

Sz
9425a

**Gutzwiller-korrelierte Wellenfunktionen
in endlichen Dimensionen d:
Eine systematische Entwicklung in $1/d$**

Florian Paul Gebhard

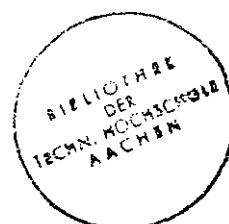
**Gutzwiller-korrelierte Wellenfunktionen
in endlichen Dimensionen d:
Eine systematische Entwicklung in 1/d**

Von der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
-Fachbereich 1-
der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen
zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften genehmigte Dissertation

Vorgelegt von

Diplom-Physiker
FLORIAN PAUL GEBHARD

aus
Tegernsee/Bayern



Referent: Universitätsprofessor Dr. D. Vollhardt
Korreferent: Universitätsprofessor Dr. G. Czycholl

Tag der mündlichen Prüfung: 14. Februar 1990

für Martina

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	1
1.1 Problemstellung	1
1.2 Aufbau der Arbeit	5
2 Allgemeiner Formalismus	7
2.1 Hubbard-Modell und Variationswellenfunktionen	7
2.1.1 Hubbard-Modell	7
2.1.2 Variationswellenfunktionen	11
2.2 Verallgemeinerte Gutzwiller-korrelierte Variationswellenfunktionen	13
2.2.1 Methode von Metzner und Vollhardt	13
2.2.2 Effizienter Formalismus für hohe Dimensionen	15
2.3 Graphenformalismus für die Einteilchen-Dichtematrix und die mittlere Doppelbesetzung	19
3 Exakte Durchführung des Variationsverfahrens in $d = \infty$: Grundzustandsenergien	26
3.1 Hubbard-Modell	26
3.1.1 Allgemeiner Ausdruck für die Grundzustandsenergie	26
3.1.2 Exakte Ergebnisse für die Gutzwiller-korrelierte antiferromagnetische Spindichtewelle	28
3.2 Periodisches Anderson-Modell	31
3.2.1 Hamilton-Operator und Variationswellenfunktionen	31
3.2.2 Allgemeiner Ausdruck für die Grundzustandsenergie	33
3.2.3 Ergebnisse für die Rice-Ueda-Brandow Variationswellenfunktion	37
3.2.4 Vergleich mit „Mean-Field“-Rechnungen	40

4 Exakte Durchführung des Variationsverfahrens in $d = \infty$: Korrelationsfunktionen	46
4.1 Definition und allgemeiner Graphenformalismus	46
4.2 Berechnung im Limes $d \rightarrow \infty$	50
4.2.1 Allgemeine Behandlung	51
4.2.2 Allgemeine Nächst-Nachbar Korrelationsfunktionen	54
4.2.3 Ergebnisse für die paramagnetische Gutzwiller-Wellenfunktion	57
5 Vergleich mit Näherungsverfahren	62
5.1 Erweiterte Gutzwiller-Approximationen	62
5.1.1 Hubbard-Modell	63
5.1.2 Periodisches Anderson-Modell	66
5.2 Slave-Boson-Methode von Kotliar und Ruckenstein	68
5.2.1 Kurze Darstellung des Verfahrens	69
5.2.2 Diskussion der Methode und ihrer Ergebnisse	71
6 Berechnung von $1/d$-Korrekturen im Falle der paramagnetischen Gutzwiller-Wellenfunktion	75
6.1 Korrektur in erster Ordnung für beliebige Bandfüllung	75
6.2 Korrektur in zweiter Ordnung für halbgefülltes Band	80
7 Vergleich mit exakten und numerischen Ergebnissen für die paramagnetische Gutzwiller-Wellenfunktion in $d=1,2,3$	85
7.1 Doppelbesetzung und potentielle Energie	85
7.2 Mittlere kinetische Energie und Grundzustandsenergie	89
7.3 Impulsverteilung und Sprung an der Fermikante	94

8 Neue Variationswellenfunktionen	97
8.1 Hubbard- und t-J-Modell	97
8.2 Spin-1/2-Heisenberg-Modell	101
8.2.1 Optimale Gutzwiller-korrelierte antiferromagnetische Spindichtewelle zur Ordnung $1/d$	102
8.2.2 Vergleich mit anderen Verfahren	103
8.2.3 Interpretation der neuen Wellenfunktion	107
9 Zusammenfassung und Ausblick	110
Anhang	116
A1 Berechnung der $(1/d)$ -Korrekturen für die Gutzwiller-korrelierte antiferromagnetische Spindichtewelle	116
A2 Berechnung des Gitterplatz-diagonalen Anteils der Selbstenergie in der Gutzwiller-korrelierten antiferromagnetischen Spindichtewelle	120
Literaturverzeichnis	124
Danksagung	130
Lebenslauf	131

Abbildungsverzeichnis

1	RPA-ähnliche Blasendiagramme für die Korrelationsfunktionen; a) Blase in erster Ordnung, b) Blase in zweiter Ordnung	51
2	Graphen in niedrigster Ordnung zur Selbstenergie; a) Graph in zweiter Ordnung in z , b) Graph in dritter Ordnung in z	78
3	Alle Graphen, die im Falle der Gutzwiller-Wellenfunktion bei halber Bandfüllung zur Ordnung $(1/d)^2$ beitragen.	82
4	Mittlere Doppelbesetzung in der Gutzwiller-Wellenfunktion für verschiedene Bandfüllungen in $d = 1$. Das exakte Ergebnis [12] und das Ergebnis der $(1/d)$ -Entwicklung zur Ordnung $(1/d)$ werden verglichen.	86
5	Mittlere Doppelbesetzung in der Gutzwiller-Wellenfunktion für halbvolles Band. Numerische Ergebnisse [14] und das Resultat der $(1/d)$ -Entwicklung zur Ordnung $(1/d)^2$ werden in $d = 2$ verglichen.	87
6	Mittlere Doppelbesetzung in der Gutzwiller-Wellenfunktion für halbvolles Band. Numerische Ergebnisse [14] und das Resultat der $(1/d)$ -Entwicklung zur Ordnung $(1/d)^2$ werden in $d = 3$ verglichen.	88
7	Mittlere kinetische Energie in der Gutzwiller-Wellenfunktion in Abhängigkeit von der Bandfüllung in $d = 1$ für den hochkorrelierten Grenzfall ($g = 0$). Das exakte Ergebnis [12] und das Ergebnis der $(1/d)$ -Entwicklung zur Ordnung $(1/d)$ werden verglichen.	90
8	Mittlere kinetische Energie in der Gutzwiller-Wellenfunktion in Abhängigkeit von der Bandfüllung in $d = 2$ für den hochkorrelierten Grenzfall ($g = 0$). Numerische Ergebnisse [14] und das Ergebnis der $(1/d)$ -Entwicklung zur Ordnung $(1/d)$ werden verglichen.	91
9	Grundzustandsenergie für die Gutzwiller-Wellenfunktion für halbvolles Band in $d = 2$. Das numerische Ergebnis [14] und das Ergebnis der $(1/d)$ -Entwicklung zur Ordnung $(1/d)^2$ werden verglichen.	92
10	Grundzustandsenergie für die Gutzwiller-Wellenfunktion für halbvolles Band in $d = 3$. Das Ergebnis der Gutzwiller-Approximation ($d = \infty$) und das Ergebnis der $(1/d)$ -Entwicklung zur Ordnung $(1/d)^2$ werden verglichen.	93

11	Impulsverteilung in der Gutzwiller-Wellenfunktion für $n = 0.8$ in $d = 1$ für verschiedene Wechselwirkungsparameter g . Das exakte Ergebnis [12] und das Ergebnis der $(1/d)$ -Entwicklung zur Ordnung $(1/d)$ werden verglichen.	94
12	Impulsverteilung in der Gutzwiller-Wellenfunktion für $n = 1.0$ in $d = 1$ für verschiedene Wechselwirkungsparameter g . Das exakte Ergebnis [12] und das Ergebnis der $(1/d)$ -Entwicklung zur Ordnung $(1/d)$ werden verglichen.	95
13	Die ersten beiden Graphen einer Reihe für den Gitterplatz-diagonalen Anteil der Selbstenergie zur Ordnung $(1/d)$; a) Graph in Ordnung x^3 , b) Graph in Ordnung x^4	121

Tabellenverzeichnis

1	Vorzeichen, Gewichte und Werte der Graphen in Abbildung 3 in Ordnung $\mathcal{O}((1/d)^2)$	81
2	Vergleich von Diagonalsierung endlicher Systeme/ Monte-Carlo versus Variations-Monte-Carlo Ergebnissen für $\langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+\tau} \rangle$ in $d = 2$	104
3	Vergleich von Ergebnissen aus Variations- und störungstheoretischen Methoden für $\langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+\tau} \rangle$ in $d = 2$	105
4	Ergebnisse der Spinwellentheorie für $\langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+\tau} \rangle$ in $d = 2$ für $S = 1/2$. . .	106

1 Einleitung

1.1 Problemstellung

Die Erklärung der Physik korrelierter Fermisysteme ist eine Herausforderung an den Einfallsreichtum der theoretischen Physiker. In korrelierten Fermisystemen (*d*-Elektronen in Übergangsmetallen [1-4], *f*-Elektronen bei den „Schweren Fermionen“ [5,6]) haben die Elektronen eine geringe Beweglichkeit. Die *starke*, durch Abschirmung effektiv *kurzreichweitige* Coulomb-Wechselwirkung induziert die zu beschreibenden Korrelationseffekte zwischen den Elektronen (z. B. den Bandmagnetismus in Übergangsmetallen [2,3], den durch Elektron-Elektron-Wechselwirkung induzierten Metall-Isolator-Übergang [1,4,7], „Schwere Fermionen“ [5,6]). Beim normalfluiden ^3He hat man es mit sphärischen Atomen zu tun, die wegen des Kernspins Fermionen sind und die aufgrund der hohen Dichte stark miteinander wechselwirken (starke Coulomb-Abstoßung der Elektronenschalen und eine schwache van-der-Waals-Anziehung). Wie bei den Elektronen in Metallen führt auch hier der fermionische Charakter der Teilchen und die Konkurrenz von kinetischer und potentieller Energie zu interessanten Vielteilcheneffekten („fast lokalisierte Fermiflüssigkeit ^3He “ [8-10]). Die interessierenden kollektiven Effekte liegen jenseits eines Einteilchen-Bildes (z. B. Hartree-Fock) und entsprechend gibt es in diesen Systemen keinen kleinen Parameter (Wechselwirkungsstärke, Dichte der Fermionen), für den man die übliche Störungstheorie [11] betreiben könnte. Demzufolge ist es selbst für vereinfachende Modell-Hamiltonoperatoren wie für das Hubbard- [1,2] oder das periodische Anderson-Modell [5,6] schwierig, Grundzustandseigenschaften zu berechnen. Es müssen daher andere Zugänge und neue Ideen entwickelt werden.

Variationswellenfunktionen haben sich in dieser Hinsicht als sehr hilfreich erwiesen. Einerseits liefern sie lediglich eine genäherte Beschreibung des wahren Grundzustandes

eines Hamiltonoperators oder eines physikalischen Systems. Andererseits aber ist die Art der Näherung aus der expliziten Gestalt einer solchen Versuchswellenfunktion sofort ersichtlich. Man hat daher ein physikalisch begründetes Gefühl dafür, welche Effekte enthalten sein sollten und welche noch in die Variationswellenfunktion eingebaut werden müßten. Außerdem liefert das Variationsprinzip stets eine exakte obere Schranke für die Grundzustandsenergie und gibt damit auch ein Kriterium für die Qualität der verwendeten Variationswellenfunktionen.

Die Berechnung von Erwartungswerten mit solchen Zuständen ist aber im allgemeinen immer noch ein kompliziertes quantenmechanisches Vielteilchenproblem. Im Vergleich zu einer Greenfunktion-Technik [11] bei Temperatur $T = 0$ hat man zwar keine Zeithängigkeiten zu berücksichtigen, man hat aber die volle Ortsabhängigkeit zu behandeln. Variationswellenfunktionen dienen so als „Übungsfeld“ zur Entwicklung geeigneter Methoden bei der Behandlung der räumlichen Abhängigkeit in $T = 0$ -Greenfunktion-Techniken. Die Betrachtung von Variationsansätzen kann also als methodische Vorstufe für ein komplizierteres, aber letztlich anzustrebendes Ziel betrachtet werden.

Die volle Ortsabhängigkeit bei der Berechnung von Erwartungswerten führt andererseits dazu, daß man oft *weitere* Näherungen benutzen muß. Man erhält oft sehr „physikalische“, aber im wesentlichen unkontrollierte Ergebnisse. Man kann im Endefekt dann nicht mehr unterscheiden, welche physikalischen Effekte tatsächlich in der Variationswellenfunktion enthalten und welche durch die Näherung hereingekommen sind. Diese grundlegenden Probleme tauchen auch bei der Gutzwiller-Wellenfunktion auf [2], die eine der einfachsten Vielteilchenwellenfunktionen ist. Die Gutzwiller-Wellenfunktion besteht aus einem im Ortsraum diagonalen Korrelationsoperator, der auf den Fermisee nichtwechselwirkender Teilchen wirkt. Gutzwiller selbst führte eine Näherung ein

(„Gutzwiller-Approximation“), um seine Wellenfunktion auszuwerten. Seine Ergebnisse sind dann auf verschiedene physikalische Systeme angewendet worden, z. B. auf Ferromagnetismus [2], den Metall-Isolator-Übergang [4,7] und normalfluides ^3He [8].

Selbst für diese einfache Wellenfunktion wurde eine *näherungsfreie* Lösung erst kürzlich von Vollhardt und Mitarbeitern [12,13] in einer Dimension ($d = 1$) gefunden. In höheren Dimensionen wurde bislang allerdings noch keine analytische Lösung gefunden. Numerische Methoden zur Untersuchung von Variationswellenfunktionen (Variations-Monte-Carlo Rechnungen) können dagegen nicht nur in $d = 1$ angewandt werden [14-17], sie erlauben auch eine Untersuchung der Gutzwiller-Wellenfunktion in $d = 2,3$ Dimensionen [14,15]. Außerdem kann man diese Technik auch auf kompliziertere Variationswellenfunktionen anwenden, solange man die Effekte endlicher Systemgröße im Griff behält [14,18,19]. Das bedeutet, daß man in der numerischen Behandlung nur eine kleine Zahl von Variationsparametern zulassen darf und die analytische Abhängigkeit eines Variationsansatzes von diesen Parametern zusätzlich vorgegeben werden muß. Das Studium von Variationswellenfunktionen in $d = 2,3$ ist also keine leichte Aufgabe.

Metzner und Vollhardt [20] haben kürzlich den Limes *hoher* Dimensionen eingeführt. Dieser Grenzfall wird eine Schlüsselrolle für analytische Untersuchungen an korrelierten Fermisystemen spielen. Diese Autoren zeigten unter anderem, daß sich Erwartungswerte für Variationswellenfunktionen in $d = \infty$ exakt berechnen lassen. Weiterhin konnte in diesem Limes das Falicov-Kimball-Modell [21] exakt gelöst werden [22], selbst-konsistente Störungsrechnungen sind explizit durchführbar [23,24] und auch Störungstheorien für den stark korrelierten Grenzfall werden behandelbar [25]. Zudem eröffnet sich dadurch die Möglichkeit, *endlichdimensionale* Systeme mittels einer durch den Parameter ($1/d$) kontrollierten Entwicklung um $d = \infty$ zu untersuchen. Im Falle von Variationswellenfunktionen ist dieses Konzept nicht auf die Gutzwiller-Wellenfunktion

beschränkt, sondern kann auf verallgemeinerte Gutzwiller-korrelierte Variationswellenfunktionen angewandt werden. Diese Klasse von Wellenfunktionen, mit der wir uns in dieser Arbeit ausschließlich beschäftigen, besteht aus der Menge aller Einteilchen-Produktwellenfunktionen, auf die der Gutzwiller-Korrelator wirkt. Als erstes Ergebnis haben Metzner und Vollhardt nachgewiesen, daß die Gutzwiller-Approximation für die Gutzwiller-Wellenfunktion das *exakte* Ergebnis in $d = \infty$ liefert [12,25]. Außerdem haben sie einen allgemeinen Graphenformalismus angegeben, der es im Prinzip erlaubt, Erwartungswerte für die ganze Klasse von Gutzwiller-korrelierten Variationswellenfunktionen in $d = \infty$ exakt auszurechnen. Als Beispiel haben sie ihre Methode auf die Gutzwiller-korrelierte antiferromagnetische Spindichtewelle in $d = \infty$ angewandt [20,25]. Mit ihrer Methode können auch Korrelationsfunktionen in hohen Dimensionen exakt berechnet werden [26,27]. Auch die für das periodische Anderson-Modell vorgeschlagene Rice-Ueda-Brandow Variationswellenfunktion [28-33] kann mit diesem Verfahren in $d = \infty$ exakt ausgewertet werden [27]. Es zeigt sich, daß die exakten Ergebnisse mit den Resultaten der Gutzwiller-ähnigen Näherungsverfahren [28,30,33] übereinstimmen.

Es ist aber keine einfache Aufgabe, die Variationsenergie aus dem vollständigen, aber impliziten Gleichungssystem von Metzner und Vollhardt für allgemeine Variationsansätze zu gewinnen. Auch die explizite Berechnung von $(1/d)$ -Korrekturen ist sogar für die einfache Gutzwiller-Wellenfunktion recht mühsam.

Aufgabe dieser Arbeit ist es nun, einen effizienten Formalismus vorzustellen, der den Limes hoher Dimensionen für die Gutzwiller-korrelierten Variationswellenfunktionen besonders ökonomisch nutzt. Wir erhoffen uns davon einen wertvollen Beitrag zur systematischen Untersuchung der Eigenschaften korrelierter Fermisysteme.

1.2 Aufbau der Arbeit

In Kapitel 2 führen wir das Hubbard-Modell [1,2] ein, das als einfachst denkbare, quantenmechanisches Vielteilchenmodell seit langem Gegenstand intensiver Studien ist. Weiterhin spezifizieren wir die Klasse der Wellenfunktionen, die wir untersuchen wollen. Zur Berechnung von Erwartungswerten mit diesen Wellenfunktionen leiten wir einen Graphenformalismus für die Einteilchen-Dichtematrix und die mittlere Doppelbesetzung her, der in allen Dimensionen verwendet werden kann. Wir erhalten dieselben Graphen wie Metzner und Vollhardt [12], aber die „Vertices“ und „Linien“ erhalten eine neue Interpretation.

In Kapitel 3 zeigen wir, warum dieser Formalismus für hohe Dimensionen besonders effizient ist: ohne einen Graphen berechnen zu müssen, geben wir für das Hubbard- und das periodische Anderson-Modell die in $d = \infty$ exakten, für allgemeine Gutzwiller-korrierte Variationswellenfunktionen gültigen Gleichungen für die Variationsenergie an. Zwei in der Literatur viel diskutierte Anwendungen, die Gutzwiller-korrierte antiferromagnetische Spindichtewelle für das Hubbard-Modell und die Rice-Ueda-Brandow Variationswellenfunktion für das periodische Anderson-Modell, ergeben sich als einfache Spezialfälle.

In Kapitel 4 widmen wir uns der exakten Berechnung von Korrelationsfunktionen im Limes hoher Dimensionen. Wir verwenden den von Gebhard und Vollhardt [13] eingeführten Graphenformalismus, aber auch hier mit den neuen „Vertices“ und „Linien“. Im Limes hoher Dimensionen lassen sich die Korrelationsfunktionen im allgemeinen aus Blasendiagrammen berechnen. Für allgemeine Variationswellenfunktionen geben wir die Formeln für die Nächst-Nachbar-Korrelationsfunktionen an, wozu wir nur ein Blasendiagramm berechnen müssen. Für die Gutzwiller-Wellenfunktion geben wir geschlossene Ausdrücke für die Korrelationsfunktionen im Impulsraum an.

Im Kapitel 5 vergleichen wir unsere in $d = \infty$ exakten Ergebnisse mit den Resultaten von Gutzwiller-artigen Näherungen. In hohen Dimensionen werden die Resultate dieser Art von Näherungen nur für translationsinvariante Variationswellenfunktionen exakt. Für allgemeine Gutzwiller-korrelierte Wellenfunktionen ist dies aber nicht mehr der Fall. Weiterhin zeigen wir, daß die mit der Slave-Boson/Pfad-Integral-Methode von Kotliar und Ruckenstein [34] gewonnenen Ergebnisse für das Hubbard-Modell mit Hilfe von in $d = \infty$ exakt ausgewerteten Gutzwiller-korrelierten Variationswellenfunktionen abgeleitet werden können. Auf diese Weise gewinnt man neue Einblicke in die Methode von Kotliar und Ruckenstein und ihre Resultate.

In Kapitel 6 gehen wir über die Gutzwiller-Approximation hinaus und berechnen $(1/d)$ -Korrekturen für die Gutzwiller-Wellenfunktion. Mit der Berechnung eines einzigen Graphen können wir die $(1/d)$ -Korrekturen für beliebige Bandfüllung und Wechselwirkungsstärke berechnen. Für halbvolles Band reichen drei weitere Graphen aus, um bis zur Ordnung $(1/d)^2$ zu entwickeln.

In Kapitel 7 vergleichen wir die Ergebnisse der $(1/d)$ -Entwicklung mit numerischen ($d = 2, 3$) [14] und exakten ($d = 1$) [12] Resultaten. Wir erhalten hervorragende *quantitative* Übereinstimmung mit allen numerischen Ergebnissen und sogar eine überraschend gute Beschreibung für $d = 1$.

Motiviert durch diesen Erfolg des Konzepts hoher Dimensionen für die Beschreibung von $d = 2, 3$, schlagen wir in Kapitel 8 neue Variationsansätze für numerische Untersuchungen in niedrigen Dimensionen vor. Wir berechnen die *optimale* Gutzwiller-korrelierte antiferromagnetische Spindichtewelle für das Hubbard- und das t-J-Modell [35-37] in $d = \infty$, und rechnen bis zur Ordnung $(1/d)$ für das antiferromagnetische Spin-1/2 Heisenberg Modell.

Zusammenfassung und Ausblick schließen die Arbeit mit Kapitel 9 ab.

2 Allgemeiner Formalismus

In diesem Kapitel betrachten wir das Hubbard-Modell [1,2], das als grundlegend für die theoretische Beschreibung korrelierter Fermisysteme erachtet wird. Zur (genäher-ten) Beschreibung von Grundzustandseigenschaften dieses Modells führen wir eine große Klasse von Gutzwiller-korrierten Variationswellenfunktionen ein. Zur Berechnung von Erwartungswerten leiten wir einen allgemeinen Graphenformalismus ab. Es ergeben sich dieselben Graphen, die von Metzner und Vollhardt [12,20] eingeführt worden sind, aber wir geben den „Linien“ und „Vertices“ in den Graphen eine neue Interpretation. Wir wenden diesen Formalismus an, um die Einteilchen-Dichtematrix und die mittlere Doppelbesetzung zu berechnen. Die Kenntnis dieser beiden Größen erlaubt die Durchführung des Variationsverfahrens, d. h. die Berechnung einer oberen Schranke für die Grundzustandsenergie im Modell.

Die Auswertung des Graphenformalismus vereinfacht sich in hohen Gitterdimensionen d erheblich: (i) wir leiten einfache, exakte Ergebnisse für alle Größen in $d = \infty$ her, wozu wir keinen einzigen Graphen berechnen müssen; (ii) zur Bestimmung von $(1/d)$ -Korrekturen benötigt man nur wenige Graphen.

2.1 Hubbard-Modell und Variationswellenfunktionen

2.1.1 Hubbard-Modell

Das Hubbard-Modell [1,2] ist eines der einfachsten Modelle, um Korrelationseffekte zwischen Elektronen zu beschreiben. Im Formalismus der zweiten Quantisierung lautet der Hamiltonoperator (Operatoren sind durch ein „Hütchen“ ^ gekennzeichnet)

$$\hat{H} = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} . \quad (1)$$

Hierbei bezeichnet $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger$ den Erzeugeroperator für ein Elektron mit Spin σ auf dem Gitterplatz i , $\hat{c}_{j\sigma}$ den entsprechenden Vernichteroperator am Gitterplatz j und $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$ zählt die Anzahl der σ -Elektronen am Ort i . Die Wechselwirkung in Gleichung (1) ist rein *lokal* und kann geschrieben werden als $\hat{V} = U \sum_i \hat{D}_i = U \hat{D}$, wobei $\hat{D}_i = \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}$ eine Doppelbesetzung am Gitterplatz i zählt. Wir betrachten das Modell auf d -dimensionalen hyperkubischen Gittern mit insgesamt L Gitterplätzen. Dies schließt die Fälle der eindimensionalen Kette, des zweidimensionalen Quadratgitters und des dreidimensionalen einfach kubischen Gitters ein (eine Möglichkeit zur Erweiterung auf beliebige Gittertypen wird in Kapitel 6 angedeutet werden). Die mittleren Dichten n_σ der Elektronen ergeben sich aus $n_\sigma = N_\sigma / L$, wobei N_σ die Gesamtzahl der σ -Teilchen im System ist. Wegen der Teilchen-Loch-Symmetrie [38] kann man sich auf den Fall $n = n_\uparrow + n_\downarrow \leq 1$ beschränken, d. h. auf den Fall maximal halber Bandfüllung ($n \leq 1$).

Das Modell hat die denkbar einfachste Struktur für ein System von Gitterfermionen, in dem die kinetische Energie der Elektronen in Konkurrenz zu einer rein lokalen potentiellen Energie tritt. Somit ist das Modell von grundsätzlichem theoretischen Interesse, um neue, über die übliche Störungstheorie hinausgehende, Rechentechniken zu entwickeln.

Weiterhin sollte man mit diesem Modell aber auch reale physikalische Systeme zumindest qualitativ beschreiben können. Zum Beispiel wird das Hubbard-Modell zur Beschreibung von Magnetismus der d -Elektronen in Übergangsmetallen herangezogen [2,3]. Die d -Orbitale sind gut an den Gitteratomen lokalisiert und die s - und p -Elektronen sorgen für zusätzliche Abschirmung der Coulomb-Wechselwirkung. Daher ist die Näherung einer rein *lokalen* Elektronenwechselwirkung sinnvoll. Zusätzlich ist es im Falle lokalisierter Zustände vernünftig, sich auf Nächst-Nachbar-Hüpfen zu beschränken (tight-binding-Näherung). D. h. man setzt meist $t_{ij} = -t$ für den Fall,

daß i, j nächste Nachbarn sind, und setzt ansonsten $t_{ij} = 0$. Grund dafür ist, daß die Hüpftamplituden t_{ij} proportional zur Tunnelwahrscheinlichkeit für ein Elektron vom Orbital am Gitterplatz i zu einem Orbital am Ort j sind. Diese Wahrscheinlichkeit geht für d -Orbitale mit wachsendem Abstand exponentiell gegen Null. Auch für normalfluides ^3He [8-10] ist die Annahme einer Hubbard-Wechselwirkung eine begründete Näherung, die dann zu einem Gittergasmodell für die Flüssigkeit führt.

Insgesamt ist also das Hubbard-Modell nicht nur von rein methodischem Interesse, sondern es scheint auch geeignet zu sein, physikalische Systeme und Effekte (z. B. Magnetismus in Übergangsmetallen, normalfluides ^3He) zumindest qualitativ zu beschreiben.

Trotz seiner einfachen Struktur stellt die Bestimmung der physikalischen Eigenschaften des Modells ein quantenmechanisches Vierteilchenproblem dar. Eine Lösung war bislang nur in einer Dimension mit Hilfe des Bethe-Ansatzes möglich [38], der geschlossene Integralgleichungen für die Grundzustandsenergie und das chemische Potential liefert. Für halbvolles Band ($n = 1$) zeigten Lieb und Wu, daß das System in $d = 1$ für alle $U > 0$ ein Isolator ist. Es gibt inzwischen starke Anhaltspunkte dafür, daß dies für halbvolles Band in allen Dimensionen der Fall ist [39]. Des Weiteren ist bekannt, daß der Grundzustand des Hubbard-Modells für $n = 1$ den Gesamtspin $S = 0$ hat, d. h. ein Singulett ist [40]. Insgesamt sind also nur sehr wenige exakte Aussagen über dieses Modell in höheren Dimensionen ($d > 1$) bekannt.

Um ein besseres Verständnis für die grundlegenden Eigenschaften des Hubbard-Modells zu erreichen, schlugen Metzner und Vollhardt [20,25] vor, den Limes $d = \infty$ zu betrachten. Sie zeigten, daß für $d \rightarrow \infty$ die kinetische und die potentielle Energie in \hat{H} von derselben Größenordnung bleiben, wenn man das Hüpftamatrixelement t folgendermaßen skaliert

$$t = \frac{t^*}{\sqrt{2d}} \quad . \quad (2)$$

Wir setzen von jetzt an stets $t^* \equiv 1$. In diesem Fall ist die Dispersionsrelation durch

$$\epsilon(\mathbf{k}) \equiv \frac{1}{L} \sum_{i,j} t_{ij} e^{i\mathbf{k}(i-j)} = -\sqrt{\frac{2}{d} \sum_{i=1}^d \cos k_i} \quad (3)$$

gegeben. Wie von Müller-Hartmann gezeigt wurde [24], können in diesem Limes alle in Gleichung (1) unberücksichtigten Nächst-Nachbar-Wechselwirkungen in Hartree-Approximation behandelt werden. In diesem Fall bleibt als Vielteilchenwechselwirkung nur der Hubbard-Anteil übrig. Dies zeigt erneut die grundsätzliche Bedeutung des Hubbard-Modells, d. h. der Hubbard-Wechselwirkung, für die Beschreibung quantenmechanischer Vielteilcheneffekte. Der Limes hoher Dimensionen vereinfacht die Berechnungen erheblich. So wird nicht nur die konkrete Berechnung von Graphen in der Störungstheorie erleichtert [20,24,25], sondern auch die konkrete Durchführung von selbstkonsistenten Rechnungen ermöglicht [23]. Diese Rechnungen waren bisher wegen des immensen Rechenaufwands (Computerzeit) nur in der (unrealistischen) Dimension $d = 1$ durchführbar. Vergleiche mit einigen numerischen Ergebnissen in endlichen Dimensionen zeigten, daß die Approximation $d = \infty$ in vielen Fällen eine sehr gute Näherung für $d = 3$ liefert [20,23,25]. Darüber hinaus gelang es Brandt und Mielsch [22], das Falicov-Kimball-Modell [21] in $d = \infty$ exakt zu lösen.

