsthöhere Instabilität sind die Flußphasen. Diese wurden bereits in anderen Veröffentlichungen diskutiert [25],[26]. Für reine Nächste-Nachbar-Wechselwirkung sind die Singlett- und Tripletzustände der d_+ -Welle der Flußphasen entartet, für halbe Füllung tritt eine weitere Entartung zur d_+ -Welle der Supraleitung auf.

Immer wieder zu beobachten ist bei höheren chemischen Potentialen eine weitere Pomeranchuk-Instabilität mit s_- -Wellen-Charakter. Dieser Zustand ist jedoch für kein berücksichtigtes chemisches Potential die niedrigste Deformation, somit ist zu erwarten, daß er durch die anderen Instabilitäten unterdrückt wird.

Die übrigen Instabilitäten, die in den Abbildungen durch graue durchgezogene Linien dargestellt werden, treten nur bei speziellen Parametern auf. Da sie bei höheren kritischen Wechselwirkungen liegen, beeinflussen sie den Phasenübergang in die beschriebenen Zustände nicht. Im Phasendiagramm bei halber Füllung ist noch ein ferromagnetischer Punkt für $T/t = 0.1$ bemerkenswert. Dieser verschwindet allerdings bei der Berechnung mit einer Gittergröße von $N_H = 24$ [15].

6.2 Hubbardmodell mit NNN-Wechselwirkung

In diesem Abschnitt werden die Resultate für das Hubbardmodell mit verschiedenen Übernächste-Nachbar-Wechselwirkungen (NNN) gezeigt. Dabei werden die Parameter $t'/t = -1/6$ für kleine, $t'/t = 1/3$ für mittlere und $t'/t = 5/12$ für große Hüpfamplituden zwischen übernächsten Nachbarn gewählt. Aufgrund der Gitterstruktur macht es keinen Sinn, $t'/t \geq 1/2$ zu wählen.

6.2.1 für $t'/t = -1/6$

Die folgenden Phasendiagramme beruhen auf Auswertungen mit der Hüpfamplitude $t'/t = -1/6$.

Nach der Betrachtung der Fermifläche kann erwartet werden, daß durch die Übernächste-Nachbar-Wechselwirkung die antiferromagnetische Ordnung unterdrückt wird. Dies wird auch in den berechneten Phasendiagrammen deutlich. Nur für das chemische Potential $\mu/t = -1/3$ tritt in einem sehr kleinen Bereich für $T/t = 0.01$ Antiferromagnetismus auf (Abb. 6.4, links). Bei einer Gittereinteilung von $N_H=16$ wird dieser Bereich weiter verkleinert. Daher muß untersucht werden, ob der Antiferromagnetismus bei größeren Gittern für dieses chemische Potential schließlich verschwindet.

Ist das chemische Potential kleiner als $\mu/t = -1/3$, so ist die Pomeranchuk-Instabilität mit d_+ -Symmetrie der Zustand mit der niedrigsten kritischen Wechselwirkungsstärke. Für steigende chemische Potentiale verschiebt sich diese Instabilität zu größeren $(U/t)_C$.

Das Verhalten der Bandsplitting-Instabilität ist entgegengesetzt. Daher liegt diese Instabilität bei kleineren μ/t höher und verschiebt sich mit wachsendem chemischen Potential zu niedrigeren kritischen Wechselwirkungsstärken. Für $\mu/t = -1/3$ liegen diese beiden Instabilitäten dicht beieinander, für größere μ/t ist die Bandsplitting-Instabilität dominierend.

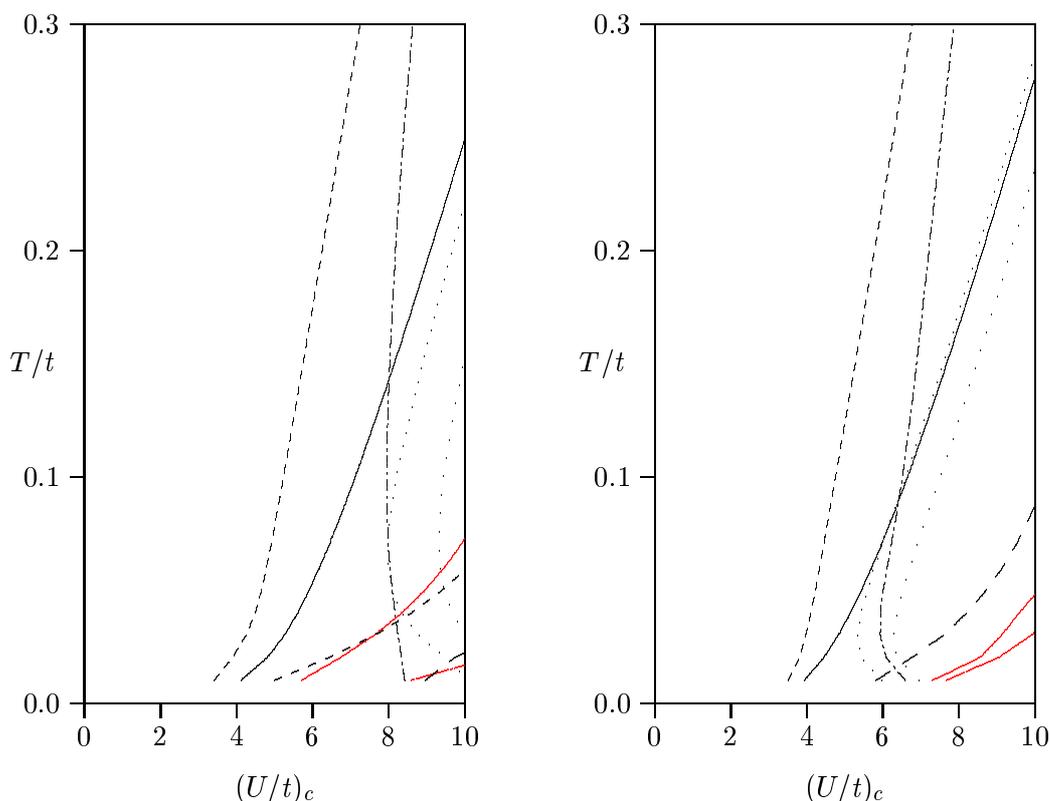


Abbildung 6.3: Kritische Wechselwirkungsstärke $(U/t)_C$ in Abhängigkeit von der Temperatur für Übernächste-Nachbar-Wechselwirkung mit $t'/t = -1/6$ für die chemischen Potentiale $\mu/t = -3/4$ (links) und $\mu/t = -7/12$ (rechts).