Es zeigt sich also, daß der für korrelierte Gitterfermionen von Metzner und Vollhardt eingeführte Limes hoher Gitterdimension einen neuen, vielversprechenden Zugang zum Verständnis des Hubbard-Modells eröffnet. Die Lösung des Hubbard-Modells ist bislang allerdings auch im Limes $d = \infty$ noch nicht gelungen. Die Analyse von Variationswellenfunktionen soll dazu beitragen, neue Methoden und Verfahren für die Behandlung des Hubbard-Modells in hohen Dimensionen zu entwickeln.

2.1.2 Variationswellenfunktionen

Eine der Methoden, die Grundzustandseigenschaften des Hubbard-Modells *genähert* zu beschreiben, ist die Untersuchung mit Hilfe von Variationswellenfunktionen. Die explizite Wahl eines Ansatzes für den Grundzustand des Modells erlaubt einerseits eine anschauliche Beschreibung der als wesentlich erachteten physikalischen Effekte. Andererseits liefert das Variationsverfahren stets eine obere Schranke für die Grundzustandsenergie des Modells und damit ein Kriterium für die Qualität des gewählten Variationsansatzes. Insofern handelt es sich also um eine kontrollierte Näherung. Für manche Fermisysteme reicht zudem die Kenntnis der Grundzustandseigenschaften aus, um Aussagen über die energetisch tiefliegenden Anregungen zu machen (Landau-Fermiflüssigkeitstheorie [41]). Auf diese Weise kann man auch die Thermodynamik des Systems für tiefe Temperaturen genähert beschreiben. Ein Beispiel für die Anwendung dieses Prinzips findet man in Referenz [9].

Um Grundzustandseigenschaften von Modellen mit starker lokaler Abstoßung wie dem Hubbard-Modell (1) zu studieren, betrachten wir folgende Klasse Gutzwiller-korrelierter Variationswellenfunktionen

$$\begin{aligned}
 |\Psi_g\rangle &= g^{\hat{D}} |\Psi_0\rangle \\
 &= \prod_i [1 - (1 - g)\hat{D}_i] |\Psi_0\rangle \quad ,
 \end{aligned} \tag{4}$$

wobei $0 \leq g \leq 1$ ein Variationsparameter und $|\Psi_0\rangle$ eine beliebige Einteilchen-Produktwellenfunktion mit fester Gesamtteilchenzahl N ist [42]. Der Operator $g^{\hat{D}}$ ist der Gutzwiller Korrelator. Wir wählen $|\Psi_0\rangle$ als beliebiges Quasiteilchenvakuum, damit wir später im Lauf der Rechnungen das Wick-Theorem anwenden können. Wählen wir $|\Psi_0\rangle$ als den Fermisee (Grundzustand des Hubbard-Modells für $U = 0$), so erhalten wir die ursprüngliche Gutzwiller-Wellenfunktion [2] als Spezialfall von Gleichung (4). Der Gutzwiller-Korrelator reduziert global das Gewicht all der Konfigurationen in $|\Psi_0\rangle$,

die einen großen Beitrag zur lokalen Coulomb-Wechselwirkung im Hubbard-Modell (1) liefern. Wesentliche Korrelationseffekte, die durch eine starke lokale Wechselwirkung induziert werden, werden somit in diesen Variationswellenfunktionen anschaulich berücksichtigt.

Die Aufgabe besteht nun darin, Erwartungswerte $\langle \hat{O} \rangle = \langle \Psi_g | \hat{O} | \Psi_g \rangle / \langle \Psi_g | \Psi_g \rangle$ mit den Variationswellenfunktionen aus Gleichung (4) zu berechnen. Um das Variationsverfahren durchzuführen, müssen wir die Einteilchen-Dichtematrix berechnen

$$P_\sigma(i,j) = \langle \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} \rangle \quad . \quad (5a)$$

Der Wert von $P_\sigma(i,j)$ für nächste Nachbarn i, j bestimmt die kinetische Energie in Gleichung (1). Die Fouriertransformierte der Einteilchen-Dichtematrix ist die Impulsverteilung $\langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = (1/L) \sum_{ij} e^{i\mathbf{k}(i-j)} P_\sigma(i,j)$. Zur Bestimmung der potentiellen Energie in Gleichung (1) benötigen wir die mittlere Doppelbesetzung

$$\bar{d}_i = \langle \hat{D}_i \rangle \quad . \quad (5b)$$

Die Berechnung von $\langle \hat{H} \rangle$ involviert im üblichen $T = 0$ -Formalismus der Greenfunktionen die Integration über Zeiten bzw. Frequenzen. Demgegenüber ist die Situation bei den Variationsverfahren erheblich vereinfacht, da eine solche Abhängigkeit nicht auftritt. Bezuglich der räumlichen Abhängigkeiten (Gittersummen bzw. Impulsintegrale über die erste Brillouinzone) ist die Berechnung von Erwartungswerten im Falle der Variationswellenfunktionen ein ebenso kompliziertes quantenmechanisches Vielteilchenproblem wie bei den Greenfunktionen. Um die auftretenden Gittersummen kontrollierbar zu nähern, werden wir den von Metzner und Vollhardt [20,25] eingeführten Limes hoher Gitterdimensionen benutzen.

2.2 Verallgemeinerte Gutzwiller-korrelierte Variationswellenfunktionen

2.2.1 Methode von Metzner und Vollhardt

Metzner und Vollhardt [12,20,25] entwickelten alle Erwartungswerte $\langle \hat{O} \rangle$ in eine Potenzreihe in $(g^2 - 1)$, indem sie die Identität

$$g^{2\hat{D}} = \prod_i [1 + (g^2 - 1)\hat{D}_i] \quad (6)$$

benutzten. Die Ordnungen dieser Potenzreihe lassen sich im Rahmen eines Vielteilchenformalismus durch Graphen darstellen (siehe z. B. Referenz [12]). Die Linien und Vertices in diesen Graphen haben bei Metzner und Vollhardt folgende Interpretation:

$$\sigma\text{-Linie: } P_\sigma^0(i,j) = \langle \Psi_0 | \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} | \Psi_0 \rangle \quad (\text{nicht-wechselwirkende Einteilchen-Dichtematrix}) \quad (7a)$$

$$\text{Vertex: } (g^2 - 1) \quad (\text{Entwicklungsparameter}). \quad (7b)$$

Auf diese Weise konnte das Problem in $d = 1$ für die Gutzwiller-Wellenfunktion exakt gelöst werden, d. h. es konnten die mittlere Doppelbesetzung, die Impulsverteilung und die Variationsenergie [12], sowie verschiedene Zweiteilchen-Korrelationsfunktionen [13] berechnet werden. Für die Dimensionen $d = 2, 3$ war eine exakte Lösung bisher nicht möglich.

Metzner und Vollhardt zeigten jedoch [20,25], daß der Limes *hoher* Gitterdimension ebenfalls analytische, exakte Rechnungen mit Gutzwiller-artigen Variationswellenfunktionen erlaubt. Ursache hierfür ist das Verhalten der nicht-wechselwirkenden Einteilchen-Dichtematrix in hohen Dimensionen. Auf einem d -dimensionalen hyperkubischen Gitter gilt für $d \gg 1$ [20,26]

$$P_\sigma^0(i,j) \simeq \mathcal{O} \left(\left(\sqrt{1/d} \right)^\nu \right) \quad , \quad (8a)$$

wobei

$$\nu = | \mathbf{i} - \mathbf{j} | = \sum_{i=1}^d | i_i - j_i | \quad (8b)$$

die sogenannte „New York“-Metrik ist. Diese Metrik zählt die Zahl der Nächst-Nachbar-Schritte, die nötig sind, um auf einem d -dimensional hyperkubischen Gitter vom Punkt \mathbf{i} zum Punkt \mathbf{j} zu gelangen. Hat man nun in einem der Graphen von Metzner und Vollhardt zwei Gitterpunkte \mathbf{i} und \mathbf{j} , die durch drei oder mehr Linien verbunden sind, so gilt [20,25]

$$\left[P_\sigma^0(\mathbf{i}, \mathbf{j}) \right]^3 = \delta_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} \left[P_\sigma^0(\mathbf{i}, \mathbf{i}) \right]^3 \quad \text{in } d = \infty \quad . \quad (9)$$

Um die Konsequenzen dieser Vereinfachung zu studieren, führten diese Autoren die Größe $S_\sigma(\mathbf{g}, \mathbf{h})$ ein, die sie als „Selbstenergie“ bezeichnet haben. Die Diagramme, die zu $S_\sigma(\mathbf{g}, \mathbf{h})$ gehören, haben nämlich dieselbe topologische Struktur wie die Selbstenergiadiagramme im Greenfunktion-Formalismus. Entsprechend kann man die „eigentliche Selbstenergie“ $S_\sigma^*(\mathbf{g}, \mathbf{h})$ einführen. Wie beim Greenfunktion-Formalismus sind $S_\sigma^*(\mathbf{g}, \mathbf{h})$ und $S_\sigma(\mathbf{g}, \mathbf{h})$ durch eine Dyson-Gleichung miteinander verknüpft

$$S_\sigma(\mathbf{g}, \mathbf{h}) = S_\sigma^*(\mathbf{g}, \mathbf{h}) + \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{m}} S_\sigma^*(\mathbf{g}, \mathbf{l}) P_\sigma^0(\mathbf{l}, \mathbf{m}) S_\sigma(\mathbf{m}, \mathbf{h}) \quad . \quad (10)$$

Aus $S_\sigma(\mathbf{g}, \mathbf{h})$ kann man die wechselwirkende Einteilchen-Dichtematrix $P_\sigma(\mathbf{i}, \mathbf{j})$ gewinnen, aus der man auch die mittlere Doppelbesetzung \bar{d}_i berechnen kann. Da in den zur eigentlichen Selbstenergie gehörigen Diagrammen stets drei Linien von \mathbf{g} nach \mathbf{h} laufen, ist $S_\sigma^*(\mathbf{g}, \mathbf{h})$ in $d = \infty$ Gitterplatz-diagonal [20,25], d. h. es ist $S_\sigma^*(\mathbf{g}, \mathbf{h}) = \delta_{\mathbf{g}, \mathbf{h}} S_\sigma^*(\mathbf{g}, \mathbf{g})$. Führt man noch renormierte („angezogene“) Linien $\bar{P}_\sigma(\mathbf{g}, \mathbf{h})$ durch

$$\bar{P}_\sigma(\mathbf{g}, \mathbf{h}) = P_\sigma^0(\mathbf{g}, \mathbf{h}) + \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{m}} P_\sigma^0(\mathbf{g}, \mathbf{l}) S_\sigma(\mathbf{l}, \mathbf{m}) P_\sigma^0(\mathbf{m}, \mathbf{h}) \quad (11a)$$

ein, so gilt in $d = \infty$ die Verknüpfungsgleichung

$$\overline{P}_\sigma(g, g) = \frac{S_\sigma^*(g, g)}{1 - g^2 - S_\sigma^*(g, g)S_{-\sigma}^*(g, g)} . \quad (11b)$$

Zusammen mit der Dysongleichung (10), angewandt auf $S_\sigma^*(g, h) = \delta_{g,h} S_\sigma^*(g, g)$, geben die Gleichungen (11) ein vollständiges System.

Wegen der Faltungen im Ortsraum (Dysongleichung (10), Gleichung für die renormierten Linien (11a)) sind die Gleichungen von Metzner und Vollhardt sehr kompliziert, so daß eine explizite Lösung für *allgemeines* $|\Psi_0\rangle$ nicht möglich ist. Man muß sich auf diejenigen Fälle beschränken, bei denen man Translationsinvarianz im System ausnutzen kann, um die Faltungen im Ortsraum mit Hilfe einer Fouriertransformation in den Impulsraum zu vereinfachen. Dementsprechend lösten Metzner und Vollhardt ihr Gleichungssystem explizit im Falle der Gutzwiller-Wellenfunktion ($|\Psi_0\rangle$ als translationsinvarianter Fermisee) und im Falle einer allgemeinen Gutzwiller-korrierten Spindichtewelle (Translationsinvarianz auf den A - und B -Untergittern).

Eine $(1/d)$ -Entwicklung ist im Formalismus von Metzner und Vollhardt selbst für die einfache Gutzwiller-Wellenfunktion sehr mühsam [43]; für kompliziertere Gutzwiller-korrierte Wellenfunktionen ist dies praktisch undurchführbar. Deswegen ist ein Formalismus wünschenswert, der es erlaubt, die Vereinfachungen des Limes $d = \infty$ effektiver zu nutzen.

2.2.2 Effizienter Formalismus für hohe Dimensionen

Einerseits vereinfachen sich in der $(g^2 - 1)$ -Entwicklung die Graphen in $d = \infty$ erheblich. Wie in Unterabschnitt 2.2.1 erklärt, kann man zwei Gitterpunkte i und j , die durch drei oder mehr Linien miteinander verbunden sind, miteinander identifizieren [20,25] (siehe Gleichung (9)). Andererseits behält aber *jeder* einzelne Graph auch in diesem Limes

einen nichttrivialen Wert, weil $P_\sigma^0(i, i) \neq 0$ gilt. Ein effektiver Formalismus zeichnet sich demzufolge dadurch aus, daß sich Graphen in $d = \infty$ nicht nur vereinfachen, sondern völlig verschwinden. Es ist daher das Ziel, diese sogenannten on-site-Beiträge in $P_\sigma^0(i, j)$ loszuwerden. Wir streben also an, dieselben Graphen wie Metzner und Vollhardt zu erhalten, deren Linien nicht mehr als $P_\sigma^0(i, j)$ interpretiert werden, sondern folgende neue Interpretation erhalten:

$$\text{neue } \sigma\text{-Linien: } \widetilde{P}_\sigma^0(i, j) = P_\sigma^0(i, j) - \delta_{i,j} P_\sigma^0(i, i) \quad \text{statt} \quad P_\sigma^0(i, j) \quad . \quad (12)$$

Offensichtlich verschwindet dann jeder Graph zur Selbstenergie, da $\widetilde{P}_\sigma^0(i, i) = 0$ und

$$[\widetilde{P}_\sigma^0(i, j)]^3 = \delta_{i,j} [\widetilde{P}_\sigma^0(i, i)]^3 = 0 \quad \text{in } d = \infty \quad (13)$$

gilt (in den Graphen zur Selbstenergie $S_\sigma(g, h)$ gibt es immer Vertices, die durch drei verschiedene Fermionlinien miteinander verbunden sind).

Um diese neuen Einteilchen-Dichtematrizen $\widetilde{P}_\sigma^0(i, j)$ einführen zu können, müssen wir zumindest die trivialen Hartree-Blasen am Gitterpunkt i mit Spin σ beseitigen, denn diese Blasen repräsentieren gerade Beiträge $P_\sigma^0(i, i) = \langle \Psi_0 | \hat{n}_{i\sigma} | \Psi_0 \rangle$. Diese stammen von Kontraktionen [11] des Operators $\hat{D}_i = \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}$ in Gleichung (6) am selben Gitterplatz i . Der Wert dieser Blasen ist natürlich dimensionsunabhängig, so daß Graphen mit diesen Blasen auf alle Fälle vorhanden wären, wenn wir die Hartree-Blasen nicht von vorneherein abziehen. Die Entfernung von solchen Hartree-Blasen ist in der Festkörperphysik bekannt als Störungstheorie *relativ* zur Hartree-Näherung (siehe z. B. Referenz [23]). In diesem Fall erhält man aber trotzdem Linien (d. h. Greenfunktionen), die einen on-site-Beitrag haben. Normalerweise ist also das Abziehen der Hartree-Blasen *nicht* ausreichend, um *alle* on-site-Beiträge in einem Graphenformalismus zu eliminieren. Im vorliegenden Spezialfall der Gutzwiller-korrierten Variationswellenfunktionen ist dies aber tatsächlich möglich, wie wir in Abschnitt 2.3 zeigen werden.

Um die on-site Beiträge in Gleichung (6) abzuziehen, müssen wir eine *neue* Entwicklung einführen, d. h. wir versuchen eine Entwicklung im *neuen, ortsabhängigen* Parameter x_i , der in den Graphen als

$$\text{neuer Vertex: } x_i \quad \text{statt} \quad (g^2 - 1) \quad (14)$$

als Vertexfaktor zu interpretieren ist. Wir versuchen also

$$g^{2\hat{K}} = \prod_i \left[1 + x_i (\hat{D}_i - \hat{D}_i^{HF}) \right] \quad . \quad (15)$$

Hierbei ist $\hat{D}_i^{HF} = \hat{n}_{i\uparrow} \langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle_0 + \hat{n}_{i\downarrow} \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle_0 - \langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle_0 \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle_0$ die Hartree-Fock Zerlegung von \hat{D}_i . Wir haben einen neuen Operator \hat{K} eingeführt, der den Operator \hat{D} in Gleichung (6) ersetzt und den wir so bestimmen werden, daß Gleichung (15) erfüllt werden kann. Folglich stellen wir die Klasse der Gutzwiller-korrierten Wellenfunktionen nun folgendermaßen dar

$$| \Psi_g \rangle = g^{\hat{K}} | \Phi_0 \rangle \quad . \quad (16)$$

$|\Psi_0\rangle$ aus Gleichung (4) und $|\Phi_0\rangle$ aus Gleichung (16) sind beides Einteilchen-Produktwellenfunktionen, die durch

$$| \Psi_0 \rangle = g^{\hat{K} - \hat{D}} | \Phi_0 \rangle \quad (17)$$

miteinander verknüpft sind. Daß diese Entwicklung tatsächlich zu Graphen führt, deren Linien wir als $\tilde{P}_\sigma^0(i,j)$ gemäß Gleichung (12) interpretieren können, zeigen wir in Abschnitt 2.3.

Zunächst bestimmen wir den Entwicklungsparameter x_i und den Operator \hat{K} . Weil $\hat{n}_{i\sigma}^2 = \hat{n}_{i\sigma}$ und $\hat{D}_i^2 = \hat{D}_i$ gilt, können wir folgenden *Ansatz* machen

$$\hat{K} = \sum_i \hat{K}_i = \sum_i (\hat{D}_i - \mu_{i\uparrow} \hat{n}_{i\uparrow} - \mu_{i\downarrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \eta_i) \quad . \quad (18)$$

Die reellen Größen $\mu_{i\uparrow}$, $\mu_{i\downarrow}$ und η_i in Gleichung (18) können beliebig gewählt werden. Wir wählen sie so, daß Gleichung (15) erfüllt ist. Deshalb verwenden wir auch η_i , das eigentlich nur einen zusätzlichen Normierungsfaktor liefert. Wenn wir den Faktor $g^{2\hat{K}}$ in Gleichung (15) entwickeln, erhalten wir den folgenden Satz von vier Gleichungen für die vier Unbekannten $\mu_{i\uparrow}$, $\mu_{i\downarrow}$, η_i und x_i

$$g^{2\eta_i} = 1 + x_i \langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle_0 \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle_0 \quad (19a)$$

$$g^{2\eta_i} (g^{-2\mu_{i\sigma}} - 1) = -x_i \langle \hat{n}_{i-\sigma} \rangle_0 \quad \sigma = \uparrow, \downarrow \quad (19b)$$

$$g^{2\eta_i} (g^{2-2\mu_{i\uparrow}} - g^{-2\mu_{i\downarrow}} - g^{-2\mu_{i\downarrow}} + 1) = x_i \quad . \quad (19c)$$

Ein Vergleich mit Gleichung (16) zeigt, daß Gutzwiller-korrelierte Wellenfunktionen im allgemeinen als

$$|\Psi_g\rangle = \left[g^{\sum_i \hat{D}_i - \mu_{i\uparrow} \hat{n}_{i\uparrow} - \mu_{i\downarrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \eta_i} \right] |\Phi_0\rangle = \left[\prod_i \hat{B}_i \right] |\Phi_0\rangle \quad (20)$$

geschrieben werden können. Hierbei ist $\hat{B}_i = g^{\hat{K}_i} = g^{\hat{D}_i - \mu_{i\uparrow} \hat{n}_{i\uparrow} - \mu_{i\downarrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \eta_i}$ ein hermitescher Operator mit $\hat{B}_i^2 = 1 + x_i (\hat{D}_i - \hat{D}_i^{HF})$ per Konstruktion. Die Wellenfunktionen $|\Psi_0\rangle$ in Gleichung (4) und $|\Phi_0\rangle$ in Gleichung (20) sind also gemäß Gleichung (17) durch

$$|\Psi_0\rangle = g^{\sum_i [-\mu_{i\uparrow} \hat{n}_{i\uparrow} - \mu_{i\downarrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \eta_i]} |\Phi_0\rangle \quad (21)$$

miteinander verknüpft. Zu beachten ist, daß wir lediglich $|\Psi_g\rangle$ umgeschrieben haben, d. h. es gilt $|\Psi_g\rangle = g^{\hat{D}} |\Psi_0\rangle = g^{\hat{K}} |\Phi_0\rangle$. Beide Formen sind völlig äquivalent, aber die letztere ist für den Grenzfall hoher Gitterdimension besser geeignet. In der ursprünglichen Gutzwiller-Wellenfunktion sind $|\Psi_0\rangle$ und $|\Phi_0\rangle$ (von einem trivialen Faktor abgesehen) identisch und beide repräsentieren den Fermisee. Während für $g = 1$

immer $|\Psi_0\rangle \equiv |\Phi_0\rangle$ gilt, trifft dies für $g < 1$ nicht mehr zu. Dies ist jedoch unerheblich, da der korrelierte Zustand $|\Psi_g\rangle$ durch beide Formen äquivalent beschrieben wird.

Da wir ausschließlich mit $|\Phi_0\rangle$ arbeiten werden, berechnen wir Erwartungswerte im unkorrelierten Zustand stets mit $|\Phi_0\rangle$, Gleichung (20), anstatt mit $|\Psi_0\rangle$, Gleichung (4). Solche Erwartungswerte sind mit $\langle \dots \rangle_0$ bezeichnet. Wir definieren daher

$$n_{i,0} = \langle \Phi_0 | \hat{n}_{i\uparrow} | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{n}_{i\downarrow} | \Phi_0 \rangle = \langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle_0 + \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle_0 \quad (22a)$$

$$m_{i,0} = \langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle_0 - \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle_0 \quad (22b)$$

$$\bar{d}_{i,0} = \langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle_0 \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle_0 \quad . \quad (22c)$$

Man kann jetzt die Gleichungen (19a)-(19c) leicht lösen. Das Ergebnis ist

$$x_i = \frac{1}{2(1-g^2)\bar{d}_{i,0}(1-n_{i,0}+\bar{d}_{i,0})} \times \left[-1 + (1-g^2)(n_{i,0} - 2\bar{d}_{i,0}) + \sqrt{1 + (g^2-1)[n_{i,0}(2-n_{i,0}) + g^2 m_{i,0}^2]} \right] . \quad (23a)$$

Außerdem gilt

$$g^{2\eta_i} = 1 + x_i \bar{d}_{i,0} \quad (23b)$$

$$g^{-2\mu_{i\sigma}} = 1 - \frac{x_i \langle \hat{n}_{i-\sigma} \rangle_0}{1 + x_i \bar{d}_{i,0}} . \quad (23c)$$

Die Gleichungen (23a)-(23c) bestimmen die Größen $\mu_{i\uparrow}$, $\mu_{i\downarrow}$, η_i und den gesuchten Parameter x_i in Abhängigkeit vom Variationsparameter g und den lokalen Teilchendichten in $|\Phi_0\rangle$. Zu beachten ist, daß wir lediglich den Korrelator umgeordnet haben. Bei keinem Schritt mußten wir $|\Phi_0\rangle$ näher angeben. Der Formalismus ist daher völlig allgemein.

2.3 Graphenformalismus für die Einteilchen-Dichtematrix und die mittlere Doppelbesetzung

Wir werden jetzt die Erwartungswerte für die Einteilchen-Dichtematrix und die mittlere Doppelbesetzung berechnen (siehe Abschnitt 2.1). Wir stellen den Gang der Rechnung

explizit für $P_\sigma(i, j)$, Gleichung (5a), dar. Die Ergebnisse für die mittleren Teilchendichten und die mittlere Doppelbesetzung können auf ähnliche Weise abgeleitet werden. Wir stellen die entsprechenden Ausdrücke am Ende dieses Abschnitts kurz zusammen.

Wir müssen $P_\sigma(i, j) = \langle \Psi_g | \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} | \Psi_g \rangle / \langle \Psi_g | \Psi_g \rangle$ für $i \neq j$ berechnen. Im Zähler haben wir

$$\langle \Psi_g | \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} | \Psi_g \rangle = \langle (\hat{B}_i \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{B}_i) (\hat{B}_j \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{B}_j) \prod_{f \neq i, j} [1 + x_f (\hat{D}_f - \hat{D}_f^{HF})] \rangle_0 \quad , \quad (24)$$

wobei wir Gleichung (20) verwendet haben. Mit den Definitionen

$$\sqrt{q_{i\sigma}} \equiv g^{2n_i} g^{-\mu_{i\sigma}} [1 + \langle \hat{n}_{i-\sigma} \rangle_0 (g^{1-2\mu_{i-\sigma}} - 1)] \quad (25a)$$

$$\alpha_{i\sigma} \equiv \frac{g^{1-2\mu_{i-\sigma}} - 1}{x_i [1 + \langle \hat{n}_{i-\sigma} \rangle_0 (g^{1-2\mu_{i-\sigma}} - 1)]} \quad (25b)$$

gilt

$$\hat{B}_i \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{B}_i = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \sqrt{q_{i\sigma}} [1 + x_i \alpha_{i\sigma} (\hat{n}_{i-\sigma} - \langle \hat{n}_{i-\sigma} \rangle_0)] \quad . \quad (25c)$$

Der Parameter x_i ist durch Gleichung (23a) gegeben. Im Falle der Gutzwiller-Wellenfunktion ist $q_{i\sigma}$ unabhängig von i und σ und bezeichnet den Sprung der Impulsverteilung an der Fermikante (siehe unten); deshalb ist es praktisch, an dieser Stelle $\sqrt{q_{i\sigma}}$ einzuführen.

Durch die spezielle Anordnung der Terme in Gleichung (25c) haben wir dafür gesorgt, daß nach der Anwendung von Wick's Theorem [11] kein Graph mit einer Hartree-Blase am Gitterplatz i auftritt (vgl. die Diskussion in Abschnitt 2.2). Wir setzen die Gleichungen (25a)-(25c) in Gleichung (24) ein und erhalten

$$\langle \Psi_g | \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} | \Psi_g \rangle = \sqrt{q_{i\sigma}} \sqrt{q_{j\sigma}} \left[\langle \hat{O}_{i,j,\sigma} \rangle_0 + \sum_{m=1}^L \frac{1}{m!} \sum'_{\substack{g_1 \dots g_m \\ (\neq i, j)}} x_{g_1} \dots x_{g_m} \langle \hat{O}_{i,j,\sigma} (\hat{D}_{g_1} - \hat{D}_{g_1}^{HF}) \dots (\hat{D}_{g_m} - \hat{D}_{g_m}^{HF}) \rangle_0 \right] \quad , \quad (26a)$$

wobei wir

$$\hat{O}_{i,j,\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{j\sigma} \left[1 + x_i \alpha_{i\sigma} (\hat{n}_{i-\sigma} - \langle \hat{n}_{i-\sigma} \rangle_0) \right] \left[1 + x_j \alpha_{j\sigma} (\hat{n}_{j-\sigma} - \langle \hat{n}_{j-\sigma} \rangle_0) \right] \quad (26b)$$

definiert haben. Der Strich an der Gittersumme in Gleichung (26a) bedeutet, daß alle Gitterplätze *verschieden* sind. Die weiteren Schritte erfolgen völlig analog zu Metzner und Vollhardt [12,20,25]. Wir wenden das Wick-Theorem an [11] und ein typischer Beitrag in m -ter Ordnung lautet

$$\sum'_{\substack{g_1 \dots g_m \\ (\neq i, j)}} \langle \hat{O}_{i,j,\sigma} (\hat{D}_{g_1} - \hat{D}_{g_1}^{HF}) \dots (\hat{D}_{g_m} - \hat{D}_{g_m}^{HF}) \rangle_0 \quad (27a)$$

$$= \sum'_{\substack{g_1 \dots g_m \\ (\neq i, j)}} \{ O_{i,j,\sigma} (D_{g_1} - D_{g_1}^{HF}) \dots (D_{g_m} - D_{g_m}^{HF}) \}_0 \quad , \quad (27b)$$

wobei $\{ \dots \}_0$ die Summe über alle möglichen Paare von Kontraktionen bedeutet. Weil nun aber alle Gittervektoren bei der Anwendung des Theorems *verschieden* sind, kann man die Kontraktionen als

$$\{ c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} \}_0 \equiv \langle \hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{j\sigma} \rangle_0 = P_\sigma^0(i, j) \quad (28a)$$

$$\{ c_{j\sigma}^+ c_{i\sigma}^+ \}_0 \equiv -\langle \hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{j\sigma} \rangle_0 = -P_\sigma^0(i, j) \quad (28b)$$

definieren [12]. Die üblichen δ_{ij} -Terme treten *nicht* auf. Mit Hilfe dieser Definition der Kontraktionen kann man die vier Terme in Gleichung (26b) als Summe von Produkten zweier Determinanten schreiben [12]. Beispielsweise kann man den ersten Term in $O_{i,j,\sigma}$ schreiben als

$$\sum'_{\substack{g_1 \dots g_m \\ (\neq i, j)}} \{ c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} (D_{g_1} - D_{g_1}^{HF}) \dots (D_{g_m} - D_{g_m}^{HF}) \}_0$$

$$= \sum'_{\substack{g_1 \dots g_m \\ (\neq i, j)}} \left| \begin{array}{cccc} P_{11}^0 & P_{12}^0 & \dots & P_{1m}^0 \\ P_{1j}^0 & 0 & \dots & P_{1m}^0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ P_{mj}^0 & P_{m1}^0 & \dots & 0 \end{array} \right|_\sigma \times \left| \begin{array}{cccc} 0 & P_{12}^0 & \dots & P_{1m}^0 \\ P_{21}^0 & 0 & \dots & P_{2m}^0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ P_{m1}^0 & P_{m2}^0 & \dots & 0 \end{array} \right|_{-\sigma} \quad . \quad (29)$$



Die Diagonalelemente in den Determinanten verschwinden an jedem inneren Vertex g_1, \dots, g_m , weil wir $\hat{D}_{g_i}^{HF}$ etc. in der x_i -Entwicklung abgezogen haben.

Die Eliminierung der Diagonalelemente ist der entscheidende Schritt in unserem Formalismus und stellt den wesentlichen Unterschied zur Methode von Metzner und Vollhardt dar [20,25]: Wir können $P_\sigma^0(l, m)$ durch $\tilde{P}_\sigma^0(l, m)$ ersetzen, die entsprechend Gleichung (12) als

$$\tilde{P}_\sigma^0(l, m) = P_\sigma^0(l, m) - \delta_{l, m} P_\sigma^0(l, l) = \langle \hat{c}_{l\sigma}^+ \hat{c}_{m\sigma} \rangle_0 - \delta_{l, m} \langle \hat{c}_{l\sigma}^+ \hat{c}_{m\sigma} \rangle_0 \quad (30)$$

definiert sind. Insbesondere gilt: $\tilde{P}_\sigma^0(l, l) = 0$. In diesem Schritt erzeugen wir *keine* neuen Beiträge, weil die Diagonalelemente bereits Null sind und weil alle Gittervektoren *verschieden* sind (einschließlich $i \neq j$). Jetzt können wir die Summationseinschränkung fallen lassen (die Determinanten verschwinden, wenn zwei Zeilen oder Spalten gleich sind). Das „Linked-Cluster-Theorem“ ist nunmehr anwendbar [44], so daß der Nenner $\langle \Psi_g | \Psi_g \rangle$ die unverbundenen Diagramme in Gleichung (27b) wegfürzt. Infolgedessen erhalten wir dieselben Graphen wie Metzner und Vollhardt, aber die Linien zwischen den Gitterpunkten i und j werden jetzt als $\tilde{P}_\sigma^0(i, j)$ und die inneren Vertices am Punkt i werden als Faktoren x_i interpretiert.

Das Ergebnis für die Einteilchen-Dichtematrix für $i \neq j$ ist dann

$$P_\sigma(i, j) = \sqrt{q_{i\sigma}} \sqrt{q_{j\sigma}} \left\{ O_{i,j,\sigma} \tilde{D} \right\}_0^c, \quad (31)$$

wobei $\{\dots\}_0^c$ alle verbundenen Graphen bezeichnet und

$$\tilde{D} = 1 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!} \sum_{g_1 \dots g_m} x_{g_1} \dots x_{g_m} (D_{g_1} - D_{g_1}^{HF}) \dots (D_{g_m} - D_{g_m}^{HF}) \quad (32)$$

als Abkürzung eingeführt wurde.

Die Berechnung von $P_\sigma(\mathbf{i}, \mathbf{i}) = \langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle$ ist vollkommen analog. Man erhält

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle &= \langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle_0 + \left\{ (n_{i\sigma} - \langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle_0) \tilde{D} \right\}_0^\epsilon + x_i (1 - 2\langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle_0) \left\{ (D_i - D_i^{HF}) \tilde{D} \right\}_0^\epsilon \\ &\quad + x_i (1 - \langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle_0) \langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle_0 \left\{ (n_{i-\sigma} - \langle \hat{n}_{i-\sigma} \rangle_0) \tilde{D} \right\}_0^\epsilon . \end{aligned} \quad (33)$$

Auf gleiche Weise erhält man für die mittlere Doppelbesetzung \bar{d}_i

$$\begin{aligned} \bar{d}_i &= [1 + x_i (1 - n_{i,0} + \bar{d}_{i,0})] \left\{ \bar{d}_{i,0} \right. \\ &\quad \left. + \sum_\sigma \left[\langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle_0 \left\{ (n_{i-\sigma} - \langle \hat{n}_{i-\sigma} \rangle_0) \tilde{D} \right\}_0^\epsilon + \frac{1}{2} (1 - x_i \bar{d}_{i,0}) \left\{ (D_i - D_i^{HF}) \tilde{D} \right\}_0^\epsilon \right] \right\} . \end{aligned} \quad (34)$$

Um den großen Vorteil dieses Formalismus in hohen Dimensionen zu sehen, betrachten wir jetzt die Selbstenergie in unserem Formalismus, die wir analog zu Abschnitt 2.2 als $\widetilde{S}_\sigma(\mathbf{g}, \mathbf{h})$ bezeichnen. Sie wird graphisch durch dieselben Diagramme bestimmt, die auch die Selbstenergie $S_\sigma(\mathbf{g}, \mathbf{h})$ von Metzner und Vollhardt definieren. Einziger Unterschied ist die neue Interpretation von „Vertices“ und „Linien“ (siehe Gleichungen (12) und (14)). Formal ergibt sich die Selbstenergie aus

$$\begin{aligned} \widetilde{S}_\sigma(\mathbf{g}, \mathbf{h}) &= -x_g \delta_{\mathbf{g}, \mathbf{h}} \left\{ (n_{g-\sigma} - \langle \hat{n}_{g-\sigma} \rangle_0) \tilde{D} \right\}_0^\epsilon \\ &\quad + x_g x_h \left\{ c_{g\sigma}^+ c_{h\sigma}^- (n_{g-\sigma} - \langle \hat{n}_{g-\sigma} \rangle_0) (n_{h-\sigma} - \langle \hat{n}_{h-\sigma} \rangle_0) \tilde{D} \right\}_0^\epsilon . \end{aligned} \quad (35)$$

Benutzen wir

$$\left\{ (n_{i\sigma} - \langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle_0) \tilde{D} \right\}_0^\epsilon = -\frac{1}{x_i} \widetilde{S}_{-\sigma}(\mathbf{i}, \mathbf{i}) \quad (36a)$$

$$\left\{ (D_i - D_i^{HF}) \tilde{D} \right\}_0^\epsilon = -\frac{1}{x_i} \sum_f \widetilde{S}_\sigma(\mathbf{i}, \mathbf{f}) \widetilde{P}_\sigma^0(\mathbf{f}, \mathbf{i}) \quad (\sigma = \uparrow, \downarrow) , \quad (36b)$$

so können wir die Einteilchen-Dichtematrix ($\mathbf{i} \neq \mathbf{j}$), die mittleren Teilchendichten und die mittlere Doppelbesetzung schreiben als

$$\begin{aligned} P_\sigma(\mathbf{i}, \mathbf{j}) &= \sqrt{q_{i\sigma}} \sqrt{q_{j\sigma}} \left[\widetilde{P}_\sigma^0(\mathbf{i}, \mathbf{j}) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\mathbf{g}, \mathbf{h}} \left(\widetilde{P}_\sigma^0(\mathbf{i}, \mathbf{g}) - \delta_{i,g} \alpha_{i\sigma} \right) \widetilde{S}_\sigma(\mathbf{g}, \mathbf{h}) \left(\widetilde{P}_\sigma^0(\mathbf{h}, \mathbf{j}) - \delta_{h,j} \alpha_{j\sigma} \right) \right] \end{aligned} \quad (37)$$

$$\begin{aligned}\langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle &= \langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle_0 - \frac{1}{x_i} \widetilde{S}_\sigma(i, i) - (1 - \langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle_0) \langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle_0 \widetilde{S}_\sigma(i, i) \\ &\quad - (1 - 2\langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle_0) \sum_f \widetilde{S}_\sigma(i, f) \widetilde{P}_\sigma^0(f, i)\end{aligned}\quad (38)$$

$$\begin{aligned}\bar{d}_i &= [1 + x_i(1 - n_{i,0} + \bar{d}_{i,0})] \times \\ &\quad \left\{ \bar{d}_{i,0} - \frac{1}{x_i} \sum_\sigma \left[\langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle_0 \widetilde{S}_\sigma(i, i) + \frac{1}{2} (1 - x_i \bar{d}_{i,0}) \sum_f \widetilde{S}_\sigma(i, f) \widetilde{P}_\sigma^0(f, i) \right] \right\}.\end{aligned}\quad (39)$$

Weil es immer drei oder mehr verschiedene Wege von g nach h in einem Graphen zu $\widetilde{S}_\sigma(g, h)$ gibt [20,25] und wir alle on-site Beiträge in den Graphen eliminiert haben (siehe Gleichung (30)), verschwindet die Selbstenergie in unendlichen Dimensionen vollständig, d. h.

$$\widetilde{S}_\sigma(g, h) \equiv 0 \quad \text{in } d = \infty. \quad (40)$$

Das bedeutet, daß wir in $d = \infty$ *keinen einzigen* Graphen berechnen müssen, um das einfache, exakte Ergebnis

$$P_\sigma(i, j) = \sqrt{q_{i\sigma}} \sqrt{q_{j\sigma}} \widetilde{P}_\sigma^0(i, j) \quad (i \neq j) \quad (41)$$

zu erhalten. Gleichung (41) zeigt, daß die Hüpftamplitude zwischen i und j lediglich durch zwei ortsabhängige Faktoren $\sqrt{q_{i\sigma}} \sqrt{q_{j\sigma}}$ renormiert wird.

Ähnlich reduziert sich der Ausdruck (38) in $d = \infty$ zu

$$\langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle = \langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle_0, \quad (42)$$

unabhängig von g . Dies zeigt explizit, daß in $d = \infty$ die Wirkung des Gutzwiller-Korrelators $g^{\hat{D}}$ auf die lokalen Dichten $\langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle$ vollständig von den ortsabhängigen „Fugazitäten“ $g^{-\mu_i}$, $g^{-\mu_i}$ und g^{η_i} in Gleichung (20) absorbiert wird. Es ist möglich, die lokalen „Fugazitäten“ so zu wählen, daß Gleichung (42) in beliebigen Dimensionen gilt.

Dies bringt aber keinerlei rechentechnische Vorteile. Gleichung (42) gilt *nicht* für die lokalen Dichten in $\{|\Psi_0\rangle\}$. Stellt man die Gutzwiller-korrelierten Variationswellenfunktionen $|\Psi_g\rangle$ in der Form $|\Psi_g\rangle = g^{\hat{D}} |\Psi_0\rangle$ dar (Gleichung (4)), so erhält man keine einfache Beziehung zwischen den lokalen Dichten im wechselwirkenden und nichtwechselwirkenden Fall. Dies wurde erstmals von Vulović und Abrahams in ihrer Arbeit zum periodischen Anderson Modell [33] explizit erwähnt.

Zum Abschluß geben wir die Formel für die mittlere Doppelbesetzung in $d = \infty$:

$$\tilde{d}_i = [1 + x_i(1 - n_{i,0} + \bar{d}_{i,0})]\bar{d}_{i,0} \quad . \quad (43)$$

Diese Gleichung kann offensichtlich dazu benutzt werden, den Parameter x_i zugunsten der Doppelbesetzung im wechselwirkenden System (\tilde{d}_i) zu eliminieren.

3 Exakte Durchführung des Variationsverfahrens in $d = \infty$: Grundzustandsenergien

Wir geben in diesem Kapitel die allgemeinen Ausdrücke für den Erwartungswert von \hat{H} in $\{|\Psi_g\rangle\}$ an, den wir als „Grundzustandsenergie“ $\langle\hat{H}\rangle = \langle\Psi_g|\hat{H}|\Psi_g\rangle/\langle\Psi_g|\Psi_g\rangle$ bezeichnen. Wir betrachten allgemeine Gutzwiller-korrelierte Variationswellenfunktionen für das Hubbard-Modell in Abschnitt 3.1 und für das periodische Anderson Modell ohne Entartung in Abschnitt 3.2, jeweils im Grenzfall $d = \infty$. Als Beispiel für die einfache Anwendbarkeit der allgemeinen Gleichungen geben wir die Ergebnisse für die Gutzwiller-korrelierte antiferromagnetische Spindichtewelle an, die zur Beschreibung von Antiferromagnetismus im Hubbard-Modell herangezogen wird. Als weiteres Beispiel liefern wir die in $d = \infty$ exakten Resultate für eine von Rice und Ueda [28], Brandow [29] und anderen Gruppen [30-33] für das periodische Anderson-Modell vorgeschlagene Variationswellenfunktion. Wir vergleichen die in $d = \infty$ exakten Resultate für diese Wellenfunktion mit den Ergebnissen von „Mean-Field“-Rechnungen [6,45] für das periodische Anderson-Modell.

3.1 Hubbard-Modell

3.1.1 Allgemeiner Ausdruck für die Grundzustandsenergie

Wir verwenden Gleichung (43) für die Doppelbesetzung in $d = \infty$ und erhalten für x_i

$$x_i = \frac{\bar{d}_i - \bar{d}_{i,0}}{\bar{d}_{i,0}(1 - n_{i,0} + \bar{d}_{i,0})} \quad . \quad (44)$$

Zusammen mit Gleichung (23a) finden wir

$$g^2 = \frac{\bar{d}_i(1 - n_{i,0} + \bar{d}_i)}{\left[\langle\hat{n}_{ii}\rangle_0 - \bar{d}_i\right]\left[\langle\hat{n}_{ii}\rangle_0 - \bar{d}_i\right]} \quad . \quad (45)$$

Dieser Ausdruck hat die Form eines Massenwirkungsgesetzes [2]. In der Theorie von Mischungen [46] erhält man dieses Ergebnis innerhalb der „quasichemischen Näherung“. Statt des Boltzmann-Faktors haben wir hier den Faktor g^2 , der das Gleichgewicht zwischen den lokalen Konzentrationen der Doppelbesetzungen (\bar{d}_i) und leeren Plätzen ($1 - n_{i,0} + \bar{d}_i$) im Vergleich zu den einfach besetzten Gitterplätzen ($[(\hat{n}_{i1})_0 - \bar{d}_i][(\hat{n}_{i1})_0 - \bar{d}_i]$) regelt. Im Falle der Gutzwiller-Wellenfunktion haben wir Translationsinvarianz (d. h. $\bar{d}_i = \bar{d}$ etc.). Für diesen Spezialfall wurde bereits von Metzner und Vollhardt [12,20] gezeigt, daß Gleichung (45) in $d = \infty$ exakt ist. Wir können nun beweisen, daß diese Relation *lokal* für allgemeines $|\Psi_g\rangle$ erfüllt ist, wenn wir die Wellenfunktion in der Form von Gleichung (20) verwenden, $|\Psi_g\rangle = g^K |\Phi_0\rangle$. Sie gilt *nicht* in der „üblichen“ Darstellung von $|\Psi_g\rangle$ nach Gleichung (4).

Gleichung (45) erlaubt nun, alle Erwartungswerte durch die physikalische Größe \bar{d}_i auszudrücken. \bar{d}_i ist die mittlere Doppelbesetzung im wechselwirkenden System. Es ist

$$q_{i\sigma} = \frac{1}{\langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle_0 (1 - \langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle_0)} \times \left[\sqrt{(1 - n_{i,0} + \bar{d}_i)(\langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle_0 - \bar{d}_i)} + \sqrt{\bar{d}_i(\langle \hat{n}_{i-\sigma} \rangle_0 - \bar{d}_i)} \right]^2 \quad (46)$$

und der Erwartungswert des Hamiltonoperators für das Hubbard Modell lautet

$$\langle \hat{H} \rangle = \sum_{(i,j)} \sqrt{q_{i\sigma}} \sqrt{q_{j\sigma}} P_\sigma^0(i,j) + U \sum_i \bar{d}_i \quad (47)$$

Diese Form für $\langle \hat{H} \rangle$ wurde zum ersten Mal von Kotliar und Ruckenstein [34] mit Hilfe eines „Slave-Boson“-Zugangs zum Hubbard-Modell abgeleitet (siehe auch Kapitel 5.2). Im translationsinvarianten Fall ist $q_{i\sigma} = q_\sigma$ der Renormierungsfaktor für die kinetische Energie in der Gutzwiller-Wellenfunktion [2]. Bereits Metzner und Vollhardt [12] haben gezeigt, daß dieser Faktor für die Gutzwiller-Wellenfunktion in $d = \infty$ exakt ist. Für die recht einfache Gutzwiller-Wellenfunktion kann man die richtigen q -Faktoren auch

durch das Abzählen von zulässigen Hüpfprozessen erhalten (für Einzelheiten, siehe Vollhardt [8]). Wie im Falle der mittleren Doppelbesetzung \bar{d}_i können wir die Ergebnisse dieses Konzepts auf beliebige $|\Psi_g\rangle$ in Gleichung (20) verallgemeinern, indem wir *lokale* Renormierungsfaktoren $\sqrt{q_{i\sigma}}$ einführen.

3.1.2 Exakte Ergebnisse für die Gutzwiller-korrelierte antiferromagnetische Spindichtewelle

Als Beispiel untersuchen wir jetzt eine allgemeine Gutzwiller-korrelierte antiferromagnetische Spindichtewelle. Für höchstens halbgefülltes Band ($n \leq 1$) kann man diese Wellenfunktion folgendermaßen schreiben:

$$|\Psi_g\rangle = g^D |\Psi_0\rangle = g^K |\Phi_0\rangle$$

$$|\Phi_0\rangle = \prod_{\sigma} \prod_{\epsilon(\mathbf{k}) \leq \epsilon_F} [\tilde{u}_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} + \sigma \tilde{v}_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^{\dagger}] |Vakuum\rangle , \quad (48a)$$

wobei $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \dots, \pi)$ ein halber reziproker Gittervektor ist. Die Variationsparameter $\tilde{u}_{\mathbf{k}}, \tilde{v}_{\mathbf{k}}$ kann man wegen $\tilde{u}_{\mathbf{k}}^2 + \tilde{v}_{\mathbf{k}}^2 = 1$ als

$$\tilde{u}_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \theta_{\mathbf{k}}^2} \right)} \quad (48b)$$

$$\tilde{v}_{\mathbf{k}} = -\text{sgn}(\epsilon(\mathbf{k})) \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{1 - \theta_{\mathbf{k}}^2} \right)}$$

schreiben, wobei $\theta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = \theta_{\mathbf{k}}$ gelten soll. Dann ist $|\Phi_0\rangle$ ein Quasiteilchenvakuum [47]. Die Untergittermagnetisierung ist durch $m = m_i = \langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle - \langle \hat{n}_{i\downarrow} \rangle$ gegeben (im folgenden sei die Untergittermagnetisierung stets für dasjenige Untergitter angegeben, für das $m \geq 0$ ist). In $d = \infty$ haben wir $m = m_0 = (2/L) \sum_{\epsilon(\mathbf{k}) \leq \epsilon_F} \tilde{\theta}_{\mathbf{k}}$ und $n_{i,0} = n_0 = n$. Aus Gleichung (45) folgt $\bar{d}_i = \bar{d}$ und wir erhalten $q = \sqrt{q_{i\epsilon A,\sigma}} \sqrt{q_{i\epsilon B,\sigma}}$ als spinunabhängigen Renormierungsfaktor für das Hüpfen zwischen einem *A*- und einem *B*-Gitterplatz. Das Variationsproblem für das Hubbard Modell (1) ist dann die Minimierung von

$$\langle \hat{H} \rangle = 2q(m, \bar{d}) \sum_{\epsilon(\mathbf{k}) \leq \epsilon_F} \epsilon(\mathbf{k}) \sqrt{1 - \tilde{\theta}_{\mathbf{k}}^2} + UL\bar{d} \quad (49a)$$

mit

$$q(m, \bar{d}) = \frac{2(1 - n + 2\bar{d})\sqrt{(n - 2\bar{d})^2 - m^2} + 4(n - 2\bar{d})\sqrt{\bar{d}(1 - n + \bar{d})}}{\sqrt{(n^2 - m^2)[(2 - n)^2 - m^2]}} \quad (49b)$$

nach $\tilde{\theta}_{\mathbf{k}}$ und \bar{d} (statt g). Variiert man nach $\tilde{\theta}_{\mathbf{k}}$, so erhält man

$$\tilde{\theta}_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta}{\sqrt{[\epsilon(\mathbf{k})]^2 + \Delta^2}} \quad . \quad (50)$$

Gleichung (50) bedeutet, daß wir die unendliche Zahl von Variationsparametern in Gleichung (48a) auf lediglich zwei Parameter Δ und \bar{d} reduzieren können. Setzen wir dies in Gleichung (49a) ein, so erhalten wir das Ergebnis von Metzner und Vollhardt

$$E(m, \bar{d}) = (-2)q(m, \bar{d}) \sum_{\epsilon(\mathbf{k}) \leq \epsilon_F} \frac{[\epsilon(\mathbf{k})]^2}{\sqrt{[\epsilon(\mathbf{k})]^2 + \Delta^2}} + UL\bar{d} \quad (51a)$$

$$m(\Delta) = \frac{2}{L} \sum_{\epsilon(\mathbf{k}) \leq \epsilon_F} \frac{\Delta}{\sqrt{[\epsilon(\mathbf{k})]^2 + \Delta^2}} \quad . \quad (51b)$$

Für eine detaillierte Diskussion dieses Ergebnisses sei auf Referenzen [20,25] verwiesen. Folgende zwei Punkte der Diskussion seien aber an dieser Stelle wiederholt, wobei wir die Möglichkeit eines ferromagnetischen Übergangs nicht berücksichtigen (siehe hierzu Referenz [48]):

1. für halbvolles Band ($n = 1$) liefert die Gutzwiller-korrierte antiferromagnetische Spindichtewelle eine Grundzustandsenergie, die tiefer liegt als die Grundzustandsenergie der Gutzwiller-Wellenfunktion ($\Delta = 0$) und der Hartree-Fock-Spindichtewelle ($g = 1$); das heißt, das optimale Δ ist von Null verschieden und das optimale g ist ungleich Eins. Dies bedeutet, daß sowohl lokale Korrelationen

als auch langreichweitige antiferromagnetische Ordnung für eine Absenkung der Energie wesentlich sind;

2. es gibt eine kritische Dichte $n_c^{(1)} \simeq 0.8$, unterhalb der der paramagnetische Zustand für alle U stabil ist. Oberhalb von $n_c^{(1)}$ gibt es Bereiche der Wechselwirkungsstärke U ($U_c^{(1)} \leq U \leq U_c^{(2)}$), für die der antiferromagnetische Zustand stabiler ist. Für Dichten oberhalb von $n_c^{(2)} \simeq 0.9$ ist der antiferromagnetische Zustand für alle Werte von U oberhalb von $U_c^{(1)}$ stabil.

In numerischen Rechnung (Variations-Monte-Carlo [14]) wurde stets eine Hartree-Fock-Form für $|\Psi_0\rangle$ angenommen, wobei $|\Psi_g\rangle$ als $|\Psi_g\rangle = g^{\hat{D}} |\Psi_0\rangle$ angesetzt wurde. Diese Form ist aber nicht optimal in $d = \infty$, denn in unserem Formalismus nimmt offensichtlich $|\Phi_0\rangle$ in $|\Psi_g\rangle = g^{\hat{K}} |\Phi_0\rangle$ die Hartree-Fock-Form an. Dies macht es uns möglich, eine neue Variationswellenfunktion zur numerischen Untersuchung in $d = 2, 3$ vorzuschlagen. Wir gehen auf diesen Punkt in Kapitel 8 detaillierter ein. Dort werden wir diese Wellenfunktion explizit in einer Form angeben, die direkt für numerische Untersuchungen geeignet ist (siehe Gleichungen (121)-(125)).

In der Formulierung von Metzner und Vollhardt ist $|\Psi_g\rangle$ durch $|\Psi_g\rangle = g^{\hat{D}} |\Psi_0\rangle$ gegeben und das optimierte $|\Psi_0\rangle$ hat eine viel kompliziertere Form. Das hat zur Konsequenz, daß man $|\Psi_g\rangle$ nicht in einer für eine numerische Untersuchung geeigneten Form angeben kann. Ebenso sind die explizite Ableitung von Gleichung (51) und die Berechnung der Impulsverteilung recht mühsam [25]. Hier erhalten wir die Ergebnisse für die Gutzwiller-korrelierte antiferromagnetische Spindichtewelle aus einer einfachen Anwendung allgemeiner Gleichungen.

3.2 Periodisches Anderson-Modell

3.2.1 Hamilton-Operator und Variationswellenfunktionen

Das periodische Anderson-Modell ist eines der einfachsten denkbaren Modelle, um sowohl die physikalischen Eigenschaften von zwischervalenten Verbindungen als auch von Systemen mit schweren Fermionen qualitativ zu beschreiben [5]. Die elektronischen Eigenschaften dieser Stoffe werden durch delokalisierte *s*-und *p*-Bänder und durch stark lokalisierte, nicht vollständig gefüllte *f*-Elektronenzustände bestimmt. Bedingt durch die Kristallstruktur ist der Drehimpuls keine gute Quantenzahl mehr und es kommt zu einer Hybridisierung der *s*- und *p*- mit den *f*-Orbitalen. Wegen der gut lokalisierten *f*-Zustände muß außerdem eine starke, lokale Coulomb-Abstoßung *U* der *f*-Elektronen berücksichtigt werden. Dieser Anteil wird durch die Hubbard-Wechselwirkung beschrieben. Unter der vereinfachenden Annahme, daß orbitale Entartungen der *f*-Elektronen und auch der Leitungs(*c*)-Elektronen vernachlässigt werden können, lautet der Hamiltonoperator für das periodische Anderson-Modell

$$\hat{H}_{PAM} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_c(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_f(\mathbf{k}) \hat{f}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{k}\sigma} + U \sum_{\mathbf{i}} \hat{n}_{\mathbf{i}\uparrow}^\dagger \hat{n}_{\mathbf{i}\downarrow}^\dagger - \left(\sum_{\mathbf{k}\sigma} V_{\mathbf{k}} \hat{f}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + h.c. \right) . \quad (52)$$

Hierbei ist $\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger = (1/\sqrt{L}) \sum_{\mathbf{i}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{i}} \hat{c}_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger$ der Erzeugungsoperator für ein Leitungselektron mit Spin σ im Blochzustand \mathbf{k} , $\hat{f}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ ein Erzeugungsoperator für ein *f*-Elektron mit Spin σ am Gitterplatz \mathbf{i} und $\hat{n}_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger = \hat{f}_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger \hat{f}_{\mathbf{i}\sigma}$ der Anzahloperator für ein *f*-Elektron mit Spin σ am Gitterplatz \mathbf{i} . Beide Elektronenbänder sollen eine Dispersion $\epsilon_c(\mathbf{k})$ bzw. $\epsilon_f(\mathbf{k})$ haben, wobei das *f*-Band im Mittel um die Energie $-E^f$ tiefer als das Leitungsband liegen soll (d. h. es gelte $\sum_{\mathbf{k}} \epsilon_f(\mathbf{k}) = -E^f$ und $\sum_{\mathbf{k}} \epsilon_c(\mathbf{k}) = 0$). Weiterhin sollen die Bänder überlappen, d. h. $\max_{\mathbf{k}}(\epsilon_f(\mathbf{k})) > \min_{\mathbf{k}}(\epsilon_c(\mathbf{k}))$. Das Matrixelement $V_{\mathbf{k}}$ für die Hybridisierung der beiden Bänder ist so gewählt, daß im Falle $U = 0$ der Blochimpuls \mathbf{k}

eine gute Quantenzahl ist. Je nach Wahl der Parameter U , $V_{\mathbf{k}}$, $\epsilon_c(\mathbf{k})$ und $\epsilon_f(\mathbf{k})$ sollte das Modell in der Lage sein, sowohl zwischenvalente Verbindungen also auch Materialien mit schweren Fermionen qualitativ zu beschreiben [5]. Oft nimmt man vereinfachend an, daß $V_{\mathbf{k}} = V$ und $\epsilon_f(\mathbf{k}) = -E^f$ unabhängig von \mathbf{k} sein sollen.