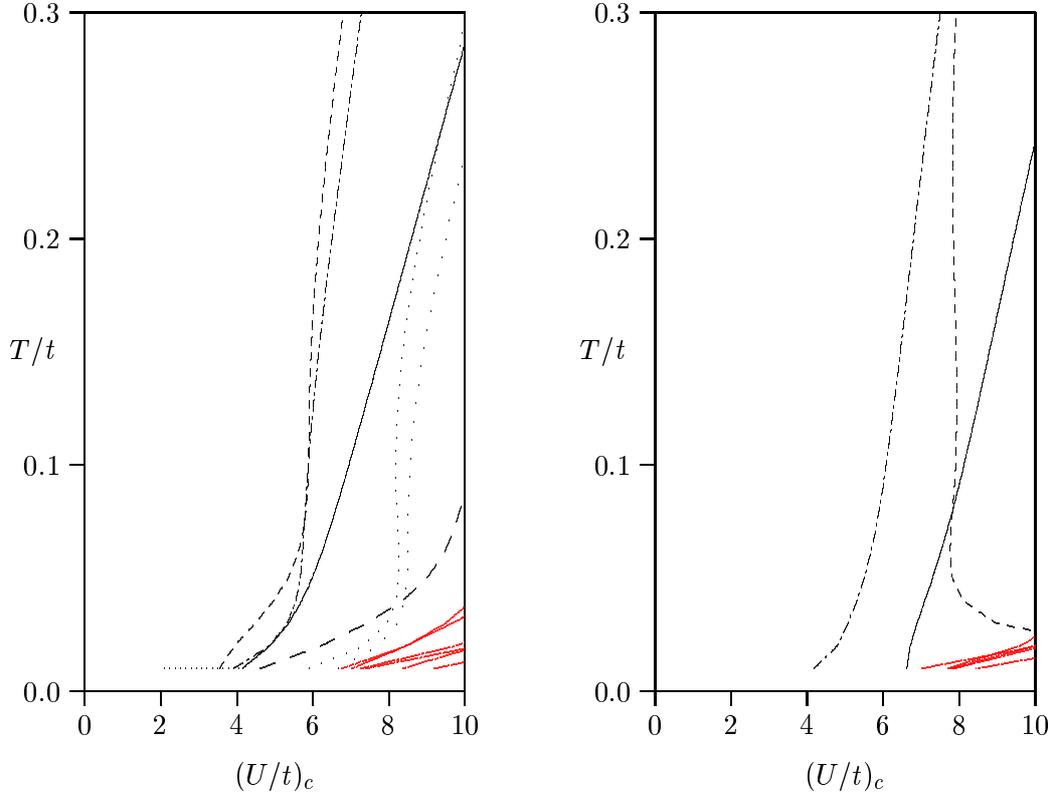


Abbildung 6.4: Kritische Wechselwirkungsstärke $(U/t)_C$ in Abhängigkeit von der Temperatur für Übernächste-Nachbar-Wechselwirkung mit $t'/t = -1/6$ für die chemischen Potentiale $\mu/t = -1/3$ (links) und $\mu/t = 0$ (rechts).

Für $\mu/t = 0$ tritt Supraleitung erst bei hohen $(U/t)_C \simeq 6.6$ auf (Abb. 6.4, rechts). Geht man über zu dotierten Systemen, so tritt die Instabilität bereits bei niedrigeren kritischen Wechselwirkungen auf. Verringert man das chemische Potential unterhalb von $\mu/t \leq -1/3$, so verändert sich die Lage der Instabilität für den supraleitenden Kanal kaum noch.

Für das chemische Potential $\mu/t = -3/4$ kann erstmals eine d_- -Pomeranchuk-Instabilität beobachtet werden (Abb. 6.3, links). Dies entspricht einer Deformation der Fermikante mit d_{xy} -Symmetrie, welche auch bei Hochtemperatursupraleitern im Experiment festgestellt werden kann. Allerdings tritt diese Instabilität für diese Hüpfamplitude nur für tiefe Temperaturen auf und besitzt eine höhere kritische Wechselwirkung als die d_+ -Pomeranchuk-Instabilität. Daher ist aus diesen Berechnungen nicht ersichtlich, inwieweit die d_- -Deformation der Fermikante beobachtet werden kann oder durch die vorhandene d_+ -Deformation unterdrückt wird.

Die Flußphasen mit Spinsinglett und -triplett sind bei Übernächster-Nachbar-Wechselwirkung nicht mehr entartet, für alle untersuchten chemischen Potentiale besitzt der Tripletzzustand die niedrigere kritische Wechselwirkung. Für $\mu/t = -7/12$ liegt die Flußphasen-Instabilität mit Triplettsymmetrie dicht bei der Supraleitungsinstabilität

(Abb. 6.3, rechts), für alle übrigen chemischen Potentiale liegt dieser Zustand im Vergleich zur Supraleitung bei dieser Wahl der Hüpfamplitude bei $(U/t)_C$.

Auch für $t'/t = -1/6$ erscheint die s_- -Pomeranchuk-Instabilität in den Diagrammen, liegt jedoch in allen Abbildungen bei höheren kritischen Wechselwirkungen als die entsprechende d_+ -Welle. Für $\mu/t = -1/3$ erreicht die s_- -Instabilität für tiefe Temperaturen ein minimales $(U/t)_C \simeq 4.6$. Allerdings muß auch hier beachtet werden, daß die Ergebnisse für tiefe Temperaturen in diesem Wechselwirkungskanal weniger zuverlässig sind als beispielsweise in dem Supraleitungskanal.

6.2.2 für $t'/t = -1/3$

Für mittlere Übernächste-Nachbar-Wechselwirkung werden die folgenden Ergebnisse erhalten.