Für $U = 0$ kann der Hamiltonian leicht diagonalisiert werden. Man erhält [5]

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{PAM}}(U = 0) &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [E^+(\mathbf{k}) \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} + E^-(\mathbf{k}) \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}] \quad \text{mit} \\ E^{\pm}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} \left[\epsilon_c(\mathbf{k}) + \epsilon_f(\mathbf{k}) \pm \sqrt{(\epsilon_c(\mathbf{k}) - \epsilon_f(\mathbf{k}))^2 + 4V_{\mathbf{k}}^2} \right] \quad .\end{aligned}\quad (53)$$

Hierbei sind $\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+$, $\hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}^+$ Erzeugeroperatoren für das obere bzw. untere Quasiteilchenband mit den Energien $E^+(\mathbf{k})$ bzw. $E^-(\mathbf{k})$. Explizit ist

$$\begin{aligned}\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^+ &= \cos \theta_0(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^+ + \sin \theta_0(\mathbf{k}) \hat{f}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \\ \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}^+ &= -\sin \theta_0(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^+ + \cos \theta_0(\mathbf{k}) \hat{f}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \\ \tan 2\theta_0(\mathbf{k}) &= \frac{2V_{\mathbf{k}}}{\epsilon_f(\mathbf{k}) - \epsilon_c(\mathbf{k})} \quad .\end{aligned}\quad (54)$$

Der Winkel $\theta_0(\mathbf{k})$ gibt an, wie stark die c - und f -Elektronen bei $U = 0$ durch die Hybridisierung $V_{\mathbf{k}}$ gemischt werden. Der Grundzustand ist für weniger als halbe Bandfüllung ($N_1 + N_1 \leq 2L$) gegeben durch

$$\begin{aligned}|\Psi(U = 0)\rangle &= \prod_{E^-(\mathbf{k}) \leq \epsilon_F, \sigma} \hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}^+ |\text{Vakuum}\rangle \\ &= \prod_{\epsilon_c(\mathbf{k}) \leq \epsilon_F, \sigma} [1 + a_{\mathbf{k}\sigma}^0 \hat{f}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}] |\text{cFS}\rangle \quad .\end{aligned}\quad (55)$$

Die zweite Darstellung von $|\Psi(U = 0)\rangle$ wird im Zusammenhang mit Variationswellenfunktionen häufiger verwendet, da sie an die Variationsansätze von Varma und Yafet [49] bzw. Gunnarson und Schönhammer [50] für das Anderson-Modell mit einer Verunreinigung erinnert. In Gleichung (55) ist

$$a_{\mathbf{k}\sigma}^0\{V_{\mathbf{k}}, \epsilon_c(\mathbf{k}), \epsilon_f(\mathbf{k})\} = \frac{(-1)}{\tan \theta_0(\mathbf{k})} = \frac{2V_{\mathbf{k}}}{\epsilon_f(\mathbf{k}) - \epsilon_c(\mathbf{k}) + \sqrt{(\epsilon_c(\mathbf{k}) - \epsilon_f(\mathbf{k}))^2 + 4V_{\mathbf{k}}^2}} \quad (56a)$$

und

$$|cFS\rangle = \prod_{\epsilon_c(\mathbf{k}) \leq \epsilon_F, \sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^+ |Vakuum\rangle \quad (56b)$$

ist der Fermisee der Leitungselektronen, wenn keine f -Niveaus besetzt sind.

In vollkommener Analogie zum 2. Kapitel setzen wir als Variationsgrundzustand folgende Wellenfunktion an

$$|\Psi_g\rangle = g^{D_f} |\Psi_0\rangle = g^{\sum_i [\hat{D}_i^f - \mu_{i1}\hat{n}_{i1}^f - \mu_{i2}\hat{n}_{i2}^f + \eta_i]} |\Phi_0\rangle \quad . \quad (57)$$

Dabei sind $|\Psi_0\rangle$ bzw. $|\Phi_0\rangle$ Vakua für geeignet definierte Quasiteilchenoperatoren, die aus einer Linearkombination von Vernichteroperatoren für f - und c -Elektronen zusammengesetzt sind (beispielsweise können sie Vakua für die Operatoren $\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}$, $\hat{b}_{\mathbf{k}\sigma}$ sein; nur die Gesamtteilchenzahl in den Wellenfunktionen sei fest). Bei diesem Ansatz werden – wie im Falle des Hubbard-Modells – energetisch ungünstige Konfigurationen mit vielen doppelbesetzten f -Gitterplätzen unterdrückt. Der neue Aspekt beim periodischen Anderson-Modell oder ähnlichen Zweibandmodellen (z. B. beim Emery-Modell [51]) im Vergleich zum Hubbard-Modell ist die variable Zahl von Elektronen im stark korrelierten Band. Die Zahl der f -Elektronen ist nicht konstant, sondern hängt von der Stärke der Wechselwirkung U ab. Wie wir noch sehen werden, führt dies direkt auf eine Renormierung der Hybridisierung $V_{\mathbf{k}}$.

3.2.2 Allgemeiner Ausdruck für die Grundzustandsenergie

Zur Berechnung der Grundzustandsenergie müssen wir den Erwartungswert von \hat{H}_{PAM} in $|\Psi_g\rangle$ berechnen. Der nach g und den in $|\Phi_0\rangle$ vorhandenen Parametern zu variierte

Ausdruck für die Grundzustandsenergie lautet

$$\langle \hat{H}_{\text{PAM}} \rangle = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_c(\mathbf{k}) \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}^c \rangle + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_f(\mathbf{k}) \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}^f \rangle + U \sum_{\mathbf{i}} \bar{d}_{\mathbf{i}}^f - \sum_{\mathbf{k}\sigma} 2V_{\mathbf{k}} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}^x \rangle. \quad (58)$$

Hierbei ist $\langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}^f \rangle$ die Fouriertransformierte der Einteilchen-Dichtematrix der f -Elektronen, d. h. $\langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}^f \rangle = (1/L) \sum_{\mathbf{ij}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{i}-\mathbf{j})} P_{\sigma}^f(\mathbf{i}, \mathbf{j})$. Die anderen Erwartungswerte sind analog definiert. Wir müssen also folgende Größen bestimmen:

$$\bar{d}_{\mathbf{i}}^f = \langle \hat{D}_{\mathbf{i}}^f \rangle : \text{mittlere Doppelbesetzung der } f\text{-Elektronen} \quad (59a)$$

$$P_{\sigma}^f(\mathbf{i}, \mathbf{j}) = \langle \hat{f}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{f}_{j\sigma} \rangle : \text{Einteilchen-Dichtematrix der } f\text{-Elektronen} \quad (59b)$$

$$P_{\sigma}^c(\mathbf{i}, \mathbf{j}) = \langle \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} \rangle : \text{Einteilchen-Dichtematrix der } c\text{-Elektronen} \quad (59c)$$

$$P_{\sigma}^x(\mathbf{i}, \mathbf{j}) = \langle \hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{f}_{j\sigma} \rangle : c\text{-}f\text{-Hybridisierungs-Matrix (eXchange-hopping)} \quad (59d)$$

Der Korrelator in Gleichung (57) enthält lediglich f -Operatoren. Bei der Berechnung von Erwartungswerten muß man daher so umformen, daß nur mehr solche Erwartungswerte auftreten, die sämtlich aus f -Operatoren gebildet sind. Dann ist das Problem analog zur Berechnung von Erwartungswerten im Falle von Gutzwiller-korrierten Variationswellenfunktionen für das Hubbard-Modell (siehe Kapitel 2).

Die ersten beiden Ausdrücke in Gleichung (59) haben wir schon in Kapitel 2.3 betrachtet, da einzig f -Operatoren auftreten. Wir erhalten analog zu Gleichungen (37), (38) und (39)

$$\begin{aligned} P_{\sigma}^f(\mathbf{i}, \mathbf{j}) &= \sqrt{q_{i\sigma}} \sqrt{q_{j\sigma}} \left[\widetilde{P_{\sigma}^{f,0}}(\mathbf{i}, \mathbf{j}) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\mathbf{g}, \mathbf{h}} \left(\widetilde{P_{\sigma}^{f,0}}(\mathbf{i}, \mathbf{g}) - \delta_{\mathbf{i}, \mathbf{g}} \alpha_{i\sigma} \right) \widetilde{S}_{\sigma}(\mathbf{g}, \mathbf{h}) \left(\widetilde{P_{\sigma}^{f,0}}(\mathbf{h}, \mathbf{j}) - \delta_{\mathbf{h}, \mathbf{j}} \alpha_{j\sigma} \right) \right] \end{aligned} \quad (60)$$

für $\mathbf{i} \neq \mathbf{j}$ und

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_{i\sigma}^f \rangle &= \langle \hat{n}_{i\sigma}^f \rangle_0 - \frac{1}{x_i} \widetilde{S}_{\sigma}(\mathbf{i}, \mathbf{i}) - (1 - \langle \hat{n}_{i\sigma}^f \rangle_0) \langle \hat{n}_{i\sigma}^f \rangle_0 \widetilde{S}_{\sigma}(\mathbf{i}, \mathbf{i}) \\ &\quad - (1 - 2\langle \hat{n}_{i\sigma}^f \rangle_0) \sum_{\mathbf{f}} \widetilde{S}_{\sigma}(\mathbf{i}, \mathbf{f}) \widetilde{P_{\sigma}^{f,0}}(\mathbf{f}, \mathbf{i}) \end{aligned} \quad (61)$$

sowie

$$\begin{aligned} \bar{d}_i^f &= [1 + x_i(1 - n_{i,0}^f + \bar{d}_{i,0}^f)] \times \\ &\quad \left\{ \bar{d}_{i,0}^f - \frac{1}{x_i} \sum_{\sigma} \left[\langle \hat{n}_{i\sigma}^f \rangle_0 \bar{S}_{\sigma}(i, i) + \frac{1}{2} (1 - x_i \bar{d}_{i,0}^f) \sum_{\mathbf{f}} \bar{S}_{\sigma}(i, \mathbf{f}) \bar{P}_{\sigma}^{f,0}(\mathbf{f}, i) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (62)$$

Um Verwechslungen zu vermeiden, ist an einigen Größen, wie z. B. der Dichte der f -Elektronen $\langle \hat{n}_{i\sigma}^f \rangle$, ein zusätzlicher oberer Index „ f “ angefügt. Wo eine Verwechslung ausgeschlossen ist, haben wir diesen Index weggelassen (wie z. B. bei der f -Elektronen Selbsternergie $\bar{S}_{\sigma}(\mathbf{g}, \mathbf{h})$). Die Ausdrücke für x_i , $q_{i\sigma}$, $\alpha_{i\sigma}$ und $\bar{S}_{\sigma}(\mathbf{g}, \mathbf{h})$ sind aus den Gleichungen (23a), (25a), (25b) und (35) ersichtlich.

Die verbleibenden Erwartungswerte $P_{\sigma}^c(i, j)$ und $P_{\sigma}^x(i, j)$ sind ebenfalls einfach zu berechnen, wenn man bedenkt, daß die c -Operatoren stets mit den f -Operatoren antikommutieren. Nach kurzer Rechnung analog zu Kapitel 2.3 erhält man das Ergebnis

$$P_{\sigma}^c(i, j) = P_{\sigma}^{c,0}(i, j) + \sum_{\mathbf{g}, \mathbf{h}} P_{\sigma}^{x,0}(i, \mathbf{g}) \bar{S}_{\sigma}(\mathbf{g}, \mathbf{h}) P_{\sigma}^{x,0}(\mathbf{h}, j) \quad (63)$$

$$\begin{aligned} P_{\sigma}^x(i, j) &= \sqrt{q_{j\sigma}} \left[P_{\sigma}^{x,0}(i, j) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\mathbf{g}, \mathbf{h}} P_{\sigma}^{x,0}(i, \mathbf{g}) \bar{S}_{\sigma}(\mathbf{g}, \mathbf{h}) \bar{P}_{\sigma}^{f,0}(\mathbf{h}, j) - \alpha_{j\sigma} \sum_{\mathbf{g}} P_{\sigma}^{x,0}(i, \mathbf{g}) \bar{S}_{\sigma}(\mathbf{g}, j) \right] . \end{aligned} \quad (64)$$

Diese Beziehungen gelten noch in allen Dimensionen.

Im Limes hoher Dimensionen vereinfachen sich die Gleichungen (60)-(64) erheblich, da in $d = \infty$ wieder $\bar{S}_{\sigma}(\mathbf{g}, \mathbf{h}) = 0$ gilt. Die für allgemeines $|\Psi_g\rangle$ gültigen, exakten Ergebnisse lauten dann

$$g^2 = \frac{\bar{d}_i^f (1 - n_{i,0}^f + \bar{d}_i^f)}{\left[\langle \hat{n}_{i\sigma}^f \rangle_0 - \bar{d}_i^f \right] \left[\langle \hat{n}_{i\sigma}^f \rangle_0 - \bar{d}_i^f \right]} \quad (65a)$$

$$P_{\sigma}^f(i, j) = \sqrt{q_{j\sigma}} \sqrt{q_{i\sigma}} P_{\sigma}^{f,0}(i, j) + \delta_{i,j} (1 - q_{i\sigma}) \langle \hat{n}_{i\sigma}^f \rangle_0 \quad (65b)$$

$$P_{\sigma}^c(i, j) = P_{\sigma}^{c,0}(i, j) \quad (65c)$$

$$P_{\sigma}^x(i, j) = \sqrt{q_{j\sigma}} P_{\sigma}^{x,0}(i, j) . \quad (65d)$$

Die Faktoren $q_{i\sigma}$ sind aus Gleichung (46) ersichtlich. Man muß lediglich $\langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle_0$ durch $\langle \hat{n}_{i\sigma}^f \rangle_0$ ersetzen. Wir erhalten also

$$q_{i\sigma} = \frac{1}{\langle \hat{n}_{i\sigma}^f \rangle_0 (1 - \langle \hat{n}_{i\sigma}^f \rangle_0)} \times \left[\sqrt{(1 - n_{i,0}^f + \bar{d}_i^f)(\langle \hat{n}_{i\sigma}^f \rangle_0 - \bar{d}_i^f)} + \sqrt{\bar{d}_i^f (\langle \hat{n}_{i-\sigma}^f \rangle_0 - \bar{d}_i^f)} \right]^2. \quad (66a)$$

Insbesondere gilt für $U = \infty$, wenn die f -Zustände nur einfach besetzt sein dürfen, daß $\bar{d}_i^f = 0$ und

$$q_{i\sigma} = \frac{1 - n_{i,0}^f}{1 - \langle \hat{n}_{i\sigma}^f \rangle_0} \quad (66b)$$

gilt. Die Tatsache, daß $q_{i\sigma}$ nicht nur von \bar{d}_i^f , sondern auch von $\langle \hat{n}_{i\sigma}^f \rangle_0$ abhängt, wird sich bei der Variation nach den Parametern in $|\Phi_0\rangle$ (siehe Gleichung (57)) als wichtig erweisen. Sie führt zu einem zusätzlichen chemischen Potential, das die mittlere Lage der f -Energieniveaus verschiebt. Dies wird am Beispiel der Rice-Ueda-Brandow Wellenfunktion in Kapitel 3.2.3 näher erläutert werden.

Zentrales Ergebnis dieses Abschnitts ist Gleichung (66). Wir haben mit der Ableitung dieser Gleichung den Beweis erbracht, daß die dort angegebene Form von $q_{i\sigma}$ in $d = \infty$ exakt ist und damit auch in endlichen Dimensionen zumindest qualitativ in Gutzwiller-korrierten Variationswellenfunktionen für das periodische Anderson-Modell enthalten ist.

Die Gleichungen (65) sind leicht interpretierbar.

1. Aus Gleichung (65b) folgt, daß $\langle \hat{n}_{i\sigma}^f \rangle = \langle \hat{n}_{i\sigma}^f \rangle_0$ gilt, d. h. die lokalen f - und c -Elektronendichten sind unabhängig von g . Die Effekte des Korrelators g^{Df} werden wie im Falle des Hubbard-Modells von den lokalen „Fugazitäten“ $g^{-\mu_i}$, g^{γ_i} kompensiert. Zur Erinnerung sei erwähnt, daß wir die Gutzwiller-korrierten

Variationswellenfunktionen als $|\Psi_g\rangle = g^K |\Phi_0\rangle$ schreiben (vgl. Gleichungen (4) und (16)). Diese Kompensation bedeutet aber nicht, daß die lokalen Elektronendichten unabhängig von der Wechselwirkungsstärke U sind. Im allgemeinen wird nämlich auch in $|\Phi_0\rangle$ keine feste f -Teilchenzahl vorgegeben, sondern durch Variation zu bestimmen sein.

2. Das Hüpfen der f-Elektronen von Gitterplatz i zum Gitterplatz j ist wie beim Hubbard-Modell um zwei ortsabhängige Faktoren $\sqrt{q_{i\sigma}}$ und $\sqrt{q_{j\sigma}}$ renormiert.
3. Das Hüpfen der c-Elektronen ist in $d = \infty$ nur von den Eigenschaften von $|\Phi_0\rangle$, nicht aber von g abhängig.
4. Das Matrixelement für die Hybridisierung eines $\hat{c}_{i\sigma}^+$ mit einem $f_{i\sigma}^+$ -Elektron wird ebenfalls um einen (ortsabhängigen) Faktor $\sqrt{q_{i\sigma}}$ renormiert. Der Wert von $q_{i\sigma}$ aus Gleichung (66) steht im Gegensatz zu den Resultaten von „Mean-Field“-Behandlungen des periodischen Anderson-Modells [6,45]. Im Limes $U = \infty$ ($\bar{d}_i^f = 0$) geben diese „Mean-Field“-Rechnungen einen Faktor $q_{i\sigma}^{\text{MF}} = (1 - n_{i,0}^f)$, der nur den Zähler, nicht aber den Nenner von $q_{i\sigma}$ in Gleichung (66b) enthält.

Die physikalischen Konsequenzen dieser vier Punkte lassen sich am leichtesten am einfachen Beispiel der translationsinvarianten Rice-Ueda-Brandow-Wellenfunktion näher erläutern. Wir werden danach auch auf die Frage eingehen, welcher der beiden unterschiedlichen q -Faktoren „realistischer“ ist, ob also $q_{i\sigma}$ gemäß Gleichung (66) oder $q_{i\sigma}^{\text{MF}}$ die Physik im periodischen Anderson-Modell besser beschreibt.

3.2.3 Ergebnisse für die Rice-Ueda-Brandow Variationswellenfunktion

Wir nehmen im folgenden $N_f + N_i \leq 2L$ an, um simple, aber aufwendig zu behandelnde Fallunterscheidungen zu vermeiden. Rice und Ueda [28], Brandow [29] und

andere Gruppen [30-33] haben den Gedanken Gutzwillers für das Hubbard-Modell auf das periodische Anderson-Modell übertragen. Startpunkt für die Konstruktion einer geeigneten Variationswellenfunktion ist das periodische Anderson-Modell für $U = 0$ (siehe Kapitel 3.2.1). Im Sinne von Gutzwiller würde man zunächst den Korrelator $g^{\hat{D}'}$ auf den Grundzustand von $\hat{H}_{PAM}(U = 0)$ anwenden und setzen: $|\Psi_0\rangle = |\Psi(U = 0)\rangle$ (siehe Gleichung (55)). Man hätte dann eine einparametrische Wellenfunktion. Nun ist aber die f -Elektronenzahl nicht erhalten. Wir können daher erwarten, daß die f -Elektronen ins Leitungsband ausweichen werden, wenn man doppelbesetzte f -Zustände unterdrückt. Dadurch wird sich die effektive Hybridisierung ändern. Das bedeutet, daß es physikalisch sinnvoller ist, die Mischungsparameter $a_{\mathbf{k}\sigma}$ in Gleichung (55) nicht auf ihre Werte $a_{\mathbf{k}\sigma}^0$ aus Gleichung (56a) festzulegen, sondern diese im Rahmen des Variationsverfahrens zu bestimmen. Wir fassen also die $a_{\mathbf{k}\sigma}$ als weitere Variationsparameter auf.

Wir schreiben also endlich

$$|\Psi_{PAM}\rangle = g^{\hat{D}'} \prod_{\mathbf{k}\sigma} \left[1 + a_{\mathbf{k}\sigma} \hat{f}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \right] |\text{cFS}\rangle \quad (67a)$$

$$= \left[g^{\hat{D}'} - \mu_1 \hat{N}_1^f - \mu_1 \hat{N}_1^c + nL \right] \prod_{\mathbf{k}\sigma} \left[1 + \widetilde{a}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{f}_{\mathbf{k}\sigma}^+ \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \right] |\text{cFS}\rangle . \quad (67b)$$

Der Zusammenhang zwischen $a_{\mathbf{k}\sigma}$ und $\widetilde{a}_{\mathbf{k}\sigma}$ lautet für den vorliegenden translationsinvarianten Fall

$$\widetilde{a}_{\mathbf{k}\sigma} = g^{\mu\sigma} a_{\mathbf{k}\sigma} . \quad (68)$$

Der Faktor $g^{\mu\sigma}$ entspricht gerade dem Faktor $e^{-\mu_\sigma/2}|_{VA}$ von Vulović und Abrahams [33]. Wir werden sehen, daß für $d = \infty$ die Variationsparameter $\widetilde{a}_{\mathbf{k}\sigma}$ eine sehr einfache Form annehmen (vgl. Kapitel 3.1.2 für die Gutzwiller-korrierte antiferromagnetische Spindichtewelle).

Wir verwenden unsere allgemeinen Gleichungen (65) für den translationsinvarianten

Fall und setzen in Gleichung (58) ein. Damit erhalten wir in $d = \infty$ als zu variierenden Ausdruck für die Grundzustandsenergie

$$\langle \hat{H}_{\text{PAM}} \rangle = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_c(\mathbf{k}) \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}^c \rangle_0 + \sum_{\mathbf{k}\sigma} (q_\sigma \epsilon_f(\mathbf{k}) - E^f(1 - q_\sigma)) \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}^f \rangle_0 + U L \bar{d}^f - \sum_{\mathbf{k}\sigma} 2\sqrt{q_\sigma} V_{\mathbf{k}} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}^c \rangle_0 - \sum_{\sigma} \lambda_\sigma \left[\sum_{\mathbf{k}} (n_\sigma^f - \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}^f \rangle_0) \right] , \quad (69)$$

wobei $\langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}^f \rangle_0 = \widetilde{a_{\mathbf{k}\sigma}^f}^2 / [1 + \widetilde{a_{\mathbf{k}\sigma}^f}^2] = 1 - \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}^c \rangle_0$ und $\langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}^c \rangle_0 = \widetilde{a_{\mathbf{k}\sigma}^c} / [1 + \widetilde{a_{\mathbf{k}\sigma}^c}^2]$ gelten. Außerdem gilt wegen Translationsinvarianz $\langle \hat{n}_{i\sigma}^f \rangle_0 = \langle \hat{n}_{\sigma}^f \rangle_0$ und in $d = \infty$ brauchen wir nicht zwischen der wechselwirkenden und der nicht-wechselwirkenden f -Elektronendichte zu unterscheiden, d. h. es ist $\langle \hat{n}_{\sigma}^f \rangle_0 = n_\sigma^f$. In Gleichung (69) haben wir die Lagrangeparameter λ_σ eingeführt. Vorteil ist nun, daß wir nach den $\widetilde{a_{\mathbf{k}\sigma}^f}$ und n_σ^f getrennt variieren können, wobei die Variation nach λ_σ den Zusammenhang zwischen diesen beiden Größen als Nebenbedingung manifestiert. Es sei daran erinnert, daß q_σ von n_σ^f abhängt. Man kann außerdem die mittlere Doppelbesetzung der f -Zustände im wechselwirkenden System (\bar{d}^f) statt g als Variationsparameter verwenden.

Betrachtet man Gleichung (69), so stellt man fest, daß man den Effekt des Gutzwiller-Korrelators in $d = \infty$ als eine Renormierung der Modellparameter im nichtwechselwirkenden System auffassen kann. Wir finden

$$V_{\mathbf{k}} \rightarrow \widetilde{V}_{\mathbf{k}} = \sqrt{q_\sigma} V_{\mathbf{k}} \quad (70a)$$

$$\epsilon_f(\mathbf{k}) \rightarrow \widetilde{\epsilon_f(\mathbf{k})} = \underbrace{q_\sigma \epsilon_f(\mathbf{k})}_{\text{reduziertes Hüpfen}} + \underbrace{\lambda_\sigma - E^f(1 - q_\sigma)}_{\text{Shift der } f\text{-Niveaus}} . \quad (70b)$$

Damit ist das Variationsproblem für die Parameter $\widetilde{a_{\mathbf{k}\sigma}^f}$ formal dasselbe wie im Falle $U = 0$, d. h. wir können sofort schreiben

$$\widetilde{a_{\mathbf{k}\sigma}^f} = a_{\mathbf{k}\sigma}^0 \{ \widetilde{V}_{\mathbf{k}}, \epsilon_c(\mathbf{k}), \widetilde{\epsilon_f(\mathbf{k})} \} = \frac{2\widetilde{V}_{\mathbf{k}}}{\widetilde{\epsilon_f(\mathbf{k})} - \epsilon_c(\mathbf{k}) + \sqrt{(\epsilon_c(\mathbf{k}) - \widetilde{\epsilon_f(\mathbf{k})})^2 + 4\widetilde{V}_{\mathbf{k}}^2}} . \quad (71)$$

Damit ist die funktionale Form der $\widetilde{a_{k\sigma}}$ vollständig bestimmt und das Problem ist formal gelöst: λ_σ und \overline{d} sind aus den Variationsgleichungen nach \overline{d} und der Gleichung $\sum_{\mathbf{k}} (n_\sigma^f - (\hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}^f)_0) = 0$ zu bestimmen.

Die vollständige Herleitung dieser Gleichungen im Rahmen einer (unkontrollierten) Näherung gelang erstmals Vulović und Abrahams [33]. Für eine detaillierte Analyse der Gleichungen sei auf diese Arbeit und auf die Referenzen [28,30,31] verwiesen. Als wesentlichste Punkte sind festzuhalten:

1. In $d = \infty$ erhält man im Rahmen der Rice-Ueda-Brandow Wellenfunktion ein „Mean-Field“-artiges Ergebnis: die Wechselwirkung renormiert die Einteilchen-Eigenschaften (effektive Bandbreite der f -Elektronen, Renormierung des mittleren f -Niveaus, reduzierte Hybridisierung). Die renormierten Größen hängen von den mittleren Dichten der f -Elektronen und der doppelbesetzten f -Niveaus ab.
2. Der Unterschied zu den „Mean-Field“-Behandlungen des periodischen Anderson-Modells [6,45] liegt in der Form von q_σ (siehe Unterabschnitt 3.2.2). Im nächsten Unterabschnitt werden wir einen detaillierten Vergleich der beiden Ausdrücke für den q -Faktor vornehmen und die physikalischen Konsequenzen der unterschiedlichen Faktoren untersuchen.

3.2.4 Vergleich mit „Mean-Field“-Rechnungen

Die „Mean-Field“-Rechnungen betrachten meist den Grenzfall $U = \infty$ für das periodische Anderson-Modell [6,45], den Fall also, wo die f -Zustände auf einem Gitterplatz höchstens einfach besetzt sein dürfen.

Diese Theorien sind exakt im Limes unendlich großer orbitaler Entartung ($N^f = \infty$) der lokalen f -Zustände (es bietet sich also eine Entwicklung im Parameter $(1/N^f)$

an). Es ergibt sich dann ein Ausdruck für die Grundzustandsenergie, der dem in Gleichung (69) entspricht, in dem aber q_σ durch $q_\sigma^{\text{MF}} = (1 - n^f)$ ersetzt werden muß. Wir wollen im folgenden diskutieren, welcher der beiden q -Faktoren die Physik im periodischen Anderson-Modell besser beschreiben sollte.

Der „Gutzwiller-Faktor“ bietet folgende Vorteile gegenüber dem „Mean-Field“-Faktor:

- a) im Falle eines voll polarisierten f -Bandes (nur \uparrow - oder \downarrow -Elektronen), gibt der Gutzwiller-Faktor q_σ den Wert $q_\sigma = 1$, was offensichtlich das richtige Resultat ist. Der Faktor q_σ^{MF} ist in diesem Fall falsch.
- b) in der Rice-Ueda-Brandow Wellenfunktion haben wir die Forderung $\bar{d}_i^f = 0$ für jeden Gitterplatz erfüllt (zumindest im Limes hoher Dimensionen). Diese Bedingung ist bei den „Mean-Field“-Rechnungen nicht streng gewährleistet. Die nur approximative Behandlung der Nebenbedingung $\bar{d}_i^f = 0$ bei den „Mean-Field“-Rechnungen ist nur für große Entartung N^f zulässig, so daß die Resultate dieser Rechnungen das periodische Anderson-Modell für kleine Entartungen nicht richtig beschreiben.

Es wurde argumentiert, daß die Struktur des Nenners von $q_{i\sigma}$ in Gleichung (66) die Folge der unkontrollierbaren Gutzwiller-artigen Approximationen sein könnte. In dieser Arbeit haben wir aber gezeigt, daß das Ergebnis in $d = \infty$ exakt wird, also kein Artefakt der Gutzwiller-artigen Approximation darstellt. Weiterhin folgt aus unserer Ableitung, daß es sich bei dem Nenner von $q_{i\sigma}$ tatsächlich um einen Gittereffekt handelt; im Falle einer einzigen f -Elektron-Störstelle, reduziert sich die Rice-Ueda-Brandow Wellenfunktion für $g = 0$ ohnehin auf den Varma-Yafet-Zustand [49], so daß der Nenner nicht auftritt. Fazekas [31] hat durch die Betrachtung eines verdünnten Gitters für die

f-Elektronen eine Formel für q_σ in Abhängigkeit von der *f*-Störstellenkonzentration ρ^f abgeleitet,

$$q_\sigma(\rho^f) = \frac{\rho^f(1 - n_\sigma^f)}{1 - \rho^f n_\sigma^f} . \quad (72)$$

Diese Formel interpoliert zwischen den Grenzfällen einer *f*-Störstelle ($\rho^f = (1/L)$) und dem Gitter von *f*-Zuständen ($\rho^f = 1$). Gleichung (72) sollte sich aus unseren allgemeinen Gleichungen (66) und (69) ableiten lassen, indem man eine geeignete Mittelung über zufällig verteilte *f*-Gitterplätze mit Konzentration ρ^f einführt.