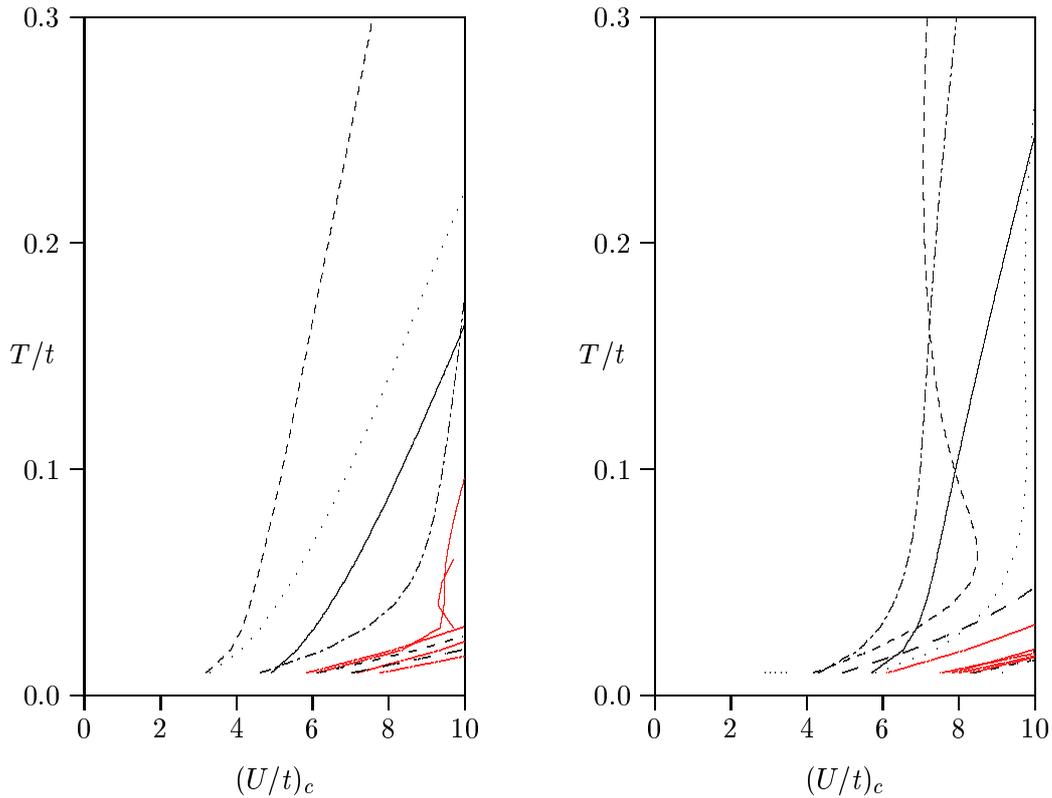


Abbildung 6.5: Kritische Wechselwirkungsstärke $(U/t)_C$ in Abhängigkeit von der Temperatur für Übernächste-Nachbar-Wechselwirkung mit $t'/t = 1/3$ für die chemischen Potentiale $\mu/t = -5/4$ (links) und $\mu/t = -2/3$ (rechts).

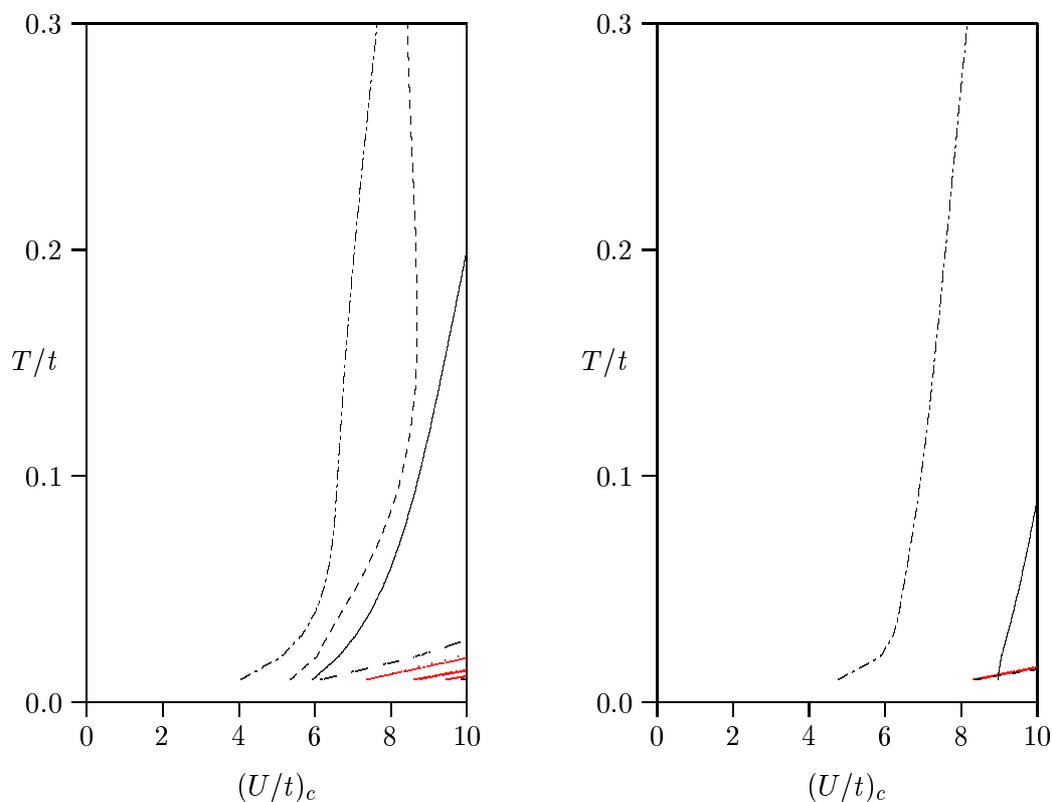


Abbildung 6.6: Kritische Wechselwirkungsstärke $(U/t)_C$ in Abhängigkeit von der Temperatur für Übernächste-Nachbar-Wechselwirkung mit $t'/t = -1/3$ für die chemischen Potentiale $\mu/t = -1/3$ (links) und $\mu/t = 0$ (rechts).

Der Antiferromagnetismus tritt nur für das chemische Potential $\mu/t = -2/3$ bei der Temperatur $T/t = 0.01$ auf (Abb. 6.5, rechts). Für größere N_H sollte untersucht werden, ob der antiferromagnetischer Zustand weiterhin beobachtet werden kann.

Bei niedrigem chemischen Potential mit $\mu/t < -2/3$ dominiert die Pomeranchuk-Instabilität. Diese verschiebt sich für wachsendes chemisches Potential zu höheren kritischen Wechselwirkungen. Die übrigen Pomeranchuk-Instabilitäten mit s_- - und d_- -Symmetrie können ebenfalls beobachtet werden, allerdings bei höheren $(U/t)_C$.