Nachdem wir gesehen haben, daß der Nenner in $q_{i\sigma}$ zu keinen Widersprüchen im Falle einer Verunreinigung führt, wollen wir eine physikalische Begründung für die Form von $q_{i\sigma}$ geben (es sei $\sigma = \uparrow$). Betrachten wir für $V_k = V$ und $U = \infty$ das Matrixelement für die Hybridisierung $\langle \Psi_g | \hat{f}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\uparrow} | \Psi_g \rangle / \langle \Psi_g | \Psi_g \rangle$ in einer Gutzwiller-korrierten Wellenfunktion für das periodische Anderson-Modell. Haben wir nur eine *f*-Störstelle, so ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß nach Anwendung des Operators $\hat{f}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\uparrow}$ der *f*-Zustand am Gitterplatz i mit Spin \uparrow besetzt ist, proportional zu $q_{i\sigma}^{\text{MF}} = 1 - \langle \hat{n}_{i\uparrow}^f \rangle_0 - \langle \hat{n}_{i\downarrow}^f \rangle_0$. $q_{i\sigma}^{\text{MF}}$ gibt ganz einfach die Wahrscheinlichkeit dafür an, daß in $|\Psi_g\rangle$ für $g = 0$ kein *f*-Elektron auf dem Gitterplatz ist; für $g = 0$ kann der Gitterplatz leer oder mit einem \uparrow - oder mit einem \downarrow -Elektron besetzt sein. — Haben wir nun aber ein System von L *f*-Elektronen in $|\Psi_g\rangle$, so berechnet sich diese Wahrscheinlichkeit anders: wir haben nämlich die Möglichkeit zu berücksichtigen, daß in $|\Psi_g\rangle$ auf dem Gitterplatz i bereits ein *f*-Elektron mit Spin \uparrow vorhanden sein kann, wenn wir danach fragen, ob wir nach Anwendung des Operators $\hat{f}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\uparrow}$ einen besetzten *f*-Zustand haben. Der Faktor $q_{i\sigma}$ renormiert nämlich die Hybridisierung *relativ* zu ihrem Wert bei $U = 0$ (freie Fermionen). Für $U = \infty$ müssen wir also die Wahrscheinlichkeit dafür berechnen, daß der *f*-Gitterplatz leer ist (Zähler $\equiv q_{i\sigma}^{\text{MF}}$) *relativ* zum Fall $U = 0$, wo das Pauliprinzip verlangt, daß kein *f*-Elektron mit Spin \uparrow auf dem Gitterplatz i in $|\Psi_g\rangle$ vorhanden ist,

wenn wir $\hat{f}_{ij}^+ \hat{c}_{ij}$ anwenden (Nenner $\equiv 1 - \langle \hat{n}_{ij}^f \rangle_0$). Die Berücksichtigung des Pauliprinzips liefert also gerade den Nenner in $q_{i\sigma}$. Insgesamt ist $q_{i\sigma} > q_{i\sigma}^{MF}$, weil die Zahl der im System vorhandenen f -Gitterplätze und f -Elektronen größer als im Falle nur einer Verunreinigung ist und alle f -Elektronen an der Hybridisierung teilnehmen können. Dieser Gittereffekt und das Pauliprinzip werden offensichtlich bei $q_{i\sigma}^{MF}$ nicht berücksichtigt.

Es ist in quantenmechanischen Vierteilchensystemen stets etwas problematisch, mit Wahrscheinlichkeitsargumenten zu arbeiten (siehe hierzu beispielsweise die Ableitung von q_σ in Referenz [28]). Tatsächlich sind die vorgebrachten Argumente nur in $d = \infty$ für $|\Psi_g\rangle$ in der Darstellung $|\Psi_g\rangle = g^{\vec{K}} |\Phi_0\rangle$ richtig (siehe Gleichung (16)). Andererseits interpretieren wir exakt abgeleitete Gleichungen lediglich a posteriori und sind uns daher der Beschränkungen bewußt (exakt nur in $d = \infty$). Weiterhin erkennt man anhand dieser anschaulichen Argumentation, welche wichtige Rolle das Gitter und das Pauli-Prinzip spielen.

Rice und Ueda haben Gleichung (66b) kanonisch auf beliebige Entartung ($N^f \geq 2$) verallgemeinert und erhielten

$$q_{\ell\sigma} = \frac{1 - n^f}{1 - n_{\ell\sigma}} \quad , \quad (73)$$

wobei $1 \leq \ell \leq N^f$ gilt. Wir konnten noch nicht beweisen, daß diese Formel in $d = \infty$ exakt ist, wenn sie auch plausibel erscheint. Man erkennt jedoch an Gleichung (73), daß für hohe Entartung N^f das Pauliprinzip irrelevant wird und $q_{\ell\sigma}$ nähert sich dem Wert von $q_{\ell\sigma}^{MF} = 1 - n^f$.

Zusammenfassend können wir feststellen, daß q_σ und q_σ^{MF} zwei entgegengesetzte Extremfälle repräsentieren: (i) q_σ aus der Gutzwiller-korrelierten Rice-Ueda-Brandow Wellenfunktion wird im Rahmen des Variationsansatzes exakt für $d = \infty$; (ii) q_σ^{MF} wird exakt für hohe Entartung N^f . Offensichtlich wird durch die Einflüsse endlicher

Dimensionen und endlicher Entartung (sowie endlicher Wechselwirkungsstärke U [33]) der Renormierungsfaktor zwischen diesen beiden Extremen liegen.

Betrachten wir wieder das periodische Anderson-Modell ohne Entartung ($N^f = 1$). Der Nenner in $q_{1\sigma}$ liefert weitreichende physikalische Vorhersagen, die für das Modell aus den Ergebnissen für die Rice-Ueda-Brandow Variationswellenfunktion gezogen werden:

- a) es wird eine magnetische Instabilität für den „Kondo-Grenzfall“ ($U = \infty, n^f \simeq 1$) vorhergesagt. Bei den „Mean-Field“-Rechnungen ist der paramagnetische Zustand immer stabil. Einerseits ist es durchaus möglich, daß das periodische Anderson-Modell diese Instabilität tatsächlich zeigt, daß es sich also um kein Artefakt der Wellenfunktion handelt. Andererseits weist Fazekas [30] darauf hin, daß das Problem der ferromagnetischen Instabilität auch beim Varma-Yafet-Zustand [49] für das Anderson-Modell mit einer Verunreinigung besteht. Um den paramagnetischen Zustand zu stabilisieren, muß der Varma-Yafet-Ansatz erweitert werden (siehe Referenz [50]). Eine entsprechende Erweiterung von $|\Phi_0\rangle$ in $|\Psi_g\rangle = g^{\tilde{K}} |\Phi_0\rangle$ ist daher wahrscheinlich auch im periodischen Anderson-Modell nötig, um eine Stabilisierung des paramagnetischen Zustands zu erhalten;
- b) der sogenannte „Kondo-Exponent“ ist um einen Faktor $(1 - n^f_\sigma)$ zu klein, das heißt, man hat im Kondo-Grenzfall ($U = \infty, n^f \simeq 1$) eine *größere* Bindungsenergie pro f -Gitterplatz im Gittermodell als im Falle einer einzelnen Verunreinigung. Dies widerspricht der physikalischen Intuition, denn man erwartet eine *Abnahme* der Bindungsenergie, wenn sich die Abschirmladungen der einzelnen Verunreinigungen überlappen [30]. Es ist klar, daß dieser Effekt in $d = \infty$ nicht zu tragen kommt, weil alles nur von *lokalen* Eigenschaften der Wellenfunktion abhängt. Stattdessen bleibt nur die Erhöhung der Bindungsenergie aus dem oben erklärten Gittereffekt übrig: man hat ein System von L f -Elektronen, die sich wegen der

Hybridisierung im Gitter bewegen können, weshalb alle Blochzustände zur Hybridisierung an einem Gitterplatz zur Verfügung stehen.

Wie bereits oben erwähnt, stellt der Faktor $q_{i\sigma}$ aus Gleichung (66b) einen Extremfall dar ($U = \infty$, $d = \infty$, $N^I = 1$). Es ist bereits von Vulović und Abrahams gezeigt worden, daß Werte der Wechselwirkung $U < \infty$ die Bindungsenergie erniedrigen. Den gleichen Effekt erhält man gemäß Gleichung (73) für endliche Entartung [28,30]. Wir erwarten, daß auch die Berücksichtigung von $(1/d)$ -Korrekturen eine Verringerung der Bindungsenergie der Rice-Ueda-Brandow Variationswellenfunktion für das periodische Anderson-Modell liefert [52].

Zusammenfassend können wir festhalten, daß Gutzwiller-korrelierte Variationswellenfunktionen für das periodische Anderson-Modell durchaus geeignet sind, Grundzustandseigenschaften dieses Modells realistisch wiederzugeben. Die in $d = \infty$ exakten Ergebnisse für die Rice-Ueda-Brandow Wellenfunktion stehen nicht im Widerspruch zu den Resultaten von „Mean-Field“-Näherungen [6,45], vielmehr ergänzen sich beide Verfahren: Gutzwiller-korrelierte Wellenfunktionen betrachten den Limes hoher Gitterdimension, „Mean-Field“-Näherungen den Limes hoher Entartung. Die Verallgemeinerung unseres Formalismus auf endliche Entartung $N^I \geq 2$ steht noch aus, d. h. Gleichung (73) ist noch nicht bewiesen. Es wäre wünschenswert, wenn man alle bisher bekannten Resultate aus *ein und demselben* Zugang systematisch ableiten könnte.

4 Exakte Durchführung des Variationsverfahrens in $d = \infty$: Korrelationsfunktionen

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels führen wir die Korrelationsfunktionen ein. Diese Funktionen beschreiben, wie zwei leere, doppelt oder einfach besetzte Gitterplätze in Entfernung j miteinander korreliert sind. Zu ihrer Berechnung verwenden wir den Graphenformalismus von Gebhard und Vollhardt [13] in der allgemeineren Formulierung aus Referenz [26], wobei wir auch hier die neue Interpretation von „Linien“ und „Vertices“ gemäß der Gleichungen (12) und (14) verwenden.

Im zweiten Abschnitt untersuchen wir den Limes $d \rightarrow \infty$. Wir geben in Unterabschnitt 4.2.1 einen Satz von Gleichungen zur Berechnung von Korrelationsfunktionen für beliebige Abstände $\nu = |j|$ an (siehe Gleichung (8b) zur Definition des Abstands). Das allgemeine Gleichungssystem vereinfacht sich für Nächst-Nachbar-Korrelationsfunktionen, so daß wir diese in Unterabschnitt 4.2.2 für den allgemeinen Fall explizit angeben können. In Unterabschnitt 4.2.3 lösen wir für die translationsinvariante und spinsymmetrische Gutzwiller-Wellenfunktion das Gleichungssystem aus Unterabschnitt 4.2.1 durch Fouriertransformation und geben die explizite Form der Korrelationsfunktionen im Impulsraum (k-Darstellung) an.

4.1 Definition und allgemeiner Graphenformalismus

Korrelationsfunktionen erlauben eine anschauliche Beschreibung von räumlichen Fluktuationen des Spins (\hat{S}_i), der Dichte (\hat{N}_i) etc. in einer gegebenen Wellenfunktion. So definieren wir die Korrelationsfunktion zwischen zwei Operatoren \hat{X}_i und \hat{Y}_i allgemein als

$$C^{XY}(j) = \frac{1}{L} \sum_i \left\{ \langle \hat{X}_i \hat{Y}_{i+j} \rangle - \langle \hat{X}_i \rangle \langle \hat{Y}_{i+j} \rangle \right\}. \quad (74)$$

Da wir den Term $\langle \hat{X}_i \rangle \langle \hat{Y}_{i+j} \rangle$ in Gleichung (74) abziehen, verschwindet $C^{XY}(j)$ im allgemeinen für $|j| \rightarrow \infty$, auch wenn in der Wellenfunktion eine langreichweitige Ordnung, z. B. eine endliche Magnetisierung m , enthalten ist. Dies bedeutet insbesondere, daß $C^{XY}(j)$ für nächste Nachbarn von der Ordnung $(1/d)$, für übernächste Nachbarn von $\mathcal{O}((1/d)^2)$ etc. ist.

Da im Hubbard-Modell ein Gitterplatz leer, einfach besetzt mit einem \uparrow oder \downarrow -Elektron oder doppelt besetzt sein kann, wählen wir \hat{X}_i bzw. \hat{Y}_i als einen der folgenden lokalen Operatoren

$$\hat{S}_i^z \equiv (\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow})/2 \quad (\text{Spin in } z\text{-Richtung}), \quad (75a)$$

$$\hat{N}_i \equiv \hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow} \quad (\text{Dichte}), \quad (75b)$$

$$\hat{D}_i \equiv \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \quad (\text{Doppelbesetzung}), \quad (75c)$$

$$\hat{H}_i \equiv (1 - \hat{n}_{i\uparrow})(1 - \hat{n}_{i\downarrow}) \quad (\text{leerer Gitterplatz oder } \text{"Loch"}). \quad (75d)$$

Außerdem interessieren wir uns für die Spinflip-Korrelationsfunktion

$$C^{S^+S^-}(j) = \frac{1}{L} \sum_i (\hat{S}_i^+ \hat{S}_{i+j}^- - \langle \hat{S}_i^+ \rangle \langle \hat{S}_{i+j}^- \rangle), \quad (75e)$$

wobei $\hat{S}_i^+ \equiv \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow}$, $\hat{S}_i^- = (\hat{S}_i^+)^+$ gilt. Die Operatoren \hat{S}_i^z , \hat{S}_i^+ und \hat{S}_i^- gehorchen den Kommutatorbeziehungen für eine Spin-Algebra mit Spin $S = 1/2$ und können dazu benutzt werden, den Vektoroperator $\hat{\mathbf{S}}_i$ in der üblichen Weise zu konstruieren [47]. Falls die Spinsymmetrie in der Variationswellenfunktion gebrochen ist, liefert diese Korrelationsfunktion zusätzliche Information. Wie man leicht zeigen kann [13], sind nur sieben dieser Korrelationsfunktionen voneinander unabhängig.

Die Korrelationsfunktionen sind für die Gutzwiller-Wellenfunktion in $d = 1$ exakt berechnet worden [13]. Für höhere Dimensionen ist dies nicht einmal für die relativ einfache Gutzwiller-Wellenfunktion möglich. Mit der im 2. Kapitel entwickelten Methode

können wir für allgemeine Gutzwiller-korrelierte Wellenfunktionen exakte Aussagen im Limes hoher Dimensionen ableiten.

Im nun folgenden Formalismus können wir analog zu Referenzen [13,26] vorgehen. In Referenz [26] haben van Dongen, Gebhard und Vollhardt die Korrelationsfunktionen in der $(g^2 - 1)$ -Entwicklung für allgemeine Gutzwiller-korrelierte Variationswellenfunktionen betrachtet, wobei die zugehörigen Graphen bereits in Referenz [13] eingeführt und aufgezeichnet worden sind. Genauso wie bei der Berechnung der Einteilchen-Dichtematrix (vgl. Abschnitt 2.3) müssen wir lediglich die Interpretation der Graphen ändern, d. h. innere Vertices werden jetzt als Faktoren x_i aufgefaßt und Linien zwischen den Gitterpunkten i und j als $\tilde{F}_\sigma(i, j)$. Dann können wir die Vereinfachungen des Formalismus aus Kapitel 2 im Limes hoher Dimensionen nutzen.

Für die Korrelationsfunktionen $C^{XY}(j)$ brauchen wir den Fall $j = 0$ nicht zu betrachten, da wir sie in diesem Fall durch Gittersummen über $\langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle_0$ und \tilde{d}_i ausdrücken können. Analog zu Referenz [26] führen wir folgende Funktionen für $g \neq h$ ein:

$$\widetilde{Y}_\sigma^{(1)}(g, h) = \left\{ (n_{g\sigma} - \langle \hat{n}_{g\sigma} \rangle_0)(n_{h\sigma} - \langle \hat{n}_{h\sigma} \rangle_0) \tilde{D} \right\}_0^{FC} \quad (76a)$$

$$\widetilde{Y}_\sigma^{(2)}(g, h) = x_h \left\{ (n_{g\sigma} - \langle \hat{n}_{g\sigma} \rangle_0)(D_h - D_h^{HF}) \tilde{D} \right\}_0^{FC} \quad (76b)$$

$$\widetilde{Y}_\sigma^{(3)}(g, h) = x_g x_h \left\{ (D_g - D_g^{HF})(D_h - D_h^{HF}) \tilde{D} \right\}_0^{FC} \quad (76c)$$

$$\widetilde{Y}_\sigma^{(4)}(g, h) = \left\{ (n_{g\sigma} - \langle \hat{n}_{g\sigma} \rangle_0)(n_{h-\sigma} - \langle \hat{n}_{h-\sigma} \rangle_0) \tilde{D} \right\}_0^{FC} \quad (76d)$$

$$\widetilde{Y}_\sigma^{(5)}(g, h) = - \left\{ c_{g\downarrow}^\dagger c_{h\downarrow} c_{h\downarrow}^\dagger c_{g\downarrow} \tilde{D} \right\}_0^{FC}. \quad (76e)$$

Entsprechend der oben genannten Ersetzungsvorschrift haben wir $(g^2 - 1)$ durch x_g und $n_{g\sigma}$ durch $(n_{g\sigma} - \langle \hat{n}_{g\sigma} \rangle_0)$ ersetzt, um die neuen Linien und Vertices in der Entwicklung nach x_i zu erhalten. Das Symbol $\{\dots\}_0^{FC}$ bedeutet, daß man über alle Graphen summieren muß, die sich aus dem Wick'schen Theorem ergeben und bei denen die

äußerer Gitterpunkte g und h durch ununterbrochene Fermionlinien verbunden sind (sogenannte vollverbundene Graphen [13]). Die Graphen bis zur dritten Ordnung in x_i für $\widetilde{Y_\sigma^{(1)}}, \dots, \widetilde{Y_\sigma^{(4)}}$ sind in Referenz [13] aufgezeichnet; die Graphen für $\widetilde{Y_\sigma^{(5)}}$ können aus denen für $\widetilde{Y_\sigma^{(1)}}$ abgeleitet werden, indem man eine σ -Linie von g nach h in eine $(-\sigma)$ -line umwandelt und dabei berücksichtigt, daß an jedem inneren Vertex zwei σ - und zwei $(-\sigma)$ -Linien zusammenlaufen.

Wenden wir den allgemeinen Formalismus aus Kapitel 2 an, so erhalten wir nach einigen Umformungen folgende Ergebnisse

$$C^{S^z S^z}(j) = \frac{1}{4} \frac{1}{L} \sum_{i\sigma} [1 - x_i (1 - \langle \hat{n}_{i-\sigma} \rangle_0) \langle \hat{n}_{i-\sigma} \rangle_0] \times \\ \left\{ \left[\sum_{\sigma'} [1 - x_{i+j} (1 - \langle \hat{n}_{i+j, -\sigma'} \rangle_0) \langle \hat{n}_{i+j, -\sigma'} \rangle_0] (\sigma \sigma') \widetilde{Y_{\sigma\sigma'}^{(2)}}(i, i+j) \right] \right. \\ \left. - 4\sigma m_{i+j, 0} \widetilde{Y_\sigma^{(2)}}(i, i+j) \right\} + \frac{1}{L} \sum_i m_{i, 0} m_{i+j, 0} \widetilde{Y^{(3)}}(i, i+j) \quad (77a)$$

$$C^{NN}(j) = \frac{1}{L} \sum_{i\sigma} [1 + x_i (1 - \langle \hat{n}_{i-\sigma} \rangle_0) \langle \hat{n}_{i-\sigma} \rangle_0] \times \\ \left\{ \left[\sum_{\sigma'} [1 + x_{i+j} (1 - \langle \hat{n}_{i+j, -\sigma'} \rangle_0) \langle \hat{n}_{i+j, -\sigma'} \rangle_0] \widetilde{Y_{\sigma\sigma'}^{(2)}}(i, i+j) \right] \right. \\ \left. + 4(1 - n_{i+j, 0}) \widetilde{Y_\sigma^{(2)}}(i, i+j) \right\} + 4 \frac{1}{L} \sum_i (1 - n_{i, 0}) (1 - n_{i+j, 0}) \widetilde{Y^{(3)}}(i, i+j) \quad (77b)$$

$$C^{ND}(j) = \frac{1}{L} \sum_{i\sigma} [1 + x_{i+j} (1 - n_{i+j, 0} + \bar{d}_{i+j, 0})] \times \\ \left\{ \sum_{\sigma'} [1 + x_i (1 - \langle \hat{n}_{i-\sigma'} \rangle_0) \langle \hat{n}_{i-\sigma'} \rangle_0] \langle \hat{n}_{i+j, -\sigma'} \rangle_0 \widetilde{Y_{\sigma\sigma'}^{(2)}}(i, i+j) \right. \\ + \left[2 \langle \hat{n}_{i+j, -\sigma} \rangle_0 (1 - n_{i, 0}) + \right. \\ \left. \left. \frac{1 - x_{i+j} \bar{d}_{i+j, 0}}{x_{i+j}} (1 + x_i (1 - \langle \hat{n}_{i-\sigma} \rangle_0) \langle \hat{n}_{i-\sigma} \rangle_0) \right] \widetilde{Y_\sigma^{(2)}}(i, i+j) \right\} \\ + 2 \frac{1}{L} \sum_i (1 - n_{i, 0}) \left(\frac{1 - x_{i+j} \bar{d}_{i+j, 0}}{x_{i+j}} \right) \widetilde{Y^{(3)}}(i, i+j) \quad (77c)$$

$$\begin{aligned}
C^{DD}(j) = & \frac{1}{L} \sum_i [1 + x_i(1 - n_{i,0} + \bar{d}_{i,0})] [1 + x_{i+j}(1 - n_{i+j,0} + \bar{d}_{i+j,0})] \times \\
& \left\{ \left(\frac{1 - x_i \bar{d}_{i,0}}{x_i} \right) \left(\frac{1 - x_{i+j} \bar{d}_{i+j,0}}{x_{i+j}} \right) \widetilde{Y^{(3)}}(i, i+j) \right. \\
& + 2 \sum_{\sigma} \langle \hat{n}_{i-\sigma} \rangle_0 \left(\frac{1 - x_{i+\sigma} \bar{d}_{i+\sigma,0}}{x_{i+\sigma}} \right) \widetilde{Y_{\sigma}^{(2)}}(i, i+j) \\
& \left. + \sum_{\sigma \sigma'} \langle \hat{n}_{i-\sigma} \rangle_0 \langle \hat{n}_{i+j-\sigma'} \rangle_0 \widetilde{Y_{\sigma \sigma'}^{(1)}}(i, i+j) \right\} \quad (77d)
\end{aligned}$$

$$C^{S^+ S^-}(j) = \frac{1}{L} \sum_i \sqrt{\frac{x_i x_{i+j}}{(g^2 - 1)^2}} \widetilde{Y^{(5)}}(i, i+j) , \quad (77e)$$

wobei wir zur Abkürzung

$$\widetilde{Y_{\sigma \sigma'}^{(1)}} = \begin{cases} \widetilde{Y_{\sigma}^{(1)}} & \text{für } \sigma' = \sigma \\ \widetilde{Y_{\sigma}^{(4)}} & \text{für } \sigma' = -\sigma \end{cases} \quad (77f)$$

eingeführt haben.

Die Berechnung der Korrelationsfunktionen führt in der Tat zu etwas länglichen Ausdrücken. Die Umformungen, die auf die Gleichungen (77a)-(77e) führen, sind aber eine rein algebraische Übung und die drastischen Vereinfachungen, die sich im Limes hoher Dimensionen ergeben, erlauben dann wieder eine etwas kompaktere Darstellung.

4.2 Berechnung im Limes $d \rightarrow \infty$

Wir betrachten nun den Limes hoher Dimensionen. Dabei müssen wir zunächst einmal eine Größe finden, die im Limes $d \rightarrow \infty$ nicht verschwindet. Wie oben erwähnt, gehen die Korrelationsfunktionen zwischen zwei Gitterplätzen (z. B. dem Ursprung und dem Gitterplatz j) in diesem Limes gegen Null, da alle langreichweitigen Anteile durch den Abziehterm in der Definition bereits berücksichtigt worden sind. Brauchbare Größen für hohe Dimensionen sind dann die Korrelationsfunktionen, die über Schalen von Nachbarn



(a)



(b)

Abbildung 1: RPA-ähnliche Blasendiagramme für die Korrelationsfunktionen; a) Blase in erster Ordnung, b) Blase in zweiter Ordnung

summiert sind, d. h. es ist interessant, die Korrelationen zwischen einem Gitterplatz und allen Gitterplätzen im Abstand $\nu = |\mathbf{j}| = 1, 2, \dots$ zu betrachten (der Abstand wird in der „New-York“-Metrik gemessen, Gleichung (8b)). Wir betrachten also die für $d = \infty$ nichtverschwindende (Schalen-)Korrelationsfunktion [26]

$$C^{XY}(\nu) = \sum_{|\mathbf{j}|=\nu} C^{XY}(\mathbf{j}) \quad . \quad (78)$$

Im folgenden werden wir diejenigen Anteile in den Korrelationsfunktionen aus Abschnitt 4.1 bestimmen, die zu $C^{XY}(\nu)$ beitragen.

4.2.1 Allgemeine Behandlung

Aus dem obig Gesagten folgt unmittelbar, daß einfache, RPA-ähnliche „Blasendiagramme“ auch in $d = \infty$ berücksichtigt werden müssen (RPA = Random Phase Approximation [11]). Die einfachsten solchen Diagramme sind in Abbildung 1a und 1b dargestellt. Wenn beispielsweise \mathbf{j} Nächst-Nachbar-Vektor zu \mathbf{i} ist ($\mathbf{j} = \mathbf{i} + \boldsymbol{\tau}$), dann ergibt das erste Diagramm einen Beitrag der Ordnung $1/d$, da zwei Linien $\widetilde{P}_\sigma^0(\mathbf{i}, \mathbf{j})$ auf-

treten und $\widetilde{P}_\sigma^0(i, i + \tau) = \mathcal{O}(\sqrt{1/d})$ ist. Da aber die Zahl der nächsten Nachbarn von der Ordnung d ist, gibt dieses Diagramm einen Beitrag zu $C^{XY}(\nu)$. Analoges gilt für das zweite Diagramm, wenn i und j übernächste Nachbarn sind. Die Korrelationsfunktionen werden also keinesfalls trivial für $d = \infty$.

Allerdings ergeben sich im Limes hoher Dimensionen zwei entscheidende Vereinfachungen in unserem Formalismus:

1. Sowohl in $\widetilde{Y}_\sigma^{(2)}(g, h)$ als auch in $\widetilde{Y}^{(3)}(g, h)$ gibt es stets Anteile in den Graphen, in denen zwei Vertices durch drei oder mehr verschiedene Wege miteinander verbunden sind [13]. Daher haben wir

$$\widetilde{Y}_\sigma^{(2)}(g, h) \equiv 0 \quad (79a)$$

$$\widetilde{Y}^{(3)}(g, h) \equiv 0 \quad (79b)$$

2. In $d = \infty$ sind Linien immer durch *nicht-wechselwirkende* Einteilchen-Dichtematrizen $\widetilde{P}_\sigma^0(i, j)$ gegeben. Normalerweise hat man „angezogene Linien“ $\widetilde{P}_\sigma(i, j) = \widetilde{P}_\sigma^0(i, j) + \sum_{g, h} \widetilde{P}_\sigma^0(i, g) \widetilde{S}_\sigma(g, h) \widetilde{P}_\sigma^0(h, j)$ zu betrachten (siehe Gleichung (11a)). Im Limes $d = \infty$ gibt es in unserem Formalismus keine solche Renormierungseffekte (siehe Gleichung (40)).

Es bleiben also *nur* die RPA-Blasendiagramme übrig, die aus $\widetilde{P}_\sigma^0(i, j)$ -Linien aufgebaut sind.

Weiterhin können wir die anderen Vereinfachungen benutzen, die sich aus dem Limes ergeben (siehe z. B. Gleichung (45) für den Zusammenhang zwischen g^2 und \bar{d}_i). Verwenden wir die Definitionen $a_{i,\sigma} = (\bar{d}_i - \bar{d}_{i,0}) / ((\hat{n}_{i\sigma})_0 (1 - (\hat{n}_{i\sigma})_0))$ und $b_{i,\sigma} = ((\hat{n}_{i\sigma})_0 - \bar{d}_i) / ((\hat{n}_{i\sigma})_0 - \bar{d}_{i,0})$, so finden wir ($j \neq 0$)

$$C^{S^* S^*}(j) = \frac{1}{4} \frac{1}{L} \sum_{i\sigma\sigma'} (1 - a_{i,\sigma}) (1 - a_{i+j,\sigma'}) (\sigma\sigma') \widetilde{Y}_{\sigma\sigma'}(i, i + j) \quad (80a)$$

$$C^{NN}(\mathbf{j}) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{i}\sigma\sigma'} (1 + a_{\mathbf{i},\sigma})(1 + a_{\mathbf{i}+\mathbf{j},\sigma'}) \widetilde{Y_{\sigma\sigma'}}(\mathbf{i}, \mathbf{i} + \mathbf{j}) \quad (80b)$$

$$C^{ND}(\mathbf{j}) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{i}\sigma\sigma'} (1 + a_{\mathbf{i},\sigma}) \frac{\bar{d}_{\mathbf{i}+\mathbf{j}}}{\langle \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{j},\sigma'} \rangle_0} \widetilde{Y_{\sigma\sigma'}}(\mathbf{i}, \mathbf{i} + \mathbf{j}) \quad (80c)$$

$$C^{DD}(\mathbf{j}) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{i}\sigma\sigma'} \frac{\bar{d}_{\mathbf{i}} \bar{d}_{\mathbf{i}+\mathbf{j}}}{\langle \hat{n}_{\mathbf{i},\sigma} \rangle_0 \langle \hat{n}_{\mathbf{i}+\mathbf{j},\sigma'} \rangle_0} \widetilde{Y_{\sigma\sigma'}}(\mathbf{i}, \mathbf{i} + \mathbf{j}) \quad (80d)$$

$$C^{S^+S^-}(\mathbf{j}) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{i}} \sqrt{b_{\mathbf{i},\sigma} b_{\mathbf{i},-\sigma} b_{\mathbf{i}+\mathbf{j},\sigma} b_{\mathbf{i}+\mathbf{j},-\sigma}} \widetilde{Y^{(5)}}(\mathbf{i}, \mathbf{i} + \mathbf{j}) \quad . \quad (80e)$$

Die allgemeinen Gleichungen für $\widetilde{Y_{\sigma}^{(1)}}(\mathbf{g}, \mathbf{h})$, $\widetilde{Y_{\sigma}^{(4)}}(\mathbf{g}, \mathbf{h})$ und $\widetilde{Y^{(5)}}(\mathbf{g}, \mathbf{h})$ erhält man aus der Aufsummation von (nichtwechselwirkenden) Blasendiagrammen. Sie lauten

$$\begin{aligned} \widetilde{Y_{\sigma}^{(1)}}(\mathbf{g}, \mathbf{h}) &= - [\widetilde{P_{\sigma}^0}(\mathbf{g}, \mathbf{h})]^2 \\ &+ \sum_{\mathbf{l}\mathbf{m}} x_{\mathbf{l}} x_{\mathbf{m}} [\widetilde{P_{\sigma}^0}(\mathbf{g}, \mathbf{l})]^2 \widetilde{Y_{-\sigma}^{(1)}}(\mathbf{l}, \mathbf{m}) [\widetilde{P_{\sigma}^0}(\mathbf{m}, \mathbf{h})]^2 \end{aligned} \quad (81a)$$

$$\begin{aligned} \widetilde{Y_{\sigma}^{(4)}}(\mathbf{g}, \mathbf{h}) &= \sum_{\mathbf{l}} x_{\mathbf{l}} [\widetilde{P_{\sigma}^0}(\mathbf{g}, \mathbf{l})]^2 [\widetilde{P_{-\sigma}^0}(\mathbf{l}, \mathbf{h})]^2 \\ &+ \sum_{\mathbf{l}\mathbf{m}} x_{\mathbf{l}} x_{\mathbf{m}} [\widetilde{P_{\sigma}^0}(\mathbf{g}, \mathbf{l})]^2 \widetilde{Y_{-\sigma}^{(4)}}(\mathbf{l}, \mathbf{m}) [\widetilde{P_{-\sigma}^0}(\mathbf{m}, \mathbf{h})]^2 \end{aligned} \quad (81b)$$

$$\begin{aligned} \widetilde{Y^{(5)}}(\mathbf{g}, \mathbf{h}) &= - [\widetilde{P_{\sigma}^0}(\mathbf{g}, \mathbf{h})] [\widetilde{P_{-\sigma}^0}(\mathbf{g}, \mathbf{h})] \\ &+ \sum_{\mathbf{l}} x_{\mathbf{l}} [\widetilde{P_{\sigma}^0}(\mathbf{g}, \mathbf{l})] [\widetilde{P_{-\sigma}^0}(\mathbf{g}, \mathbf{l})] \widetilde{Y^{(5)}}(\mathbf{l}, \mathbf{h}) \quad . \end{aligned} \quad (81c)$$

Die Auswertung dieser Gleichungen ist für allgemeines $\widetilde{P_{\sigma}^0}(\mathbf{i}, \mathbf{j})$ und beliebige Abstände $|\mathbf{j}| = \nu$ nicht möglich.

Es gibt aber Fälle, in denen weitere Vereinfachungen möglich sind. Zwei davon werden in den folgenden Unterabschnitten behandelt, nämlich die allgemeinen Nächst-Nachbar-Korrelationsfunktionen ($|\mathbf{j}| = 1$) in Unterabschnitt 4.2.2 und die translationsinvariante, paramagnetische Gutzwiller-Wellenfunktion in Unterabschnitt 4.2.3.

4.2.2 Allgemeine Nächst-Nachbar Korrelationsfunktionen

Im Fall $j = \tau$ ($\nu = 1$) brauchen wir nur die Blase in erster Ordnung (Abb. 1a) zu betrachten, um den führenden Beitrag für $C^{XY}(\nu)$ zu erhalten. Während die erste Blase von Ordnung $1/d$ ist (siehe oben), liefert die Blase in zweiter Ordnung (Abb. 1b) bereits einen Beitrag in Ordnung $(1/d)^2$. Man erhält nämlich den führenden Beitrag des Graphen, wenn der innere Vertex g nächster Nachbar zu i oder $i + \tau$ ist. Die liefert $2(2d - 1)$ Beiträge der Ordnung $(1/d) \times (1/d)^2$, da g einmal nächster Nachbar und einmal übernächster Nachbar zu i bzw. zu $i + \tau$ ist. Der Gesamtbeitrag ist daher von Ordnung $\mathcal{O}(d \times (1/d) \times (1/d)^2) = \mathcal{O}((1/d)^2)$.

Daher sind in $d = \infty$ die Nächst-Nachbar-Korrelationsfunktionen $C^{XY}(\nu = 1)$ leicht allgemein zu berechnen. Das asymptotische Verhalten für große Abstände ν ist selbst im Limes hoher Dimensionen nicht leicht zu bestimmen. Wir werden diesen Punkt in Unterabschnitt 4.2.3 im Zusammenhang mit der Gutzwiller Wellenfunktion noch näher diskutieren (siehe auch Referenz [26]).

Berücksichtigen wir nur die Blase in erster Ordnung, so finden wir $\widetilde{Y_{\sigma\sigma'}}(i, i + \tau) = -\delta_{\sigma\sigma'} [\widetilde{P_\sigma^0}(i, i + \tau)]^2$ und $\widetilde{Y^{(s)}(i, i + \tau)} = -[\widetilde{P_\sigma^0}(i, i + \tau)] [\widetilde{P_{\sigma'}^0}(i, i + \tau)]$. Es ist wichtig, die Nächst-Nachbar-Korrelationsfunktionen für allgemeines $|\Phi_0\rangle$ berechnen zu können, weil diese Größen die Grundzustandsenergie von Hamilton-Operatoren mit Nächst-Nachbar-Wechselwirkung bestimmen (z. B. beim Heisenberg- oder t-J-Modell, siehe Kapitel 8). In Gleichungen (80a)-(80e) eingesetzt erhalten wir

$$C^{S^z S^z}(\tau) = -\frac{1}{4} \frac{1}{L} \sum_{i\sigma} (1 - a_{i,\sigma}) (1 - a_{i+\tau,\sigma}) [\widetilde{P_\sigma^0}(i, i + \tau)]^2 \quad (82a)$$

$$C^{NN}(\tau) = -\frac{1}{L} \sum_{i\sigma} (1 + a_{i,\sigma}) (1 + a_{i+\tau,\sigma}) [\widetilde{P_\sigma^0}(i, i + \tau)]^2 \quad (82b)$$

$$C^{ND}(\tau) = -\frac{1}{L} \sum_{i\sigma} (1 + a_{i,\sigma}) \frac{\tilde{d}_{i+\tau}}{(\hat{n}_{i+\tau,\sigma})_0} [\widetilde{P_\sigma^0}(i, i + \tau)]^2 \quad (82c)$$

$$C^{DD}(\tau) = -\frac{1}{L} \sum_{i\sigma} \frac{\bar{d}_i \bar{d}_{i+\tau}}{\langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle_0 \langle \hat{n}_{i+\tau,\sigma} \rangle_0} \left[\widetilde{P}_\sigma^0(i, i+\tau) \right]^2 \quad (82d)$$

$$C^{S^+S^-}(\tau) = -\frac{1}{L} \sum_i \sqrt{b_{i,\sigma} b_{i,-\sigma} b_{i+\tau,\sigma} b_{i+\tau,-\sigma}} \left[\widetilde{P}_\sigma^0(i, i+\tau) \right] \left[\widetilde{P}_{-\sigma}^0(i, i+\tau) \right]. \quad (82e)$$

Als einfache Spezialfälle betrachten wir nun die paramagnetische Gutzwiller-Wellenfunktion und die in Unterabschnitt 3.1.2 eingeführte Gutzwiller-korrelierte antiferromagnetische Spindichtewelle.

Im Falle der translationsinvarianten und spinsymmetrischen Gutzwiller-Wellenfunktion erhalten wir alle Ergebnisse, die in Referenzen [26,27] im Rahmen der $(g^2 - 1)$ -Entwicklung abgeleitet wurden. Dort wurde bereits gezeigt, daß

$$C^{XY}(\tau, g, n) = g_{XY} C^{XY}(\tau, g = 1, n) \quad (83)$$

gilt, wobei die Korrelationsfaktoren

$$g_{S^+S^-} = \left(\frac{n - 2\bar{d}}{n - 2\bar{d}_0} \right)^2 = g_{S^+S^-} \quad (84a)$$

$$g_{NN} = \left(\frac{n(1-n) + 2\bar{d}}{n(1-n) + 2\bar{d}_0} \right)^2 \quad (84b)$$

$$g_{ND} = \left(\frac{\bar{d}}{\bar{d}_0} \right) \left(\frac{n(1-n) + 2\bar{d}}{n(1-n) + 2\bar{d}_0} \right) \quad (84c)$$

$$g_{DD} = \left(\frac{\bar{d}}{\bar{d}_0} \right)^2 \quad (84d)$$

lauten. Ein so einfacher Zusammenhang zwischen den Korrelationsfunktionen mit und ohne Wechselwirkung wie in Gleichung (83) kann nur für nächste Nachbarn gelten, während für beliebige Abstände $\nu \neq 1$ keine direkte Proportionalität zwischen $C^{XY}(\nu, g, n)$ und $C^{XY}(\nu, g = 1, n)$ besteht. Grund dafür ist [26], daß beispielsweise die Korrelationsfunktionen für übernächste Nachbarn ($\nu = 2$) im wechselwirkenden Fall auch Information über die Korrelationen zwischen den nächsten Nachbarn ($\nu = 1$)

enthalten, da sowohl das Diagramm aus Abbildung 1a als auch das Diagramm aus Abbildung 1b zu $C^{XY}(\nu = 2, g, n)$ beitragen. Das erste Diagramm trägt bei, wenn i und j überschneidende Nachbarn sind, es enthält also Informationen über die Korrelationsfunktionen im nicht-wechselwirkenden System im Abstand $\nu = 2$. Das zweite Diagramm trägt bei, wenn i und g bzw. g und j nächste Nachbarn sind. Es enthält daher Informationen über die Korrelationsfunktionen im nicht-wechselwirkenden System im Abstand $\nu = 1$. Somit tragen sowohl $C^{XY}(\nu = 2, g = 1, n)$ als auch $C^{XY}(\nu = 1, g = 1, n)$ zu $C^{XY}(\nu = 2, g, n)$ bei.

Für die Gutzwiller-korrierte antiferromagnetische Spindichtewelle ist die Spinsymmetrie gebrochen und die Translationssymmetrie gilt nur mehr auf den A - und B -Untergittern separat. Da für nächste Nachbarn stets i auf dem A - und $i + \tau$ auf dem B -Untergitter (oder umgekehrt) liegen, gilt Gleichung (83) weiter. Da wir aber eine endliche Untergittermagnetisierung haben, lauten die Korrelationsfaktoren in diesem Fall ($n \neq m$)

$$g_{S^z S^z} = 4 \frac{(n - 2\bar{d} - m^2)^2 - (1 - n)^2 m^2}{(n^2 - m^2) [(2 - n)^2 - m^2]} \quad (85a)$$

$$g_{S^z S^+} = 4 \frac{(n - 2\bar{d})^2 - m^2}{(n^2 - m^2) [(2 - n)^2 - m^2]} \quad (85b)$$

$$g_{NN} = 4 \frac{(n - n^2 + 2\bar{d})^2 - m^2 (1 - n)^2}{(n^2 - m^2) [(2 - n)^2 - m^2]} \quad (85c)$$

$$g_{ND} = 8 \frac{\bar{d} [(2 - n) (n - n^2 + 2\bar{d})]}{n (n^2 - m^2) [(2 - n)^2 - m^2]} \quad (85d)$$

$$g_{DD} = \left(\frac{\bar{d}}{d_0} \right)^2 \quad . \quad (85e)$$

Folgende drei Punkte sind für die spätere Diskussion von Näherungsverfahren in Kapi-

tel 5 und die Ableitung neuer Variationswellenfunktionen in Kapitel 8 wichtig:

- (i) wegen der gebrochenen Spinsymmetrie gilt im allgemeinen $g_{S^z S^z} \neq g_{S^z S^-}$. Es dürfte auch schwierig sein, die Form der Faktoren durch ein Näherungsverfahren abzuleiten;
- (ii) es gibt Verstärkungsfaktoren nur für die in Gleichung (74) definierten Korrelationsfunktionen, für Größen also, bei denen der Anteil der langreichweiten Ordnung abgezogen wird. So gilt in unserem Beispiel

$$\frac{1}{L} \sum_i \langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+\tau} \rangle = -\frac{m^2}{4} + g_{S^z S^z} C^{S^z S^z}(\tau, g=1, n) + g_{S^z S^-} C^{S^z S^-}(\tau, g=1, n), \quad (86)$$

d. h. wir haben den Anteil $\langle \hat{S}_i^z \rangle \langle \hat{S}_{i+\tau}^z \rangle = -m^2/4$ der Untergittermagnetisierung mitzuberücksichtigen, wenn wir Erwartungswerte von Hamiltonoperatoren für Spinmodelle berechnen wollen. Eine Ausnahme bilden offensichtlich nur solche Fälle, in denen $\langle \hat{S}_i^z \rangle \equiv 0$ gilt;

- (iii) der Term $-m^2/4$ in Gleichung (86) ist von der Größenordnung $\mathcal{O}(1)$ und hat selbst eine $(1/d)$ -Korrektur (siehe Gleichung (38)).

Es ist aus den drei genannten Gründen keine einfache Aufgabe, den Erwartungswert $(1/L) \sum_i \langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+\tau} \rangle$ bis zur Ordnung $(1/d)$ zu berechnen. Wir werden dieses Problem in Kapitel 8 angehen.

4.2.3 Ergebnisse für die paramagnetische Gutzwiller-Wellenfunktion

Für die Gutzwiller Wellenfunktion können wir Translations- und Spinsymmetrie ausnutzen, um die Gleichungen (81a)-(81c) zu lösen. Wir bezeichnen die Fouriertransformierten der Korrelationsfunktionen $C^{XY}(j)$ mit $C^{XY}(q) = \sum_j e^{iqj} C^{XY}(j)$. Wegen der Spinsymmetrie gilt $C^{S^z S^z}(q) = 2C^{S^z S^z}(q)$.

Um die Fouriertransformation ausführen zu können, brauchen wir auch den Wert der Korrelationsfunktionen am Ort $j = 0$, den wir in unseren bisherigen Betrachtungen ausgeklammert hatten. Da der Wert am Ursprung lediglich als Konstante in die Fouriertransformierten eingeht, können wir $C^{XY}(q)$ eindeutig dadurch bestimmen, daß wir den Wert der Funktion für ein beliebiges q angeben. Hierzu bietet sich der Vektor $q = 0$ an, da $C^{XY}(q = 0) = \sum_j C^{XY}(j) = (1/L) [\langle \hat{X} \hat{Y} \rangle - \langle \hat{X} \rangle \langle \hat{Y} \rangle]$ gilt, d. h. $C^{XY}(q = 0)$ gibt die Korrelation der über alle Gitterplätze summierten Operatoren $\hat{X} = \sum_i \hat{X}_i$ und $\hat{Y} = \sum_i \hat{Y}_i$ an. Wegen Teilchenzahl- und Spinerhaltung gilt $C^{S^* S^*}(q = 0) = C^{NN}(q = 0) = C^{ND}(q = 0) = 0$. Die Zahl der Doppelbesetzungen ist nicht erhalten. Wie man sich aber leicht überlegt, kann man die Varianz der Doppelbesetzung $\langle \hat{D}^2 \rangle - \langle \hat{D} \rangle^2$ leicht aus der mittleren Doppelbesetzung selbst gewinnen. Man erhält $C^{DD}(q = 0) = (g/2) (\partial \bar{d} / \partial g) \equiv p$. Somit kennen wir alle Korrelationsfunktionen an einem bestimmten q -Wert.

Wir bezeichnen die Fouriertransformierte von $[\widehat{P}_g^0(i, j)]^2$ mit $\Delta \Pi_0(q)$. Die nicht-wechselwirkende Korrelationsfunktion berechnet sich damit zu $C_0(q, n) = n(1 - n/2) - 2\Delta \Pi_0(q) = C^{NN}(q, g = 1, n) = 4C^{S^* S^*}(q, g = 1, n)$.

Die Gleichungen (81a)-(81c) sind damit leicht zu lösen. Man erhält

$$\widetilde{Y_g^{(1)}}(q) = \frac{-[\Delta \Pi_0(q)]}{1 - x^2 [\Delta \Pi_0(q)]^2} \quad (87a)$$

$$\widetilde{Y_g^{(4)}}(q) = \frac{x [\Delta \Pi_0(q)]^2}{1 - x^2 [\Delta \Pi_0(q)]^2} \quad , \quad (87b)$$

wobei $x = (\bar{d} - \bar{d}_0) / (\bar{d}_0(1 - n + \bar{d}_0))$ und $\bar{d}_0 = \bar{d}(g = 1, n) = (n/2)^2$ gelten. Setzen wir dies in Gleichung (80a)-(80d) ein, so erhalten wir

$$C^{S^* S^*}(q, g, n) = \frac{1}{4} \frac{C_0(q, n)}{1 - V_S C_0(q, n)}, \quad V_S = \frac{1}{n - 2\bar{d}_0} - \frac{1}{n - 2\bar{d}} \quad (88a)$$

$$C^{NN}(q, g, n) = \frac{C_0(q, n)}{1 + V_N C_0(q, n)}, \quad V_N = \frac{1}{n(1 - n) + 2\bar{d}} - \frac{1}{n(1 - n) + 2\bar{d}_0} \quad (88b)$$

$$C^{ND}(\mathbf{q}, g, n) = q_D C^{NN}(\mathbf{q}, g, n), \quad q_D = \frac{(2-n)\bar{d}}{n(1-n) + 2\bar{d}} \quad (88c)$$

$$C^{DD}(\mathbf{q}, g, n) = p + q_D^2 C^{NN}(\mathbf{q}, g, n) \quad . \quad (88d)$$

Diese Gleichungen für die translations- und spininvariante Gutzwiller-Wellenfunktion lassen sich auch mit einer Verallgemeinerung der Methode von Metzner und Vollhardt ableiten. Wir erhalten völlige Übereinstimmung mit den Resultaten in [26,27].

In $d = \infty$ haben die Korrelationsfunktionen eine Gestalt, die von der RPA-Näherung her bekannt ist [11]. Dies führt von der Aufsummation von Blasendiagrammen her, die als einzige Diagrammklassse in $d = \infty$ übrigbleibt. Die Größen V_S und V_N entsprechen renormierten Kopplungskonstanten, die durch die neuen, für $d = \infty$ kanonischen Vertices $x_i = x$ ins Spiel kommen. Eine ähnliche Struktur dürfte sich auch für die exakten Korrelationsfunktionen im Hubbard-Modell in $d = \infty$ ergeben [26], wobei aber die Kopplungskonstanten frequenzabhängig werden.

Im atomaren Limes ($\bar{d} = 0$) und für halbvolles Band ($n = 1$) verschwinden C^{NN} , C^{ND} und C^{DD} , während für die Spin-Spin-Korrelationsfunktion gilt

$$C^{S^*S^*}(\mathbf{q}, g = 0, n = 1) = \frac{1}{4} \left[\frac{2}{1 + 4\Delta\Pi_0(\mathbf{q}, 1)} - 1 \right] \quad . \quad (89)$$

Bei $\mathbf{q} = \mathbf{Q} = (\pi, \dots, \pi)$, also gerade beim halben reziproken Gittervektor, dessen Größe gerade $2k_F$ entspricht, divergiert $C^{S^*S^*}(\mathbf{q})$. Diese Divergenz deutet auf eine antiferromagnetische Instabilität hin.

Die Gleichungen (80a) und (81) (oder Gleichung (88a)) können auch dazu benutzt werden, das Verhalten der Korrelationsfunktionen für große Abstände zu berechnen [26]. Wir wollen diese nicht ganz einfache Analyse der Gleichungen nicht wiedergeben, sondern auf die Ergebnisse eingehen. Für die Gutzwiller-Wellenfunktion zeigt sich, daß die

Spin-Spin-Korrelationsfunktion für halbvolles Band in $d = \infty$ folgendes asymptotisches Verhalten hat:

$$C_{\nu}^{S^z S^z} = (-1)^{\nu} \frac{1}{(2\pi^3)^{1/2} g^2} \frac{1}{\nu^{3/2}} \quad 1 \ll g^{-2} \ll \nu \quad (90a)$$

für Abstände, die groß gegen $1/g^2$ sind, und

$$C_{\nu}^{S^z S^z} = (-1)^{\nu} \left(\frac{\pi}{2\nu} \right)^{1/2} \quad 1 \ll \nu \ll g^{-2} \quad (90b)$$

für Abstände, die klein gegen $1/g^2$ sind. Das Verhalten für große ν ist also unterschiedlich für $\nu \gg g^{-2}$ bzw. $\nu \ll g^{-2}$, d. h. $1/g^2$ ist die relevante Längenskala. Für die Gutzwiller-Wellenfunktion ist also eine Analyse der Korrelationsfunktionen für große Abstände möglich.

Darüber hinaus kann man aus dieser Untersuchung noch eine Schlußfolgerung über die Existenz des Brinkman-Rice Lokalisierungsübergangs [7] ziehen. Im Rahmen der paramagnetischen Gutzwiller-Variationswellenfunktion im halbvollen Band erhält man in $d = \infty$ als Grundzustandsenergie für das Hubbard-Modell: $E(U \geq U_c, n = 1) = 0$, d. h. alle Teilchen sind ab einer Wechselwirkungsstärke U_c lokalisiert (Brinkman-Rice Übergang). Dieser Übergang wurde als Beispiel für einen durch Elektron-Elektron-Wechselwirkung induzierten Metall-Isolator-Übergang angegeben [4]. Bedingung für die Existenz des Übergangs ist, daß die mittlere Doppelbesetzung für kleine Werte von g linear verschwindet, d. h. $\bar{d}(g, n = 1) \sim g$ für $g \ll 1$. Da die Spin-Spin-Korrelationsfunktion mit der mittleren Doppelbesetzung über die Gleichung

$$C^{S^z S^z}(\mathbf{Q}, g) = 1 + 2(1 - g^2) \frac{\bar{d}}{g^2} \quad (91)$$

zusammenhängt [13,26], ist es möglich, Aussagen über $\bar{d}(g, n = 1)$ aus der Kenntnis der Korrelationsfunktionen zu gewinnen. Wie in Referenz [26] gezeigt wird, ist es mit Hilfe

von Skalenargumenten und weiteren begründbaren Annahmen möglich, aus dem Verhalten der Korrelationsfunktionen in $d = 1$ [13] und $d = \infty$ [26] darauf zu schließen, daß $\bar{d}(g, n = 1)$ in allen endlichen Dimensionen schneller als linear gegen Null geht. Es gibt also starke Evidenz dafür, daß es *keinen* Brinkman-Rice-Übergang in allen *endlichen* Dimensionen gibt. Wir werden auf diese Problematik noch einmal im Zusammenhang mit der $(1/d)$ -Entwicklung für die Gutzwiller-Wellenfunktion in Kapitel 8 eingehen.

5 Vergleich mit Näherungsverfahren

In diesem Kapitel werden wir die in Kapitel 3 und 4 gewonnenen, in hohen Dimensionen exakten Ergebnisse mit den Resultaten von Näherungsverfahren vergleichen. Unter Näherungsverfahren seien dabei Methoden verstanden, für die man a priori keinen Grenzfall angeben kann, in dem die verwendete Näherung exakt wird.

Im ersten Abschnitt beschäftigen wir uns mit erweiterten Gutzwiller-ähnlichen Näherungen, die eine Fortentwicklung der Gutzwiller-Approximation darstellen [28-33,36,53-59]. Im zweiten Abschnitt behandeln wir die von Kotliar und Ruckenstein [34] eingeführte „Slave-Boson“-Pfadintegral Methode für das Hubbard-Modell, die von anderen Gruppen verwendet [60] und weiterentwickelt wurde [61-63].

5.1 Erweiterte Gutzwiller-Approximationen

Um die Grundzustandsenergie der Gutzwiller Wellenfunktion im Hubbard-Modell zu berechnen, hat Gutzwiller [2] ein Näherungsverfahren eingeführt, die sogenannte „Gutzwiller-Approximation“ für die Gutzwiller-Wellenfunktion. Zwar wurde das Verständnis für diese Näherung später vertieft [8,53], eine *systematische* Ableitung und die Verallgemeinerung auf kompliziertere Gutzwiller-korrelierte Variationswellenfunktionen blieb aber ein offenes Problem. Wie als erstes von Metzner und Vollhardt [20,25] gezeigt wurde, ist die Gutzwiller-Approximation für die Gutzwiller-Wellenfunktion *exakt* in $d = \infty$. Demzufolge eröffnete sich ein neuer Zugang, die Gutzwiller-korrelierten Variationswellenfunktionen systematisch zu behandeln und die bisherigen (unkontrollierten) Näherungen in ihrer Bedeutung einzuordnen.

Es gibt im Prinzip zwei unterschiedliche Näherungsschemata, die sich im Laufe der Zeit herausgebildet haben: (i) das „Abzähl-Versfahren“, das als „renormalized mean

field approach“ insbesondere von Rice und Ueda [28] und Zhang et al. [36] propagiert wird; hierbei wird im wesentlichen mit dem Gutzwiller-Korrelator argumentiert, ohne daß wirklich mit korrelierten Wellenfunktionen gerechnet wird; (ii) eine genäherte Auswertung von Erwartungswerten für eine gegebene Gutzwiller-korrelierte Variationswellenfunktion. In älteren Veröffentlichungen (z. B. in Referenz [53]) ist es nicht möglich, diese beiden Vorgehensweisen strikt auseinanderzuhalten. Deswegen werden wir keine gesonderte Behandlung der beiden Näherungsmethoden vornehmen. Stattdessen werden wir die Trennung analog zu Kapitel 3 in Methoden für das Hubbard- bzw. das periodische Anderson-Modell vornehmen.

5.1.1 Hubbard-Modell

Zur Beschreibung von Antiferromagnetismus mit Hilfe einer Variationswellenfunktion $|\Psi_g\rangle$ war es nötig, die Gutzwiller-Approximation für Wellenfunktionen mit gebrochener Translationssymmetrie zu verallgemeinern. Wie bereits von Metzner und Vollhardt gezeigt worden ist [20,25], konnte *keiner* der früheren Versuche das exakte Ergebnis in $d = \infty$ für die optimale Gutzwiller-korrelierte Spindichtewelle liefern (siehe Unterabschnitt 3.1.2). In allen Näherungsverfahren gibt es eine *ad hoc* Annahme über die Struktur der \tilde{u}_k , \tilde{v}_k [53-57], die $|\Phi_0\rangle$ in $|\Psi_g\rangle = g^K |\Phi_0\rangle$ definieren (siehe Gleichung (48a)). Demzufolge arbeiteten sie nur innerhalb einer beschränkten Unterklasse von Variationswellenfunktionen, zu der die optimale Variationswellenfunktion in $d = \infty$ nicht gehört. Diese Methoden sind deshalb in ihrer physikalischen Aussagekraft beschränkt. Abgesehen davon führen die verwendeten Approximationen auch teilweise auf unsinnige physikalische Aussagen. Zum Beispiel erhält man Impulsverteilungen $\langle \hat{n}_{k\sigma} \rangle$, die für bestimmte \mathbf{k} -Werte negativ werden [53]. Das bedeutet, daß man nicht einmal für diese beschränkte Klasse von Variationswellenfunktionen eine Gutzwiller-artige Approxima-

tion entwickeln konnte, die in $d = \infty$ exakt wird [25].

Ogawa, Kanda und Matsubara [53] gelang es immerhin, einen Ausdruck für die Grundzustandsenergie anzugeben, der die gleiche Struktur wie das exakte Ergebnis in $d = \infty$, Gleichung (49a), hat. Sie erhielten allerdings einen Faktor q_{OKM} , der z. B. im Limes $U = \infty$ ($\bar{d} = 0$) den Wert $q_{OKM}(m, \bar{d} = 0) = [2n(1 - n)]/(2n - n^2 + m^2)$ hat. Der Faktor q_{OKM} unterscheidet sich für alle $m \neq 0$ vom exakten q -Faktor. Zudem wurde von Metzner und Vollhardt [20,25] gezeigt, daß eine Gleichung wie (49a) innerhalb einer beschränkten Klasse von Variationswellenfunktionen in $d = \infty$ gar nicht abgeleitet werden kann. Diese Art von Näherungen können also nicht systematisch eingeordnet werden.

Neben der genäherten Auswertung von vorgegebenen Variationsansätzen gibt es außerdem den Gutzwiller-artigen „renormalized mean field approach“ [36], bei dem Zhang et al. die Struktur der Gleichung (49a) voraussetzen und dann q_{OKM} durch „Abzähl“-Argumente ableiten (siehe Referenz [8] für Details bezüglich des Abzählverfahrens für die Gutzwiller-Wellenfunktion). Weil q_{OKM} nicht mit dem exakten q -Faktor in Gleichung (49b) übereinstimmt, erhält man im allgemeinen nicht die richtigen q -Faktoren aus dem Abzählverfahren. Außerdem muß die Gültigkeit der Gleichung (49a) angenommen werden. Das führt dazu, daß man gar nicht weiß, welche Gutzwiller-korrelierte Variationswellenfunktion nun eigentlich zu dem Ergebnis gehören soll. Tatsächlich ist es sogar so, daß die Abzählmethoden Ergebnisse erhalten, die für $|\Psi_g\rangle$ in der Form $|\Psi_g\rangle = g^{\bar{K}} |\Phi_0\rangle$, Gleichung (20), gültig sind. Andererseits wird suggeriert, daß man mit $|\Psi_g\rangle = g^{\bar{D}} |\Phi_0\rangle$ rechnet. Das bedeutet, daß der Vergleich von numerischen Daten mit den Ergebnissen aus dem „renormalized mean field approach“ [36] gar nicht sinnvoll ist, weil man in Wirklichkeit *verschiedene* Wellenfunktionen miteinander vergleicht. Wir werden uns diesem Problem noch einmal in Kapitel 8 widmen. Dort

leiten wir neue Variationswellenfunktionen ab, die in hohen Dimensionen optimiert sind und jetzt in niedrigen Dimensionen numerisch getestet werden können.