Für großes chemisches Potential mit $\mu/t > -2/3$ dominiert die Bandsplitting-Instabilität, diese verschiebt sich für fallendes chemisches Potential zu höheren kritischen Wechselwirkungen. In der Umgebung des chemischen Potential $\mu/t = -2/3$ findet ein Übergang zwischen den dominierenden Instabilitäten statt.

Die niedrigste supraleitende Instabilität ist auch für diese Hüpfamplitude für alle chemischen Potentiale die d_+ -Welle. Wie in den vorangegangenen Diagrammen auch, liegt diese bei höheren kritischen Wechselwirkungen als Pomeranchuk- bzw. Bandsplitting-Instabilität.

Bei den Flußphasen tritt hauptsächlich der Tripletzustand auf, nur für $\mu/t = -1$ kann der Singlettzustand beobachtet werden, allerdings mit hoher kritischen Wechselwirkung. Der Tripletzustand liegt erstmals für chemische Potentiale zwischen $\mu/t = \epsilon_{vH}$ und $\mu/t = -1$ niedriger als der supraleitende Zustand (Abb. 6.5, links). Hier muß untersucht werden, ob die Deformation der Fermikante durch die führende d_+ -Pomeranchuk-Instabilität die Flußphasen unterdrückt.

6.2.3 für $t'/t = -5/12$

Abschließend werden die Phasendiagramme für große Übernächste-Nachbar-Wechselwirkung $t'/t = -5/12$ dargestellt.

Die Abbildung für stark negative chemische Potential mit z.B. $\mu/t = -2$ zeigt einige Besonderheiten (Abb. 6.7, links). Erstmals tritt die Pomeranchuk-Instabilität mit d_- -Symmetrie als führende Deformation des Gitters für $T/t \geq 0.16$ auf. Dies bedeutet eine Verformung mit d_{xy} -Symmetrie, welche bereits in Experimenten nachgewiesen werden konnte.

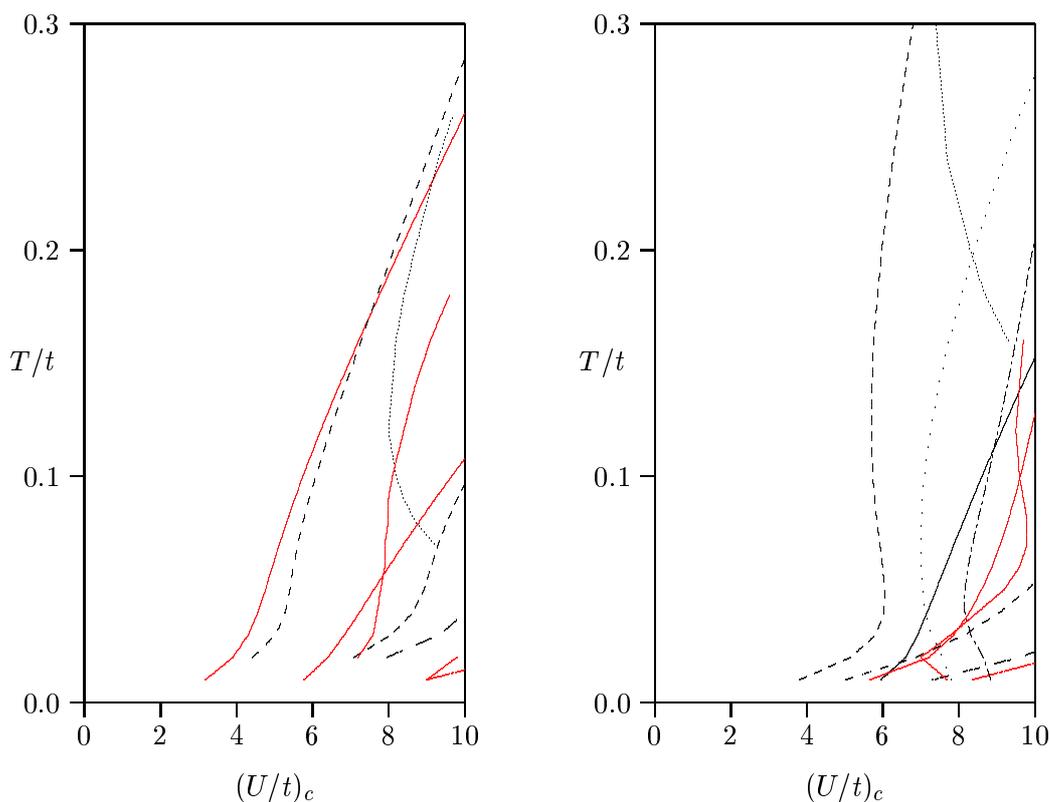


Abbildung 6.7: Kritische Wechselwirkungsstärke $(U/t)_C$ in Abhängigkeit von der Temperatur für Übernächste-Nachbar-Wechselwirkung mit $t'/t = -5/12$ für die chemischen Potentiale $\mu/t = -2$ (links) und $\mu/t = -4/3$ (rechts).