Der Zugang in Referenz [36] wurde ebenfalls angewendet, um die Nächst-Nachbar-Spinkorrelationsfunktion für den antiferromagnetischen Fall zu berechnen. Mit Hilfe der Abzählmethode erhielten Zhang et al. folgendes Ergebnis im Grenzfall $\overline{d} = 0$

$$\langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+\tau} \rangle = c \langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+\tau} \rangle_0 \quad (92a)$$

$$c = \left[\frac{2n}{2n - n^2 + m^2} \right]^2. \quad (92b)$$

Im Fall der Gutzwiller-Wellenfunktion gilt $m = 0$ und $\langle \hat{S}_i \rangle = 0$, so daß die Gleichungen (85a), (85b) und (92b) übereinstimmen. Daher ist das Ergebnis (92a) für die Gutzwiller-Wellenfunktion bis zur Ordnung $(1/d)$ richtig. Wie in Referenz [36] gezeigt wurde, vergleicht sich dieses Resultat sehr gut mit numerischen Daten für die Gutzwiller-Wellenfunktion.

Andererseits kann Gleichung (92a) für $m \neq 0$ auch in hohen Dimensionen nicht exakt werden. Dies ist aus Gleichung (86) ersichtlich, in der die linke Seite von Gleichung (92a) lautet

$$\langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+\tau} \rangle = (-m^2/4) + g_{S^+S^+} C^{S^+S^+}(\tau, g = 1, n) + g_{S^+S^-} C^{S^+S^-}(\tau, g = 1, n). \quad (93)$$

Gleichungen (92a) und (92b) können daher aus folgenden Gründen *nicht* richtig sein:

- (i) es gibt verschiedene Verstärkungsfaktoren $g_{S^+S^+} \neq g_{S^+S^-}$ wegen der gebrochenen Spinsymmetrie (beide Faktoren aus den Gleichungen (85a), (85b) unterscheiden sich von c in Gleichung (92b)),
- (ii) es gibt keinen Verstärkungsfaktor für den Anteil $(-m^2/4)$, der von der langreichweiten antiferromagnetischen Ordnung herrührt,

- (iii) der Term $(-m^2/4)$ ist von der Größenordnung $\mathcal{O}(1)$ und hat eine nichttriviale $(1/d)$ -Korrektur. Solch eine Korrektur kann nicht „abgezählt“ werden. Wir werden sie in Kapitel 8 berechnen.

Zusammenfassend kann man feststellen, daß eine systematische Verallgemeinerung der Gutzwiller-Approximation auf kompliziertere Probleme als die translationsinvariante Gutzwiller-Wellenfunktion nicht befriedigend gelungen ist. Zudem geben diese Methoden keinen Hinweis, wie sie systematisch verbessert werden könnten. Diese Fragestellungen können jetzt mit dem $d = \infty$ -Konzept [20,25] systematisch angegangen werden.

5.1.2 Periodisches Anderson-Modell

Die in Kapitel 3.2 eingeführte Rice-Ueda-Brandow Variationswellenfunktion wurde von verschiedenen Gruppen mit Hilfe Gutzwiller-ähnlicher Näherungen untersucht [28-33]. Der Variationsansatz kann nicht nur für das periodische Anderson-Modell untersucht werden, sondern auf beliebige Zweibandmodelle, z. B. auf das Emery-Modell [51], angewendet werden [58,59].

Diese Variationswellenfunktion ist translationsinvariant, aber die Zahl der f -Elektronen ist keine Erhaltungsgröße wie im Fall der Gutzwiller-Wellenfunktion (siehe Unterabschnitt 3.2.1). Ein Vergleich der Ergebnisse dieser Arbeiten mit den Formeln in Unterabschnitt 3.2.3 zeigt, daß diese Näherungsverfahren in der Lage sind, die *exakten* Ergebnisse in $d = \infty$ richtig wiederzugeben. Dies trifft sowohl auf die „Abzähl“-Näherungen [28] wie auch auf die approximative Auswertungen der Variationswellenfunktion [30,33] zu. In manchen Fällen [29,32] wurde die variable f -Teilchenzahl aber nicht richtig berücksichtigt. Die weitestgehende (und in $d = \infty$ exakte) Darstellung und Diskussion der Ergebnisse für die Rice-Ueda-Brandow Variationswellenfunktion haben Vulović und Abrahams in Referenz [33] gegeben. Der Beweis, daß deren Formeln in

$d = \infty$ exakt werden, gelingt auch mit einer kanonischen Erweiterung der Methode von Metzner und Vollhardt [27].

Erst kürzlich wurde das Emery-Modell [51] von Oleś und Zaanen [58] mit Hilfe der „Abzähl“-Näherung untersucht, wobei sie die Rice-Ueda-Brandow Wellenfunktion verallgemeinert und speziell den Fall von Antiferromagnetismus im Emery-Modell untersucht haben. Da wir in Unterabschnitt 3.2.2 die exakten Ergebnisse in $d = \infty$ für allgemeines $|\Psi_g\rangle$ angegeben haben, können wir deren Resultat für die Grundzustandenergie auf seine Gültigkeit in hohen Dimensionen prüfen. Es zeigt sich, daß Oleś und Zaanen den in $d = \infty$ exakten Ausdruck für $\langle\Psi_g| \hat{H}_{\text{Emery}} |\Psi_g\rangle / \langle\Psi_g| \Psi_g\rangle$ mit dem in $d = \infty$ optimalen $|\Psi_g\rangle$ gefunden haben. Wie im Falle des Hubbard-Modells kann jedoch auch hier nicht die richtige Wellenfunktion zugeordnet werden. Obwohl sie die exakten Resultate in $d = \infty$ finden, erlaubt ihre Näherung nicht, diejenige Wellenfunktion zu identifizieren, die diese Ergebnisse liefert. Während sie ihre Ergebnisse der korrelierten Wellenfunktion $|\Psi_g\rangle = g^{\hat{D}} |\Phi_0\rangle$ zuordnen, sind diese Resultate in Wirklichkeit für $|\Psi_g\rangle = g^{\hat{K}} |\Phi_0\rangle$ in $d = \infty$ exakt. Mit Hilfe unseres neuen Formalismus in Kapitel 2 können wir die richtige Variationswellenfunktion jetzt angeben (siehe Unterabschnitt 3.2.1).

Zusammenfassend können wir für Abschnitt 5.1 folgendes festhalten:

1. Gutzwiller-artige Approximationen geben das exakte Resultat in $d = \infty$ für translationsinvariante Variationswellenfunktionen, wie z. B. für die Gutzwiller- und die Rice-Ueda-Brandow Variationswellenfunktion.
2. Für kompliziertere (z. B. antiferromagnetische) Variationswellenfunktionen sind sie unzureichend. Sie können *bestenfalls* die in $d = \infty$ exakte analytische Struktur von $\langle\hat{H}\rangle$ und Renormierungsfaktoren $q_{i\sigma}$ richtig angeben, wie dies z. B. Oleś und Zaanen gelang. Die Zuordnung der richtigen Wellenfunktion $|\Psi_g\rangle = g^{\hat{K}} |\Phi_0\rangle$ zu

- diesen Ergebnissen ist aber nicht möglich, es wird sogar fälschlicherweise suggeriert, daß $|\Psi_g\rangle = g^{\hat{D}} |\Phi_0\rangle$ die zugehörige Variationswellenfunktion sei.
3. Da in numerischen Untersuchungen stets mit $|\Psi_g\rangle = g^{\hat{D}} |\Phi_0\rangle$ gearbeitet wurde, die in $d = \infty$ optimale Form aber $|\Psi_g\rangle = g^{\hat{K}} |\Phi_0\rangle$ ist (siehe Gleichung (20)), sind Vergleiche zwischen analytischen und numerischen Resultaten nur im Falle von translationsinvarianten Gutzwiller-korrelierten Variationswellenfunktionen sinnvoll, weil dann beide Einteilchen-Produktwellenfunktionen $|\Psi_0\rangle$ und $|\Phi_0\rangle$ identisch sind ($g^{\hat{K}-\hat{D}}$ in Gleichungen (17), (21) ist hier nur ein irrelevanter Normierungsfaktor); man sollte Vergleiche also nur im Falle der Gutzwiller-Wellenfunktion und der Rice-Ueda-Brandow Wellenfunktion anstellen, da man in diesen Fällen die Einflüsse endlicher Dimension studieren kann. In allen anderen Fällen, insbesondere bei Antiferromagnetismus, müssen erst neue numerische Studien durchgeführt werden.
 4. Es ist nicht möglich, Korrelationsfunktionen für Variationsansätze mit gebrochener Symmetrie mit Hilfe der „Abzähl“-Näherung zu berechnen.

5.2 Slave-Boson-Methode von Kotliar und Ruckenstein

Kotliar und Ruckenstein haben eine „Slave-Boson“-Pfadintegral-Methode für das Hubbard-Modell entwickelt. In diesem Abschnitt zeigen wir, daß ihre Ergebnisse mit Hilfe in $d = \infty$ exakt ausgewerteter Gutzwiller-korrelierter Variationswellenfunktionen abgeleitet werden können.

Im ersten Unterabschnitt stellen wir kurz die Methode vor, wobei wir auf den Umweg über Pfadintegrale verzichten können. Im zweiten Unterabschnitt zeigen wir Vor- und Nachteile dieser Methode auf. Insbesondere werden wir auf die Frage eingehen, in welchem Umfang die Resultate dieses für *endliche Temperaturen* gedachten Näherung

tatsächlich für $T > 0$ angewendet werden können.

5.2.1 Kurze Darstellung des Verfahrens

Die Behandlung von Pfadintegralen (insbesondere deren genäherte Auswertung) erleichtert sich erheblich, wenn man nur noch mit kommutierenden statt antikommutterenden Variablen rechnen muß [41]. Kotliar und Ruckenstein [34] führten deshalb vier „Slave-Boson“-Operatoren ein, die die vier möglichen Besetzungen eines Gitterplatzes beschreiben: \hat{c}_i^\dagger für einen leeren Gitterplatz, \hat{d}_i^\dagger für ein Doppelbesetzung und $\hat{p}_{i\sigma}^\dagger$ für eine Einfachbesetzung. Das Hubbard-Modell kann dann in einem *erweiterten* Hilbert-Raum folgendermaßen geschrieben werden

$$\widetilde{H} = \sum_{i,j\sigma} t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} \hat{z}_{i\sigma}^\dagger \hat{z}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{d}_i^\dagger \hat{d}_i \quad , \quad (94a)$$

wobei wir die Abkürzung

$$\hat{z}_{i\sigma} = \hat{c}_i^\dagger \hat{p}_{i\sigma} + \hat{p}_{i-\sigma}^\dagger \hat{d}_i \quad (94b)$$

eingeführt haben. Jetzt wird die Wechselwirkung allein durch Bosonenoperatoren ausgedrückt, aber die kinetische Energie ist komplizierter geworden. Außerdem hat man den Hilbert-Raum erweitert und sich damit Vieldeutigkeiten eingehandelt. Solange man \hat{H} exakt behandelt, kann man nämlich zum Beispiel folgende Ersetzung vornehmen, ohne die Physik zu ändern

$$\hat{z}_{i\sigma} \rightarrow \widetilde{\hat{z}_{i\sigma}} = \frac{1}{\sqrt{1 - \hat{d}_i^\dagger \hat{d}_i - \hat{p}_{i\sigma}^\dagger \hat{p}_{i\sigma}}} \hat{z}_{i\sigma} \frac{1}{\sqrt{1 - \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i - \hat{p}_{i-\sigma}^\dagger \hat{p}_{i-\sigma}}} \quad . \quad (95)$$

Jede Näherung hängt jedoch von der „geeigneten“ Wahl der Operatoren ($\hat{z}_{i\sigma}$ oder $\widetilde{\hat{z}_{i\sigma}}$) ab.

Die in der Formulierung mit Pfadintegralen übliche Näherung besteht darin, „statische Sattelpunkte“ des Pfadintegrals zu suchen. Während dies für Pfadintegrale in der Quantenmechanik eines Teilchens eine wohlverstandene Näherung ist (klassischer Grenzfall), ist die Bedeutung und Qualität dieser Approximation für Vielteilchenpfadintegrale noch unklar. Man kann die Gleichungen von Kotliar und Ruckenstein für die zeitunabhängigen Sattelpunkte auch ohne Pfadintegrale ableiten, die Verwendung des Pfadintegralformalismus mag jedoch als Motivation dienen. Wir ersetzen in \hat{H} die Boseoperatoren durch ihre zeitunabhängigen Mittelwerte, was auch als „Bosekondensation“ aufgefaßt werden mag. Wir ersetzen also

$$\langle \hat{d}_i^+ \rangle_0 = \langle \hat{d}_i \rangle_0 = \sqrt{\bar{d}_i} \quad (96a)$$

$$\langle \hat{e}_i^+ \rangle_0 = \langle \hat{e}_i \rangle_0 = \sqrt{1 - n_{i,0} + \bar{d}_i} \quad (96b)$$

$$\langle \hat{p}_{i\sigma}^+ \rangle_0 = \langle \hat{p}_{i\sigma} \rangle_0 = \sqrt{\langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle_0 - \bar{d}_i} \quad , \quad (96c)$$

wobei wir die Notation dieser Arbeit in den hinteren Ausdrücken verwendet haben. Man sieht dann leicht, daß

$$\langle \hat{z}_{i\sigma}^- \rangle_0 = \sqrt{q_{i\sigma}} \quad (97)$$

gilt, wobei $\sqrt{q_{i\sigma}}$ durch Gleichung (46) gegeben ist. Damit haben wir einen „effektiven“ Hamiltonoperator abgeleitet

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \sum_{i,j\sigma} t_{ij} \sqrt{q_{i\sigma}} \sqrt{q_{j\sigma}} \hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{j\sigma}^- + U \sum_i \bar{d}_i \quad . \quad (98)$$

$\langle \hat{H}_{\text{eff}} \rangle_0$ muß jetzt nur noch bezüglich \bar{d}_i und $\langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle_0$ optimiert werden (statische Sattelpunktsgleichungen). Diese Gleichungen sind völlig identisch mit denen, die wir in $d = \infty$ für die Gutzwiller-korrelierte Variationswellenfunktionen erhalten haben (siehe Kapitel 3). Dies wurde erstmals von Metzner und Vollhardt für die Spezialfälle der

Gutzwiller-Wellenfunktion und der Gutzwiller-korrierten antiferromagnetischen Spindichtewelle gezeigt [20,25]. Wir haben diese Korrespondenz nun im allgemeinen nachgewiesen.

5.2.2 Diskussion der Methode und ihrer Ergebnisse

Nachdem wir die Methode dargestellt und völlige Übereinstimmung der Resultate beider Verfahren erzielt haben, können wir folgenden Vergleich der Behandlung Gutzwiller-korrieter Variationswellenfunktionen mit der „Slave-Boson“-Pfadintegral-Methode von Kotliar und Ruckenstein ziehen:

- (i) wir können die explizite Wellenfunktion zu einem bestimmten Sattelpunkt angeben (für Antiferromagnetismus, siehe Gleichungen (48a), (48b) und (50)). Wellenfunktionen erlauben einen direkten Einblick in die zugrundeliegende Physik; zudem können innerhalb desselben Zugangs auch alle Korrelationsfunktionen berechnet werden. Zur Frage der Eindeutigkeit der Wellenfunktion sei das übliche Hartree-Fock-Versfahren für das Hubbard-Modell in Erinnerung gerufen: entkoppelt man die Zweiteilchen-Wechselwirkung in Gleichung (1), so erhält man einen Einteilchen-Hamiltonian, dessen Grundzustand auch als Variationsansatz geschrieben werden kann. Umgekehrt gibt es zu jedem Variationsansatz einen Hamiltonian, der diese Wellenfunktion als Grundzustand hat. In unserem Fall gibt die Wahl der Symmetrie einer speziellen Lösung der Sattelpunktsgleichungen die Wellenfunktion vor und umgekehrt.
- (ii) es gibt keine Mehrdeutigkeiten im Variationsverfahren, da alle Erwartungswerte in $d = \infty$ exakt berechnet werden. Außerdem eröffnet es die Möglichkeit einer systematischen Verbesserung der Näherung durch eine $(1/d)$ -Entwicklung;

- (iii) aus dem Variationsprinzip wissen wir, daß man eine obere Schranke für die Grundzustandsenergie in $d = \infty$ für das Hubbard-Modell erhält;
- (iv) die von Kotliar und Ruckenstein angegebene „Zustandssumme“ Z_{KR} bzw. „freie Energie“ f_{KR} sind keine wohldefinierten Größen. Trotzdem können sie zu einer genäherten Beschreibung der Tiefstemperatureigenschaften korrelierter Fermiysteme herangezogen werden.

Um den letzten Punkt zu erklären, betrachten wir den translations- und spinsymmetrischen Fall der Variationsgleichungen, damit wir nicht zwischen $g^{\hat{D}} |\Phi_0\rangle$ und $g^{\hat{K}} |\Phi_0\rangle$ unterscheiden müssen. Die Eigenzustände der kinetischen Energie in Gleichung (1) spannen den ganzen Hilbert-Raum auf. Wir bezeichnen sie mit $|\Phi_n\rangle$. Wir können jedem dieser Zustände eine Energie $E_n(g)$ zuordnen, die wir folgendermaßen definieren

$$E_n(g) = \frac{\langle \Phi_n | g^{\hat{D}} \hat{H} g^{\hat{D}} | \Phi_n \rangle}{\langle \Phi_n | g^{\hat{D}} | \Phi_n \rangle} . \quad (99)$$

In $d = \infty$ gilt nun

$$E_n(g) = q \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon(\mathbf{k}) \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \rangle_{\{\Phi_n\}} + U L \overline{d} , \quad (100)$$

weil Gleichung (47) für beliebige Zustände $|\Phi_n\rangle$ gültig ist. Wir definieren nun die Objekte

$$Z_{KR} = \sum_{\{\Phi_n\}} e^{-\beta E_n} \quad (101a)$$

$$f_{KR} = -\frac{1}{\beta} \ln Z_{KR} , \quad (101b)$$

wobei $\beta = 1/k_B T$ ist. f_{KR} ist dann gerade die „freie Energie“ und Z_{KR} die „Zustandssumme“ von Kotliar und Ruckenstein [34]. Da die Zustände $|\Phi_n(g)\rangle = g^{\hat{D}} |\Phi_n\rangle$ nicht orthogonal zueinander sind, ist Z_{KR} offensichtlich keine wohldefinierte Zustandssumme.

Die Minimierung von f_{KR} nach \bar{d} liefert für großes U kleine Werte von \bar{d} (oder sogar $\bar{d} = 0$). Während wir bei $g = 1$ mit einer Zahl von $\binom{L}{N_1} \binom{L}{N_1}$ Zuständen $|\Phi_n\rangle$ anfangen, betrachten wir zum Schluß nur mehr Zustände $[\prod_f (1 - \hat{D}_f)] |\Phi_n\rangle$ ohne Doppelbesetzungen, d. h. wir arbeiten in einem Hilbert-Raum der Dimension $\binom{L}{N_1} \binom{L-N_1}{N_1}$. Ursache für dieses Überzählen von Zuständen ohne Doppelbesetzung (Entropieproblem [9]) ist die *mathematisch* nicht wohldefinierte Zustandssumme Z_{KR} , die zu einem physikalisch unsinnigen Lokalisierungsübergang für $U \cdot T \gg 1$ führt. Kotliar und Ruckenstein waren sich der Problematik dieses Übergangs bewußt [34].

Trotzdem sind f_{KR} oder Z_{KR} nützlich, um Tieftemperatureigenschaften korrelierter Fermisysteme zu beschreiben, wie z. B. in Referenzen [60,62] für normalfluides ^3He gezeigt wurde. „Niedrig“ bedeutet hier, daß die Zahl der in Gleichung (101a) relevanten Zustände nicht die Zahl $\binom{L}{N_1} \binom{L-N_1}{N_1}$ der Zustände ohne Doppelbesetzungen übersteigt. Dies ist eine Minimalsforderung, um das Entropieproblem zu umgehen. Sie ist aber nicht hinreichend, da sich diese Forderung nur an der Zahl der für $U = \infty$ erlaubten Zustände orientiert. Zur Veranschaulichung dieser Tatsache betrachten wir den Grundzustand des Hubbard-Modells. Er ist für $U = 0$ der tiefste Zustand für die kinetische Energie und hat bei $U = \infty$ keine doppelbesetzten Gitterplätze. Wenn die Zustandssumme von Kotliar und Ruckenstein sinnvoll sein soll, dann entspricht dies der Erwartung, daß die niederenergetischen Anregungen im Hubbard-Modell ebenfalls dieses Verhalten zeigen: sie sind exakte Lösungen des Modells, die für $U = 0$ niederenergetische Anregungen des Fermigases sind und für $U = \infty$ keine Doppelbesetzungen enthalten. Für solche Zustände können wir hoffen, daß wir einen angeregten Zustand im Hubbard-Modell sinnvoll für alle U dadurch approximieren können, daß wir den Gutzwiller-Korrelator auf diesen angeregten Zustand des Fermigases ($U = 0$) wirken lassen. Nicht *alle* Eigenzustände des Hubbard-Modells, die für $U = 0$ zu den $\binom{L}{N_1} \binom{L-N_1}{N_1}$ Zuständen des Fermigases mit den niedrigsten Energien gehören, haben für $U = \infty$ keine Doppel-

besetzungen (man betrachte hierzu beispielsweise das Hubbard-Modell mit vier Gitterplätzen, zwei \uparrow - und zwei \downarrow -Elektronen und periodischen Randbedingungen [64]). Man muß also eine schärfere Bedingung fassen, als nur die maximale Zahl der Zustände auf $\binom{L}{N_1} \binom{L-N_1}{N_2}$ festzulegen. Eine quantitative Formulierung einer solchen Bedingung ist aber schwierig, da man über die exakten Zustände des Modells selbst mehr wissen müßte. Phänomenologische Erweiterungen der Gutzwiller Ergebnisse auf endliche Temperaturen, wie sie von Seiler et al. [9] vorgeschlagen wurden, können jedenfalls mit der Methode von Kotliar und Ruckenstein nicht entkräftet werden.

Der Zugang von Kotliar und Ruckenstein kann auf natürliche Weise erweitert werden, indem man „Fluktuationen um den Sattelpunkt“ berechnet. Für die Bosonsfelder (Mittelwerte der „Slave-Boson“-Operatoren) heißt dies, daß sie nicht mehr als statische, sondern als dynamische, d. h. zeitabhängige Größen behandelt werden [60-62]. Es ist ein offenes Problem, wie man diese Dynamik im Rahmen von (zeitabhängigen) Grundzustandswellenfunktionen behandeln muß.

6 Berechnung von $1/d$ -Korrekturen im Falle der paramagnetischen Gutzwiller-Wellenfunktion

Wie wir in den Kapiteln 3 und 4 gezeigt haben, erhalten wir in $d = \infty$ exakte und sehr allgemeine Resultate für Gutzwiller-korrelierte Wellenfunktionen. Dies erlaubte einen detaillierten Vergleich mit anderen Näherungsverfahren in Kapitel 5. Die Art der bislang in der Literatur bekannten Approximationen eröffnete im allgemeinen keinen Weg zu einer systematischen Verbesserung der Ergebnisse, d. h. einer Verbesserung in Richtung auf eine exakte Auswertung einer Variationswellenfunktion in endlichen Dimensionen. Der systematische Zugang mit dem Kontrollparameter $(1/d)$ erlaubt nun, die Qualität der Näherung $d = \infty$ durch die Berechnung von $(1/d)$ -Korrekturen abzuschätzen und systematische Korrekturen anzugeben.

In diesem Kapitel berechnen wir die mittlere Doppelbesetzung \bar{d} , die Impulsverteilung $\langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \rangle$ und die mittlere kinetische Energie $\langle \hat{T} \rangle$ für die paramagnetische Gutzwiller-Wellenfunktion in einer $(1/d)$ -Entwicklung. Im ersten Abschnitt rechnen wir für beliebige Bandfüllung n und Variationsparameter g (d. h. Wechselwirkungsstärken U im Hubbard-Modell). Wegen der Teilchen-Loch-Symmetrie können wir uns dabei auf $n \leq 1$ beschränken. Im zweiten Abschnitt rechnen wir für halbvolles Band ($n = 1$) bis zur Ordnung $(1/d)^2$.

6.1 Korrektur in erster Ordnung für beliebige Bandfüllung

In der paramagnetischen Gutzwiller-Wellenfunktion $|\Psi_g\rangle = g^{\hat{D}} |\Psi_0\rangle = g^{\hat{K}} |\Phi_0\rangle$ sind $|\Phi_0\rangle$ und $|\Psi_0\rangle$ der Fermi-See. Wegen der Translationsinvarianz gilt $\langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle = \langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle_0 = n/2$ und

$$x_i = x = [4(G-1)]/[(G+1)n(2-n)] \quad . \quad (102a)$$

Hierbei ist G durch

$$G = \sqrt{1 + n(2 - n)(g^2 - 1)} \quad (102b)$$

definiert. Die Faktoren q und α in Gleichungen (25a) und (25b) lassen sich dann folgendermaßen durch G und n ausdrücken

$$\sqrt{q_{i\sigma}} \equiv \sqrt{q} = \frac{1}{G+1} \left[\sqrt{(2-n)(G+1-n)} + \sqrt{n(G-1+n)} \right] \quad (103a)$$

$$\alpha_{i\sigma} \equiv \alpha = -\frac{n}{2} \frac{G+1}{G-1} + \frac{1}{G-1} \sqrt{\frac{n(G-1+n)}{q}} \quad . \quad (103b)$$

In $d = \infty$ ist die Gutzwiller-Approximation für die Gutzwiller-Wellenfunktion exakt, d. h.

$$\bar{d}(g, n, d = \infty) = \bar{d}_{GA}(g, n) = \frac{n}{2} \frac{G+n-1}{G+1} \quad (104a)$$

und

$$\langle \hat{n}_{k\sigma}(g, n, d = \infty) \rangle = \langle \hat{n}_{k\sigma}(g, n) \rangle_{GA} = q \langle \hat{n}_{k\sigma} \rangle_0 + \frac{n}{2} (1 - q) \quad . \quad (104b)$$

Die Fouriertransformierte der Selbstenergie $\widetilde{S}_\sigma(i, j)$ sei mit $\widetilde{S}_\sigma(\mathbf{k})$ bezeichnet. Es ist also $\widetilde{S}_\sigma(\mathbf{k}) = (1/L) \sum_{i,j} e^{i\mathbf{k}(i-j)} \widetilde{S}_\sigma(i, j)$. Mit Hilfe dieser Definition können wir schreiben

$$\bar{d}(g, n) = \bar{d}_{GA}(g, n) - \frac{(G+n-1)(G+1-n)}{G(G^2-1)} \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \left[\langle \hat{n}_{k\sigma} \rangle_0 - \frac{n}{2} \right] \widetilde{S}_\sigma(\mathbf{k}) \quad (105a)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_{k\sigma}(g, n) \rangle &= \langle \hat{n}_{k\sigma}(g, n) \rangle_{GA} + q \left[\left(\langle \hat{n}_{k\sigma} \rangle_0 - \frac{n}{2} - \alpha \right)^2 \widetilde{S}_\sigma(\mathbf{k}) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \left(\langle \hat{n}_{k\sigma} \rangle_0 - \frac{n}{2} - \alpha \right)^2 \widetilde{S}_\sigma(\mathbf{k}) \right] \quad . \end{aligned} \quad (105b)$$

Für Gleichung (105) haben wir die Teilchenzahlerhaltung für die Gutzwiller-Wellenfunktion, Gleichung (38), verwendet, aus der

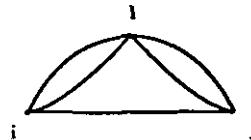
$$\widetilde{S}_\sigma(i, i) = \frac{2(n-1)(G-1)}{n(2-n)G} \sum_{\mathbf{f}} \widetilde{P}_\sigma^0(i, \mathbf{f}) \widetilde{S}_\sigma(\mathbf{f}, i) = \beta \sum_{\mathbf{f}} \widetilde{P}_\sigma^0(i, \mathbf{f}) \widetilde{S}_\sigma(\mathbf{f}, i) \quad (106)$$

folgt. Gleichung (106) zeigt, daß wir lediglich den Nebendiagonalanteil der Selbstenergie betrachten müssen. Für allgemeine Gutzwiller-korrierte Variationswellenfunktionen muß aber der Diagonalanteil getrennt berechnet werden. Der Faktor β vor der Summe in Gleichung (106) läßt sich schreiben als $\beta = [4(n-1)x] / [4 + xn(2-n)]$. Das bedeutet, daß man diesen Faktor nicht aus einer endlichen Ordnung in der Entwicklung in x erhalten kann. Damit lassen sich die Ergebnisse der $(1/d)$ -Entwicklung im allgemeinen nicht aus einer endlichen Ordnung der Entwicklung nach x erhalten. Man muß also ganze Diagrammklassen aufsummieren, um $(1/d)$ -Korrekturen für den Diagonalanteil der Selbstenergie $\widetilde{S}_\sigma(i, i)$ zu berechnen. Ein Beispiel hierfür werden wir in Kapitel 8 geben (siehe auch Appendix A2).