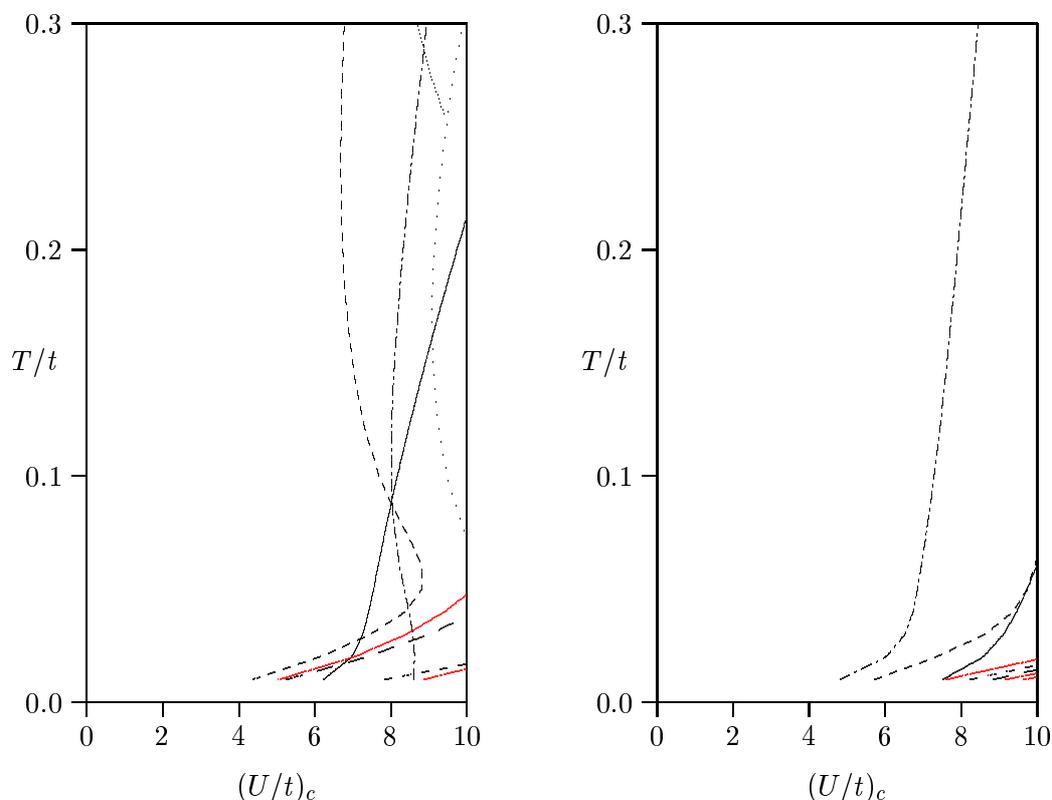


Abbildung 6.8: Kritische Wechselwirkungsstärke $(U/t)_C$ in Abhängigkeit von der Temperatur für Übernächste-Nachbar-Wechselwirkung mit $t'/t = -5/12$ für die chemischen Potentiale $\mu/t = -1$ (links) und $\mu/t = 0$ (rechts).

Oberhalb von $\mu/t = -4/3$ tritt dieser Zustand nur für tiefe Temperaturen $T/t \leq 0.05$ auf und ist nicht mehr dominant.

In der Nähe der d_- -Pomeranchuk-Instabilität im Phasendiagramm zu $\mu/t = -2$ liegt der Teilchen-Loch-Kanal mit Spintriplett und p-Wellensymmetrie. Er beginnt bei $(U/t)_C \simeq 3.1$ für $T/t = 0.01$. Dies bedeutet analog zum Bandsplitting eine Vergrößerung oder Verkleinerung der Hüpfamplituden in x-Richtung oder bzw. und y-Richtung. Während beim Bandsplitting allerdings eine alternierende Vergrößerung und Verkleinerung der Wechselwirkungen stattfindet, ist dieser Kanal homogen.

Außerdem kann für $\mu/t = -2$ für starke Wechselwirkung ein Bereich, in dem Ferromagnetismus auftritt, beobachtet werden. Verantwortlich hierfür ist der homogene Teilchen-Loch-Kanal mit Spintriplett und s_+ -Symmetrie. Nach dem Stonerkriterium tritt Ferromagnetismus im Hubbardmodell für genügend starke Wechselwirkung bzw. große Zustandsdichte auf. Obwohl die Berechnungen durch die Störungstheorie im Grenzfall schwacher Kopplungen durchgeführt werden, ist dieser Effekt für starke Kopplungen im Phasendiagramm enthalten.

In dem Phasendiagramm für $\mu/t = -2$ ist eine weitere Besonderheit zu verzeichnen. Beginnend bei $(U/t)_C = 5.8$ für $T/t = 0.01$ tritt eine supraleitende Instabilität mit d_- -Symmetrie auf. Dies ist jedoch das einzige chemische Potential, bei dem in den berechneten Diagrammen dieser Zustand beobachtet werden kann.

Ab einem chemischen Potential $\mu/t = -4/3$ gleichen die Diagramme wieder Phasendiagrammen anderer Hüpfamplituden. Die d_+ -Pomeranchuk-Instabilität dominiert für kleines chemisches Potential, bei $\mu/t = -2/3$ findet ein Übergang zu einer dominierenden Bandsplitting-Instabilität statt.

Die d_+ -Wellen-Supraleitung tritt oberhalb von $\mu/t = -4/3$ auf. Für $\mu/t = -1$ existiert ein Temperaturbereich für tiefe Temperaturen, in dem die Supraleitung dominiert.

6.3 Vergleich verschiedener Gittereinteilungen

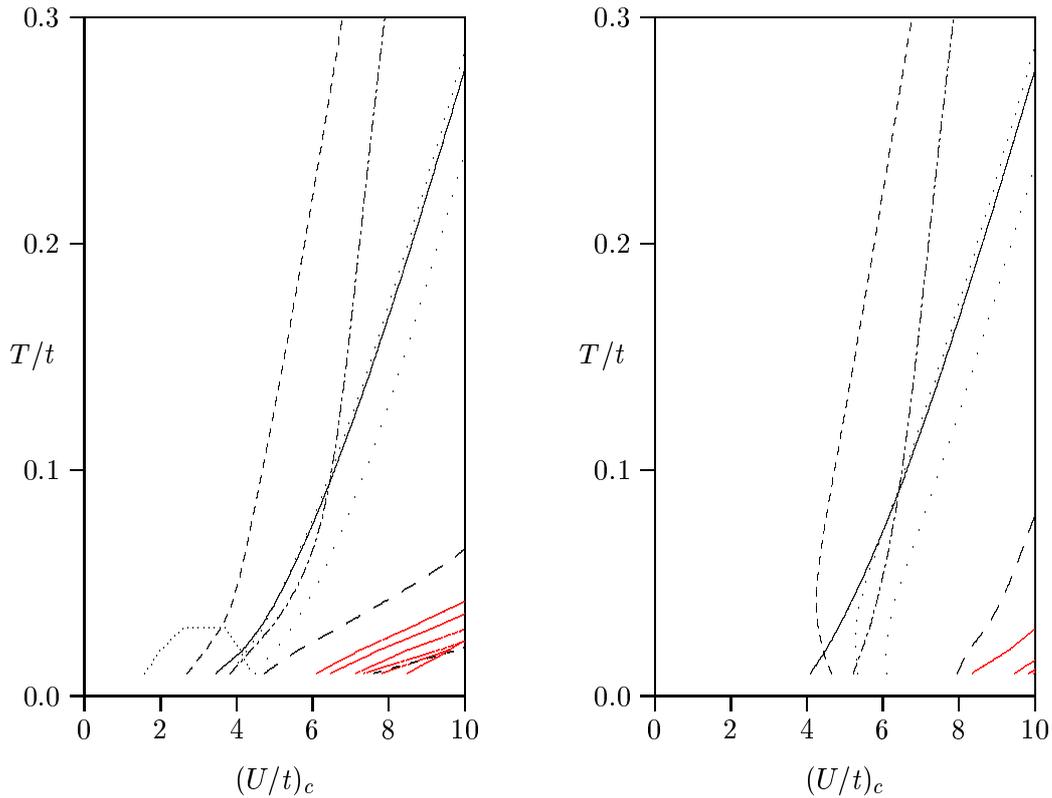


Abbildung 6.9: Kritische Wechselwirkungsstärke $(U/t)_C$ in Abhängigkeit von der Temperatur für Übernächste-Nachbar-Wechselwirkung mit $t'/t = -1/6$ für das chemische Potential $\mu/t = -7/12$, berechnet für verschiedene Gitteraufteilungen $N_H = 8$ (links) und $N_H = 16$ (rechts).

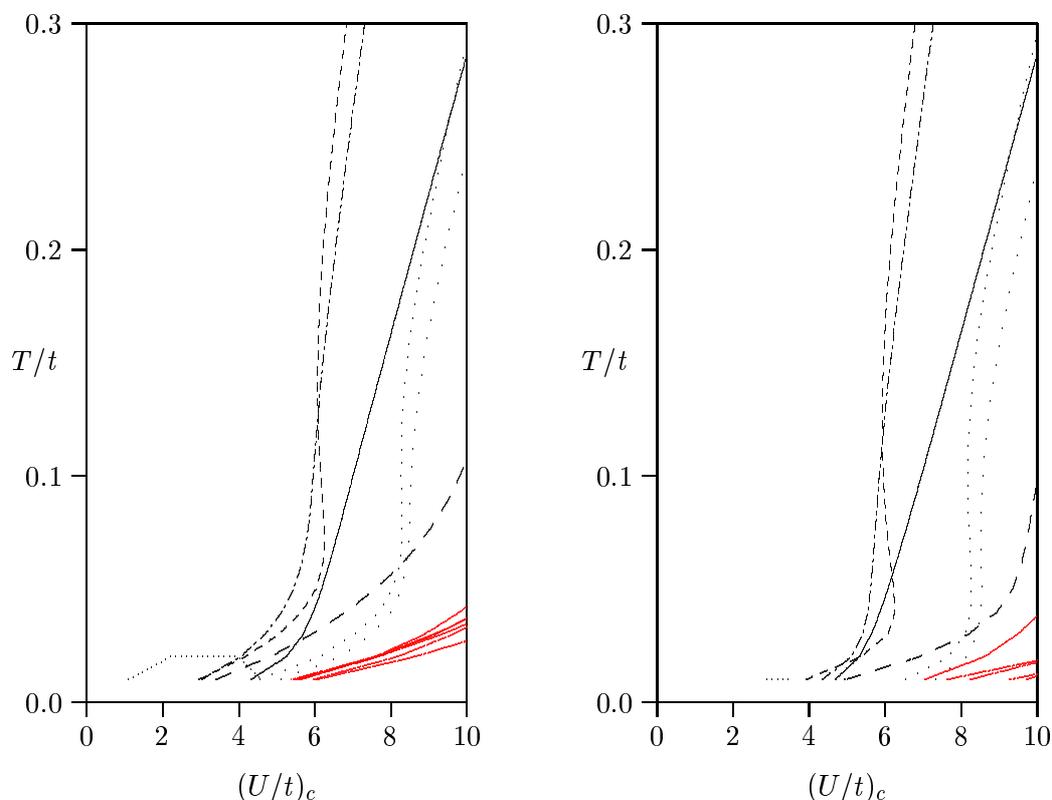


Abbildung 6.10: Kritische Wechselwirkungsstärke $(U/t)_c$ in Abhängigkeit von der Temperatur für Übernächste-Nachbar-Wechselwirkung mit $t'/t = -1/6$ für das chemische Potential $\mu/t = -1/3$, berechnet für verschiedene Gitteraufteilungen $N_H = 8$ (links) und $N_H = 16$ (rechts).

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse für die Berechnungen mit verschiedenen Gittereinteilungen miteinander verglichen. Hierzu werden die Diagramme für $N_H = 8$ und $N_H = 16$ nebeneinandergestellt, zu denselben Parametern t'/t und μ/t befinden sich in Abschnitt 6.2.1 in den Abbildungen 6.3 und 6.4 die entsprechenden Phasendiagramme für $N_H = 12$.

Vergleicht man die Ergebnisse für verschiedene Gittereinteilungen, so macht man die folgenden Beobachtungen:

- Für Temperaturen $T/t > 0.05$ liefern bereits die Berechnungen für Gitter mit einer Einteilung von $N_H = 8$ gute Ergebnisse. Diese werden auch bei einer feineren Einteilung des Gitters kaum noch verändert.
- Für Temperaturen $T/t < 0.05$ hängen die Ergebnisse in einigen Kanälen von der gewählten Gittereinteilung ab. Die Ursache der Gitterabhängigkeit wird in Abschnitt (5.3) erläutert. Am Beispiel der Pomeranchuk-Instabilitäten, die auf den Hartree-

Fock-Kanal zurückzuführen sind, wird deutlich, daß das Verhalten der Kurven stark von N_H abhängt.

Betrachtet man hingegen den supraleitenden Kanal, so stellt man für alle Gittereinteilungen dasselbe qualitative Verhalten fest, lediglich eine geringe Verschiebung zu höheren kritischen Wechselwirkungen für feinere Gitter ist festzuhalten.

- Speziell für den Antiferromagnetismus fällt auf, daß der Bereich, in dem dieser Zustand auftritt, mit wachsender Gittergröße abnimmt bzw. ganz verschwindet. Auch andere

Daher ist eine genauere Betrachtung des Tieftemperaturverhaltens notwendig, um die Ergebnisse in diesem Temperaturbereich in allen Wechselwirkungskanälen einschätzen zu können. Erst dann kann eine Aussage über die führenden Instabilitäten bei tiefen Temperaturen getroffen werden.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wird das Hubbardmodell mit Hilfe der Flußgleichungen untersucht und im Rahmen einer störungstheoretischen Betrachtung ausgewertet. Die Auswertungen werden sowohl für das Hubbardmodell mit reiner Nächster-Nachbar-Wechselwirkung als auch für das Hubbardmodell mit Übernächster-Nachbar-Wechselwirkung durchgeführt.

Dabei erhält man für reine Nächste-Nachbar-Wechselwirkung in der Nähe halber Füllung eine führende antiferromagnetische Ordnung. Auch die erwartete Supraleitung mit d_+ -Symmetrie kann nachgewiesen werden. Weiter treten d_+ - und s_- -Pomeranchuk-Instabilitäten, Bandsplitting und Flußphasen auf.

Bei der Auswertung für Übernächste-Nachbar-Wechselwirkung bleibt festzustellen, daß der Antiferromagnetismus bis auf einen kleinen Bereich des Phasendiagramms weitgehend verdrängt wird. d_+ -Wellen-Supraleitung sowie die erwähnten übrigen Instabilitäten werden weiter beobachtet. Bei großen Hüpftermen zwischen Übernächsten Nachbarn treten für stark negative chemische Potentiale eine d_- -Pomeranchuk-Instabilität und eine Veränderung der Hüpfsterme auf. Für einen weiten Bereich des chemischen Potentials tritt für große U/t Ferromagnetismus auf.

Insgesamt ist festzustellen, daß die wesentlichen Elemente der Phasendiagramme der Hochtemperatursupraleiter mit Hilfe der Berechnung der Flußgleichungen des Hubbardmodell erhalten werden. Die Konkurrenz zwischen Antiferromagnetismus und Supraleitung sowie die Existenz eines Phasenübergangs von tetragonaler zu rhomboedrischer Gitterstruktur werden gezeigt.

Um zu untersuchen, ob die Pomeranchuk-Instabilität bzw. das Bandsplitting das Auftreten der Supraleitung behindert, muß bei weitergehenden Berechnungen die Veränderung der Form der Fermifläche bzw. der Einteilchenenergien berücksichtigt werden.

Bei den durchgeführten Berechnungen wird eine Störungstheorie für schwache Kopplungen durchgeführt. Dennoch werden einige Ergebnisse, die auf starken Kopplungen beruhen, im

Rahmen dieser Rechnung erhalten. Dies spricht dafür, daß die Berechnungen zumindest eine gute Abschätzung der wesentlichen Instabilitäten liefern.

Weiter bleibt festzuhalten, daß das Verhalten der Instabilitäten bei tiefen Temperaturen einer genaueren Untersuchung bedarf. Hier sind Bestrebungen in der Arbeitsgruppe im Gange, die dahin zielen, die Berechnung der Entropie so durchzuführen, daß der Effekt der starken Gitterabhängigkeit nicht mehr auftritt.

Anhang A

Kommutatoren

In dieser Arbeit wird die allgemeine Definition des Hamiltonoperators

$$H_1 = \sum_k A_k : N_{kk} : \quad (\text{A.1})$$

$$H_2 = \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ q_1 q_2}} B_{k_1 k_2 q_1 q_2} : N_{k_1 q_1} N_{k_2 q_2} : \quad (\text{A.2})$$

benutzt.

Durch die Einführung der Normalordnung werden die Operatoren in den einzelnen Termen so angeordnet, daß die Erzeugungsoperatoren links von den Vernichtungsoperatoren stehen. Dadurch ist der Grundzustand des Hamiltonoperators in Bezug auf das wechselwirkungsfreie System eindeutig definiert.

Im folgenden werden die zur Berechnung der Flußgleichungen notwendigen Kommutatoren aufgestellt. Dabei werden bei diesem Ansatz für den Hamiltonoperator und einer Betrachtung der Flußgleichungen bis zur 2. Ordnung in der Störungstheorie lediglich Kommutatoren zwischen Ein- und Zweiteilchenbeiträgen benötigt.

Für den Kommutator zwischen zwei Einteilchenoperatoren erhält man

$$[H_1^a, H_1^b] = 0 \quad , \quad (\text{A.3})$$

d.h. die Operatoren vertauschen.

Der Kommutator zwischen einem Einteilchenoperator und einem Zweiteilchenoperator gibt

$$[H_1, H_2] = \frac{1}{2} \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ q_1 q_2}} (B \Delta A)_{k_1 k_2 q_1 q_2} : N_{k_1 q_1} N_{k_2 q_2} : \quad (\text{A.4})$$

$$(\Delta A)_{k_1 k_2 q_1 q_2} = A_{k_1} + A_{k_2} - A_{q_1} - A_{q_2} \quad . \quad (\text{A.5})$$

Steht also im Einteilchenoperator die Energie $A_k = \epsilon_k$, so bedeutet (A.5) die Differenz zwischen den Energien der Erzeuger und den Energien der Vernichter. Ist diese Differenz gleich Null, so verschwindet der entsprechende Term.

Für den Kommutator zwischen zwei Zweiteilchenoperatoren erhält man

$$\begin{aligned}
[H_2^a, H_2^b] &= \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ q_1 q_2}} \sum_{k_3 q_3} : N_{k_1 q_1} N_{k_2 q_2} : \\
&\times \left((n_{k_3} - n_{q_3}) (B_{k_3 k_1 q_3 q_1}^a B_{q_3 k_2 k_3 q_2}^b - B_{q_3 k_2 k_3 q_2}^a B_{k_3 k_1 q_3 q_1}^b) \right. \\
&\quad - \frac{1}{2} (n_{k_3} - n_{q_3}) (B_{k_3 k_1 q_3 q_1}^a B_{q_3 k_2 q_2 k_3}^b - B_{q_3 k_2 q_2 k_3}^a B_{k_3 k_1 q_3 q_1}^b) \\
&\quad - \frac{1}{2} (n_{k_3} - n_{q_3}) (B_{k_1 k_3 q_3 q_1}^a B_{q_3 k_2 k_3 q_2}^b - B_{q_3 k_2 k_3 q_2}^a B_{k_1 k_3 q_3 q_1}^b) \\
&\quad + \frac{1}{2} (1 - n_{k_3} - n_{q_3}) (B_{k_1 k_2 k_3 q_3}^a B_{k_3 q_3 q_1 q_2}^b - B_{k_3 q_1 q_1 q_2}^a B_{k_1 k_1 k_3 q_3}^b) \\
&\quad \left. - \frac{1}{2} (n_{k_3} - n_{q_3}) (B_{k_3 k_1 q_2 q_3}^a B_{k_2 q_3 k_3 q_1}^b - B_{k_2 q_3 k_3 q_1}^a B_{k_3 k_1 q_2 q_3}^b) \right) \\
&+ \sum_k \sum_{k_2 k_3 k_4} : N_{kk} : (n_{k_2} (1 - n_{k_3} - n_{k_4}) + n_{k_3} n_{k_4}) \\
&\times \left((B_{k_2 k k_3 k_4}^a B_{k_3 k_4 k_2 k}^b - B_{k_3 k_4 k_2 k}^a B_{k_2 k k_3 k_4}^b) \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{2} (B_{k_2 k k_3 k_4}^a B_{k_4 k_3 k_2 k}^b - B_{k_4 k_3 k_2 k}^a B_{k_2 k k_3 k_4}^b) \right) \tag{A.6}
\end{aligned}$$

unter Berücksichtigung der Symmetrie

$$B_{k_1 k_2 q_1 q_2} = B_{k_2 k_1 q_2 q_1} \quad . \tag{A.7}$$

Dabei ist

$$n_k = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\epsilon_k - \mu}{kT}\right)} \tag{A.8}$$

die Besetzungszahl für Fermionen. Bei der Berechnung des Kommutators zwischen zwei Zweiteilchenoperatoren treten zusätzlich Dreiteilchenwechselwirkungen auf. Diese werden für die weiteren Berechnungen vernachlässigt.

Literaturverzeichnis

- [1] J.G. Bednorz, K.A. Müller, Z. Phys. B **64**,189 (1986).
- [2] J.M. Tarascon et al., Phys. Rev. B **38**, 8885 (1988).
- [3] K. Kitazawa et al., Physica C **153-155**, 9 (1988).
- [4] G. Dopf, A. Muramatsu, W. Hanke, Phys. Rev. B **41**, 9264 (1990).
- [5] R.T. Scalettar, D.J. Scalapino, R.L. Sugar, S.R. White, Phys. Rev. B **44** 770 (1991).
- [6] J.R. Schrieffer, P.A. Wolff, Phys. Rev. **149**, 491 (1996).
- [7] L. Foldy, S.A. Wouthuysen, Phys. Rev. **78**, 29 (1950).
- [8] F. Wegner, Annalen der Physik (Leipzig) **3**, 77 (1994).
- [9] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. **A 276**, 238 (1963).
- [10] M.C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. **10**, 159 (1963).
- [11] J. Kanamori, Prog. Theor. Phys. **30**, 275 (1963).
- [12] D.J. Scalapino, Phys. Reports **250**, 329 (1995).
- [13] C.J. Halboth, W. Metzner, Phys. Rev. B **61**, 4364 (2000).
- [14] C.J. Halboth, W. Metzner, Phys. Rev Lett. **85**, 5162 (2000).
- [15] I. Grote, E. Körding, F. Wegner, Journal of Low Temp. Phys. **126**, 1385 (2002).
- [16] K.G. Wilson, S.D. Glazek, Phys. Rev. D **48**, 5863 (1993).
- [17] K.G. Wilson, S.D. Glazek, Phys. Rev. D **49**, 4214 (1994).
- [18] W. Buckel, „Supraleitung“, 5.Auflage, VCH (1993).
- [19] F. Sicking, J. Fröhlingsdorf, Phys. Bl. Okt, 57 (2001).
- [20] J.D. Jörgensen et al., Physica C **153-155**, 578 (1988).

- [21] V.J. Emery, Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1988).
- [22] A. Mielke, Skript zur Vorl. „Das Hubbardmodell“, (2001).
- [23] O. Madelung, „Introduction to Solid-State Theory“, 3. Auflage, Springer (1996).
- [24] W.H. Press et al. , „Numerical Recipes in C“, 2. Auflage, Cambridge University Press (1995).
- [25] G. Kotliar, Phys. Rev. B **37**, 3664 (1988).
- [26] I. Affleck, J.B. Marston, Phys. Rev. B **37**, 3774 (1988).

Abbildungsverzeichnis

3.1	Fermifläche des Hubbardmodells	22
3.2	Schematische Darstellung der Symmetrien gerader Parität	26
5.1	Gittereinteilung der 1. Brillouinzone mit Hilfspunkten zur Mittelung	41
6.1	$(U/t)_C$ gegen T/t für $\mu/t = 0$ und $\mu/t = 1/24$ für reine NN	44
6.2	$(U/t)_C$ gegen T/t für $\mu/t = 1/8$ und $\mu/t = 1/4$ für reine NN	45
6.3	$(U/t)_C$ gegen T/t für $\mu/t = -3/4$ und $\mu/t = -7/12$ mit $t'/t = -1/6$	47
6.4	$(U/t)_C$ gegen T/t für $\mu/t = -1/3$ und $\mu/t = 0$ mit $t'/t = -1/6$	48
6.5	$(U/t)_C$ gegen T/t für $\mu/t = -5/4$ und $\mu/t = -2/3$ mit $t'/t = -1/3$	49
6.6	$(U/t)_C$ gegen T/t für $\mu/t = -1/3$ und $\mu/t = 0$ mit $t'/t = -1/3$	50
6.7	$(U/t)_C$ gegen T/t für $\mu/t = -2$ und $\mu/t = -4/3$ mit $t'/t = -5/12$	51
6.8	$(U/t)_C$ gegen T/t für $\mu/t = -1$ und $\mu/t = -0$ mit $t'/t = -5/12$	52
6.9	$(U/t)_C$ gegen T/t mit $\mu/t = -7/12$ für $t'/t = -1/6$ und $N_H = 8$ sowie $N_H = 16$	53
6.10	$(U/t)_C$ gegen T/t mit $\mu/t = -1/3$ für $t'/t = -1/6$ und $N_H = 8$ sowie $N_H = 16$	54

Tabellenverzeichnis

1.1	Hochtemperatursupraleiter mit ihrer Sprungtemperatur	3
3.1	Benutzte Parameter für das Hubbardmodell	23
3.2	Irreduzible Darstellungen für C_4	27
4.1	Aufstellung der betrachteten Wechselwirkungskanäle	36
5.1	Impulskonfigurationen bei der Hauptwertberechnung	41
6.1	Wechselwirkungskanäle mit niedrigem $(U/t)_C$	43