Andererseits kann der Parameter x dazu dienen, denjenigen Parameterbereich für g und n zu bestimmen, für den die Gutzwiller-Approximation für die Gutzwiller-Wellenfunktion bereits eine gute Näherung darstellt. Der Grund dafür ist, daß $\widetilde{S}_\sigma(\mathbf{k})$ durch eine Reihe in $(n/2)^2 x$ definiert ist, wobei $x = x_1$ durch Gleichung (102a) gegeben ist (in jeder Ordnung in x erhält man zwei neue Linien in den Graphen, die einen zusätzlichen Faktor $(n/2)^2$ ergeben). Demzufolge ist die Gutzwiller-Approximation für die Gutzwiller-Wellenfunktion eine gute Näherung für kleine x . Dies ist der Fall für $g \rightarrow 1$ ($G \rightarrow 1$), d. h. für kleine Wechselwirkungsstärken U in Gleichung (1) und/oder für kleine Dichten n ($n \rightarrow 0$). Außerdem ist die Reihe in x konvergent für alle (g, n) , wobei der Konvergenzradius bei $(g = 0, n = 1)$ erreicht wird [12]. Daraus folgt, daß die $(1/d)$ -Reihe für alle (g, n) mit Ausnahme von $g = 0, n = 1$ konvergiert. Wie wir in Kapitel 7 zeigen werden, ist die $(1/d)$ -Reihe für diese beiden Werte von g und n tatsächlich nur eine asymptotische Reihe.



(a)



(b)

Abbildung 2: Graphen in niedrigster Ordnung zur Selbstenergie; a) Graph in zweiter Ordnung in x , b) Graph in dritter Ordnung in x

Nach diesen allgemeineren Betrachtungen wollen wir jetzt die $(1/d)$ -Korrekturen konkret berechnen. Der einzige Graph, der in Ordnung $\mathcal{O}(1/d)$ zum Nebendiagonalanteil der Selbstenergie beiträgt, ist in Abbildung 2a dargestellt. Dieser Graph gibt den Beitrag der nächsten Nachbarn (NN-Cluster) eines Gitterplatzes i (d. h. $j = i + \tau$) zur Selbstenergie $\tilde{S}_\sigma(i, j)$. Ein Graph höherer Ordnung wie in Abbildung 2b, der von Ordnung x^3 ist, enthält auch Informationen über die Korrelationen zwischen $j = i + \tau$ und $l = i + \tau'$ ($\tau \neq \tau'$) und ist deshalb von höherer Ordnung in $(1/d)$. Der analytische Ausdruck ist dann gegeben durch

$$\tilde{S}_\sigma(i, j) = - \left[\frac{G-1}{G+1} \frac{4}{n(2-n)} \right]^2 \left[\tilde{P}_\sigma^0(\tau) \right]^3 \quad \text{für } \tau = i - j \quad (107a)$$

$$\tilde{P}_\sigma^0(\tau) = \frac{1}{2d} \sum_{\tau} \sum_{\epsilon(k) \leq \epsilon_F} e^{ik\tau} = -\frac{1}{2\sqrt{2d}} \bar{\epsilon}_0 \quad , \quad (107b)$$

wobei $\bar{\epsilon}_0$ die mittlere kinetische Energie des nichtwechselwirkenden Grundzustandes ist (ϵ_F ist die Fermi-Energie). Wir erhalten schließlich

$$\widetilde{S}_\sigma^{(1)}(\mathbf{i}, \mathbf{i}) = -\frac{(n-1)(G-1)^3}{[n(2-n)]^3(G+1)^2G}(\bar{\epsilon}_0)^4 \quad . \quad (108)$$

Hier haben wir die Abkürzung $O(g, n, d) = O_{GA}(g, n) + \sum_{r=1}^{\infty} (1/d)^r O^{(r)}(g, n)$ für die $(1/d)$ -Entwicklung einer Größe $O(g, n)$ eingeführt. Es sei daran erinnert, daß die Selbstenergie in $d = \infty$ verschwindet, d. h. es gilt $\widetilde{S}_{\sigma, GA}(\mathbf{i}, \mathbf{j}) = 0$. $\widetilde{S}_\sigma(\mathbf{k})$ ist stetig in \mathbf{k} , weil $\widetilde{S}_\sigma(\mathbf{k})$ in dieser Ordnung durch einen Skelettgraphen gegeben ist. Letztendlich erhalten wir aus den Gleichungen (105a), (105b)

$$\bar{d}^{(1)}(g, n) = \frac{(G+1-n)(G+n-1)(G-1)}{2G(G+1)^3n^2(2-n)^2}(\bar{\epsilon}_0)^4 \quad (109a)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}(g, n) \rangle^{(1)} &= \left(\frac{1}{1+g}\right)^2 \left(\frac{G-1}{G+1}\right)^2 [n(G+1-n) + 2(1-n)(G-1)\langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \rangle_0] \\ &\times \left[\frac{|\bar{\epsilon}_0|}{n(2-n)} \right]^3 \left[\frac{(n-1)(G-1)}{n(2-n)G} \bar{\epsilon}_0 + \epsilon(\mathbf{k}) \right] \end{aligned} \quad (109b)$$

und die $(1/d)$ -Korrektur zum Sprung an der Fermikante ist durch

$$\begin{aligned} q^{(1)}(g, n) &= \left(\frac{1}{1+g}\right)^2 \left[\frac{|\bar{\epsilon}_0|}{n(2-n)} \right]^3 \left(\frac{G-1}{G+1}\right)^2 \\ &\times 2(1-n)(G-1) \left[\frac{(n-1)(G-1)}{n(2-n)G} \bar{\epsilon}_0 + \epsilon_F \right] \end{aligned} \quad (109c)$$

gegeben. Gleichung (109c) zeigt, daß im allgemeinen $q^{(1)}(g, n) \geq 0$ gilt.

In $d = \infty$ berechnet sich die mittlere kinetische Energie pro Gitterplatz zu

$$(1/L)\langle \hat{T}(g, n, d = \infty) \rangle = (1/L)\langle \hat{T}(g, n) \rangle_{GA} = q\bar{\epsilon}_0 \quad . \quad (109d)$$

Die Korrektur in Ordnung $(1/d)$ lautet

$$\begin{aligned} \frac{1}{L}\langle \hat{T}(g, n) \rangle^{(1)} &= 2 \left(\frac{1}{1+g}\right)^2 \left[\frac{|\bar{\epsilon}_0|}{n(2-n)} \right]^3 \left(\frac{G-1}{G+1}\right)^2 \\ &\times \left[-\frac{(1-n)^2(G-1)^2}{n(2-n)G} (\bar{\epsilon}_0)^2 + n(G+1-n) + (1-n)(G-1)\bar{\epsilon}_0^2 \right], \end{aligned} \quad (109e)$$

wobei wir verwendet haben, daß in allen Dimensionen die Relation $(1/L) \sum_{\mathbf{k}} [\epsilon(\mathbf{k})]^2 = 1$ gilt.

In den Gleichungen (109a)-(109e) treten $\bar{\epsilon}_0$ und höhere Momente wie $\bar{\epsilon}_0^2$ auf. Diese Größen sind definiert als $\bar{\epsilon}_0^m = 2 \int_{-\infty}^{\epsilon_F} d\epsilon \rho(\epsilon) \epsilon^m$, wobei $\rho(\epsilon)$ die Zustandsdichte bezeichnet. Sie hängen selbst von der Dimension ab (z. B. gilt $|\bar{\epsilon}_0| = 2\sqrt{2}/\pi \simeq 0.900$ in $d = 1$, $|\bar{\epsilon}_0| = 8/\pi^2 \simeq 0.811$ in $d = 2$ und $|\bar{\epsilon}_0| = \sqrt{2}/\sqrt{\pi} \simeq 0.798$ in $d = \infty$). Um nun in Ordnung $\mathcal{O}(1/d)$ konsistent zu sein, müßten wir in jedem Schritt (i) die Zustandsdichte in Potenzen von $(1/d)$ entwickeln (für Details, siehe Referenz [24]), (ii) ϵ_F aus $n = 2 \int_{-\infty}^{\epsilon_F} \rho(\epsilon) d\epsilon$ bestimmen und (iii) diese Ausdrücke bis zur gegebenen Ordnung in Gleichungen (109a)-(109e) einsetzen. Dieser Weg ist nicht nur lang und beschwerlich, sondern es stimmen auch die analytischen Eigenschaften einer solchen Zustandsdichte nie mit denen einer realistischen Zustandsdichte überein (z. B. endliche Bandbreite, Van-Hove Singularitäten). Aus diesen Gründen werden wir immer die *exakte* Zustandsdichte für eine vorgegebene Dimension verwenden, wenn wir mit Resultaten für endliche Dimensionen d vergleichen. Man mag zwar einwenden, daß es sich nicht mehr um eine systematische Entwicklung in $(1/d)$ handelt; die Fehler aber, die man auf diese Weise macht, sind für einen Ausdruck in Ordnung $(1/d)^m$ nur von Ordnung $(1/d)^{m+1}$. Wie wir in Kapitel 7 sehen werden, liefert diese Näherung sehr gute Übereinstimmung mit exakten ($d = 1$) und numerischen Ergebnissen ($d = 2, 3$).

6.2 Korrektur in zweiter Ordnung für halbgefülltes Band

Für das halbgefüllte Band ($n = 1$) können wir die Teilchen-Loch-Symmetrie des Problems ausnützen. Wegen der resultierenden Vereinfachungen können wir ohne allzuviel Mühe bis zur Ordnung $(1/d)^2$ rechnen.

Für halbvolles Band ist $x = 4(g-1)/(g+1)$, $q = (4g)/(1+g)^2$, $\alpha = 0$ und

Tabelle 1: Vorzeichen, Gewichte und Werte der Graphen in Abbildung 3 in Ordnung $\mathcal{O}((1/d)^2)$

Graph	Vorzeichen	Gewicht	Wert
a	+	1	$\left(\langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \rangle_0 - \frac{1}{2}\right) \left[\frac{(\bar{\epsilon}_0)^3 \epsilon(\mathbf{k})}{16d} \right]^2$
b	+	3	$\frac{(\bar{\epsilon}_0)^5 \epsilon(\mathbf{k})}{512d^2}$
c	-	3	$\frac{3}{512d^2} (\bar{\epsilon}_0)^7 \epsilon(\mathbf{k})$

$\widetilde{S}_\sigma(i, i) = 0$. Im Falle der Gutzwiller-Wellenfunktion für halbvolles Band kann man also die Koeffizienten der $(1/d)$ -Entwicklung durch eine endliche Zahl von Termen der Entwicklung im Parameter z darstellen. Wir erhalten

$$\bar{d}(g, n=1) = \frac{g}{2(1+g)} \left(1 + \frac{2}{1-g} \frac{1}{L} \sum_{\epsilon(\mathbf{k}) \leq 0} \widetilde{S}_\sigma(\mathbf{k}) \right) \quad (110a)$$

$$\langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}(g, n=1) \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{1-g}{1+g} \right)^2 + \frac{4g}{(1+g)^2} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \rangle_0 + \frac{g}{(1+g)^2} \widetilde{S}_\sigma(\mathbf{k}) \quad . \quad (110b)$$

Wegen der Teilchen-Loch-Symmetrie gilt auch $\widetilde{P}_\sigma^0(i, j) = 0$, wenn i, j auf demselben Untergitter sind. Das bedeutet, daß zwei Gitterpunkte, die in einem Graphen durch eine Linie verbunden sind, zu verschiedenen Untergittern gehören müssen. Deshalb verschwindet der Graph in Abbildung 2b (Seite 78), denn i und i , I und j , i und j können nicht zugleich auf verschiedenen Untergittern sein. Weiterhin hat der Graph in Abbildung 2a keine $(1/d)^2$ -Korrektur, weil dafür i und j übernächste Nachbarn sein müßten, d. h. es wäre i auf demselben Untergitter wie j . Alle Graphen, die überhaupt in Ordnung $\mathcal{O}((1/d)^2)$ beitragen, sind in Abbildung 3 gezeigt.

Die Werte der Graphen im \mathbf{k} -Raum sind in Tabelle 1 aufgelistet. Diese Tabelle

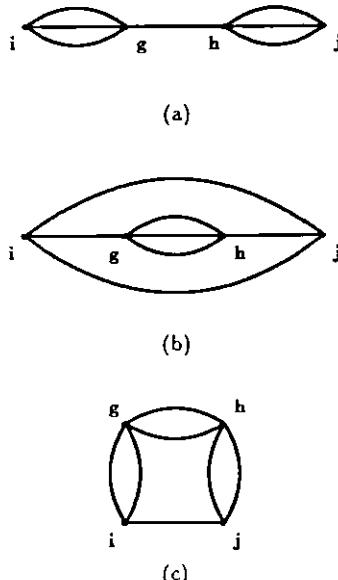


Abbildung 3: Alle Graphen, die im Falle der Gutzwiller-Wellenfunktion bei halber Bandfüllung zur Ordnung $(1/d)^2$ beitragen.

enthält ebenso das Vorzeichen und die Multiplizität (das „Gewicht“) eines Graphen. Diese beiden Faktoren erhält man aus dem Wick-Theorem. Um den Beitrag zur zweiten Ordnung zu erhalten, muß man die Werte der Graphen mit ihrem Vorzeichen und Gewicht multiplizieren und die drei Terme anschließend aufzufaddieren. Der Graph in Abbildung 3c ist besonders dimensionsabhängig. Man findet nämlich den Hauptbeitrag, wenn alle Gittervektoren nächste Nachbarn zueinander sind. Für hohe Dimensionen ($d \geq 2$) ergeben diese Anteile den Wert des Graphen (c) in Tabelle 1, sind aber erheblich kleiner in $d = 1$. Deswegen führen die untenstehenden Ausdrücke in $\mathcal{O}((1/d)^2)$ zu einer guten Näherung für $d \geq 2$, geben aber in $d = 1$ keine gute Näherung. Man erhält also aus der konkreten Betrachtung von einzelnen Graphen Hinweise darauf, bis zu

welcher endlichen Ordnung in $(1/d)$ man entwickeln sollte, um eine gute Näherung für eine vorgegebene Dimension d zu erhalten. Im Fall der Gutzwiller-Wellenfunktion sieht man, daß man in $d = 1$ nur bis zur Ordnung $(1/d)$ entwickeln sollte, um eine gute Übereinstimmung mit dem exakten Resultat [12] zu erhalten.

Ein anderes Verfahren, das auch vernünftige Ergebnisse in $d = 1$ liefert, besteht aus folgendem Vorgehen: man identifiziert die einzelnen Graphen bezüglich ihres $(1/d)$ -Verhaltens, berechnet sie aber dann *exakt* in der gegebenen Dimension d [65]. Diese Überlegung läßt auch eine Erweiterung der $(1/d)$ -Entwicklung auf beliebige Gittertypen zu, indem man die relevanten Graphen wie bisher identifiziert und sie dann *exakt* für einen bestimmten Gittertyp auswertet. Für diese Vorgehensweise gilt das bei der Diskussion der Zustandsdichte Gesagte entsprechend: man entwickelt nicht mehr nach $(1/d)$ im mathematischen Sinn, sondern verwendet einen im Parameter $(1/d)$ begründeten Zugang zur Identifizierung von relevanten Graphen(-klassen).

Addieren wir die drei Beiträge der Graphen in Abbildung 3, so erhalten wir die Selbstenergiekorrekturen als

$$\tilde{S}_\sigma^{(1)}(\mathbf{k}) = - \left(\frac{1-g}{1+g} \right)^2 (\bar{\epsilon}_0)^3 \epsilon(\mathbf{k}) \quad (111a)$$

$$\tilde{S}_\sigma^{(2)}(\mathbf{k}) = \tilde{S}_\sigma^{(1)}(\mathbf{k}) \left(\frac{1-g}{1+g} \right)^2 (\bar{\epsilon}_0)^2 \left[\frac{3}{2} - \frac{9}{2} (\bar{\epsilon}_0)^2 + \bar{\epsilon}_0 \epsilon(\mathbf{k}) \left(\langle \hat{n}_{\mathbf{k}}, \rangle_0 - \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (111b)$$

Die Korrekturen zur mittleren Doppelbesetzung lauten letztlich

$$\bar{d}^{(1)}(g) = -\bar{d}_{GA}(g) \frac{1-g}{(1+g)^2} (\bar{\epsilon}_0)^4 \quad (112a)$$

$$\bar{d}^{(2)}(g) = \bar{d}^{(1)}(g) \left(\frac{1-g}{1+g} \right)^2 (\bar{\epsilon}_0)^2 \left(\frac{9}{2} (\bar{\epsilon}_0)^2 - 2 \right) , \quad (112b)$$

wobei $\bar{d}_{GA} = g/[2(1+g)]$ gilt.

Die Korrekturen zur mittleren kinetischen Energie sind durch

$$\langle \hat{T}(g) \rangle^{(1)} = -\langle \hat{T}(g) \rangle_{GA} \frac{(\bar{\epsilon}_0)^2}{2} \left(\frac{1-g}{1+g} \right)^2 \quad (113a)$$

$$\langle \hat{T}(g) \rangle^{(2)} = \langle \hat{T}(g) \rangle_{GA}^{(1)} \frac{(\bar{\epsilon}_0)^2}{2} \left(\frac{1-g}{1+g} \right)^2 \left(-3 + 9(\bar{\epsilon}_0)^2 - \bar{\epsilon}_0(\bar{\epsilon}_0^3) \right) \quad (113b)$$

gegeben, wobei $(1/L)\langle \hat{T}(g) \rangle_{GA} = 4g\bar{\epsilon}_0/[(1+g)^2]$ ist.

Beachtenswert ist die Tatsache, daß es für $n = 1$ *keine* Korrekturen zum Sprung der Impulsverteilung an der Fermikante gibt, d. h.

$$q(g) = \frac{4g}{(1+g)^2} + \mathcal{O}((1/d)^3) \quad . \quad (114)$$

Wegen der Teilchen-Loch-Symmetrie ist $q(g, n = 1)$ in $d = 1, 2, \infty$ durch denselben Ausdruck gegeben [12], nämlich durch

$$q(g, n = 1) = \frac{4g}{(1+g)^2} \quad . \quad (115)$$

Außerdem gibt es gemäß Gleichung (114) keine $(1/d)$ -Korrekturen zu dieser Größe bis Ordnung $(1/d)^2$. Wir können daher die Vermutung in Referenz [12] unterstützen, daß die Diskontinuität in *allen* Dimensionen d durch Gleichung (115) gegeben ist.

7 Vergleich mit exakten und numerischen Ergebnissen für die paramagnetische Gutzwiller-Wellenfunktion in $d=1,2,3$

In diesem Kapitel zeigen wir, daß die analytischen Ausdrücke in den ersten Ordnungen der $(1/d)$ Entwicklung hervorragende Übereinstimmung mit allen numerischen Resultaten für die Gutzwiller-Wellenfunktion in $d = 2, 3$ liefern. Wir erhalten sogar überraschend gute Ergebnisse in einer Dimension ($d = 1$), wo wir mit der exakten Lösung [12] vergleichen können. Die einzige Unzulänglichkeit der $(1/d)$ -Entwicklung in endlicher Ordnung ist die Vorhersage eines Brinkman-Rice Lokalisierungsübergangs [7] für Wechselwirkungsstärken $U \geq U_c$ im Hubbard-Modell. Dieser Übergang tritt auch im Rahmen der Gutzwiller-Wellenfunktion in keiner endlichen Dimension auf [26], sondern existiert nur in $d = \infty$ (im Hubbard-Modell erwartet man einen magnetischen Übergang, der noch vor dem Lokalisierungsübergang auftreten sollte). Andererseits sind die absoluten Werte der $(1/d)$ -Korrekturen zur Gutzwiller-Approximation für die Gutzwiller-Wellenfunktion in $d = 3$ sehr klein. Deswegen ist die Physik, die aus der Gutzwiller-Approximation für die Gutzwiller-Wellenfunktion abgeleitet wurde, sowohl qualitativ als auch quantitativ in der Gutzwiller-Wellenfunktion in $d = 3$ enthalten, ist also kein Artefakt der Gutzwiller-Approximation, solange man Wechselwirkungsstärken U betrachtet, die nicht zu nahe an U_c sind.

7.1 Doppelbesetzung und potentielle Energie

Die potentielle Energie im Hubbard-Modell ergibt sich als $\langle \hat{V} \rangle = U\langle \hat{D} \rangle = UL\bar{d}$. Für diesen Anteil an der gesamten Variationsenergie müssen wir also die mittlere Doppelbesetzung kennen.

Wir können von einer $(1/d)$ -Entwicklung prinzipiell nicht erwarten, daß sie gute Ergebnisse für $d = 1$ liefern sollte. Andererseits gibt es eine analytische Lösung für

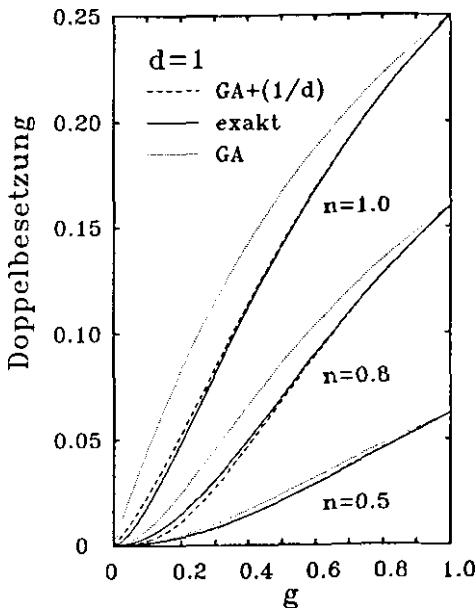


Abbildung 4: Mittlere Doppelbesetzung in der Gutzwiller-Wellenfunktion für verschiedene Bandfüllungen in $d = 1$. Das exakte Ergebnis [12] und das Ergebnis der $(1/d)$ -Entwicklung zur Ordnung $(1/d)$ werden verglichen.

$\bar{d}(g, n)$ in $d = 1$ [12], nämlich

$$\bar{d}(g, n, d = 1) = \frac{g^2}{2(1 - g^2)^2} \left[-\ln(1 - n(1 - g^2)) - n(1 - g^2) \right] \quad . \quad (116)$$

Wir können daher unsere Ergebnisse in Ordnung $(1/d)$ in Gleichung (109a) mit einem *exakten* Ausdruck vergleichen. Diesen Vergleich zeigt Abbildung 4 für die Dichten $n = 0.5$, $n = 0.8$ und $n = 1$. Wir sehen, daß wir für *kleine* Dichten n hervorragende Übereinstimmung für alle Werte von g erhalten. Dies gilt für *alle* Dichten, wenn $g \geq 0.2$ ist (der relative Fehler ist dann kleiner als 10%). Die Ursache für die erstaunlich guten Resultate

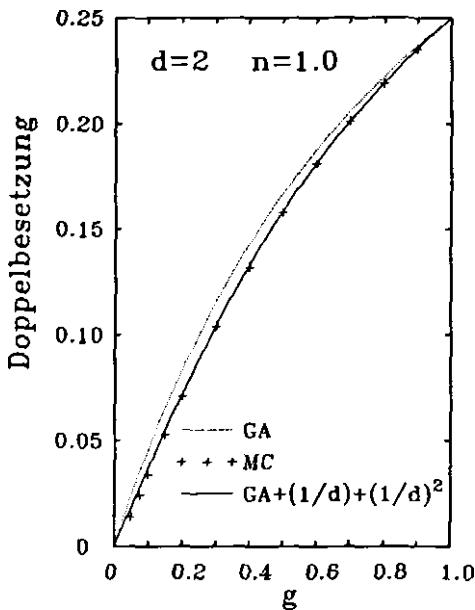


Abbildung 5: Mittlere Doppelbesetzung in der Gutzwiller-Wellenfunktion für halbvolles Band. Numerische Ergebnisse [14] und das Resultat der $(1/d)$ -Entwicklung zur Ordnung $(1/d)^2$ werden in $d = 2$ verglichen.

ist im Parameter x zu suchen, der für kleine Dichten ($n \leq 0.5$) und/oder mittlere Korrelationsstärken ($g \geq 0.2$) klein ist. Die Selbstenergie wird in unserem Formalismus nach Potenzen von x entwickelt (vgl. die Diskussion in Abschnitt 6.1, Seite 77). In der Gutzwiller-Approximation ist die Selbstenergie gleich Null. Der Nebendiagonalanteil der Selbstenergie $\tilde{S}_\sigma(i,j)$ ($i \neq j$) ist proportional zu x^2 , der Diagonalanteil $\tilde{S}_\sigma(i,i)$ ist proportional zu x^3 (siehe Gleichung (106)). Für kleine Werte von x konvergiert auch die x -Entwicklung sehr gut und die Terme der ersten Ordnungen reichen für eine gute Übereinstimmung mit dem exakten Ergebnis aus. Da sich für kleine x die $(1/d)$ - und die x -Entwicklung erst in Ordnung x^3 unterscheiden, wird so die gute Übereinstimmung

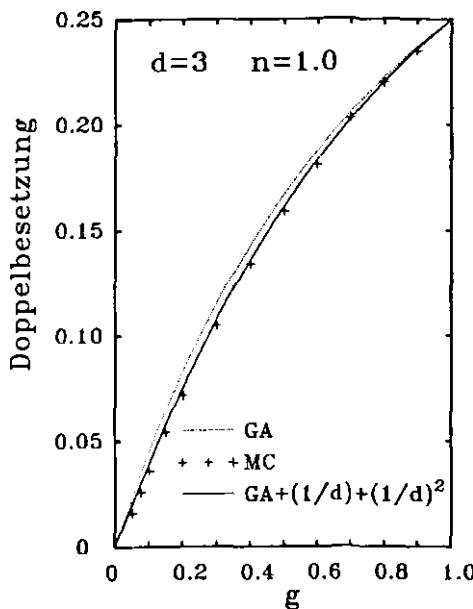


Abbildung 6: Mittlere Doppelbesetzung in der Gutzwiller-Wellenfunktion für halbvolles Band. Numerische Ergebnisse [14] und das Resultat der $(1/d)$ -Entwicklung zur Ordnung $(1/d)^2$ werden in $d = 3$ verglichen.

der $(1/d)$ -Resultate mit dem exakten Ergebnis in $d = 1$ für kleine Dichten ($n \leq 0.5$) und/oder mäßige Korrelationsstärken ($g \geq 0.2$) verständlich.

Die Qualität der $(1/d)$ -Resultate ist in $d = 2, 3$ natürlich noch besser, da $d = 1$ den Extremfall für eine $(1/d)$ -Entwicklung darstellt. Wir vergleichen jetzt unsere Ergebnisse für $\bar{d}(g, n = 1)$ zur Ordnung $(1/d)^2$ mit numerischen Ergebnissen [14]. Abbildung 5 zeigt, daß in $d = 2$ alle numerischen Punkte auf der analytischen Kurve liegen. In $d = 3$ können wir uns noch mehr auf unsere analytischen Resultate verlassen. Abbildung 6 zeigt, daß die numerischen Punkte systematisch unter der analytischen Kurven liegen.

Daraus schließen wir, daß die numerischen Ergebnisse (gerechnet auf $6 \times 6 \times 6 = 216$ Gitterpunkten) aufgrund der endlichen Systemgröße zu tief liegen. Aus dem Vergleich schließen wir ferner, daß der analytische Ausdruck für $\bar{d}(g, n = 1)$ zur Ordnung $(1/d)^2$ bis herunter zu recht kleinen Werten von g ($g \geq 0.02$ in $d = 3$) sehr genau ist.

Der einzige problematische Bereich im Parameterraum (g, n) ist $g \rightarrow 0, n \rightarrow 1$. Gleichung (110a) zeigt explizit, daß jede endliche $(1/d)$ -Entwicklung folgendes Verhalten für die mittlere Doppelbesetzung bei halbvollem Band und starker Korrelation liefert [26]

$$\bar{d}(g, n = 1) = c_2 g \quad \text{für } g \rightarrow 0. \quad (117a)$$

In der $(1/d)$ -Entwicklung folgt aus den Gleichungen (112a), (112b)

$$c_2 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{(\bar{\epsilon}_0)^4}{d} - \frac{(\bar{\epsilon}_0)^6}{d^2} \left(\frac{9}{2}(\bar{\epsilon}_0)^2 - 2 \right) \right] . \quad (117b)$$

Wir sehen also, daß c_2 in endlichen Dimensionen reduziert wird, es wird aber in keiner endlichen Ordnung der $(1/d)$ -Entwicklung auf Null gedrückt.

Wie bereits in Unterabschnitt 4.2.3 erwähnt, gibt es starke analytische [26] und auch numerische [14] Argumente dafür, daß $c_2 = 0$ gilt, d. h. es verschwindet $\bar{d}(g, n = 1)$ schneller als linear in g für $g \rightarrow 0$. Wir folgern daraus, daß die $(1/d)$ -Reihe für c_2 in Gleichung (117b) lediglich eine asymptotische Reihe ist, so daß Gleichung (117a) das falsche Verhalten für $\bar{d}(g \rightarrow 0, n = 1)$ liefert. Das lineare Verhalten von $\bar{d}(g, n)$ für kleine g hat drastische Auswirkungen für die Variationsenergie [26], nämlich den Brinkman-Rice Lokalisierungsübergang (siehe unten).

7.2 Mittlere kinetische Energie und Grundzustandsenergie

Das Verhalten der mittleren kinetischen Energie ($\hat{T}(g, n)$) wird durch die $(1/d)$ -Entwicklung für alle (g, n) richtig wiedergegeben. Dies kann man aus den Abbildungen 7 und 8

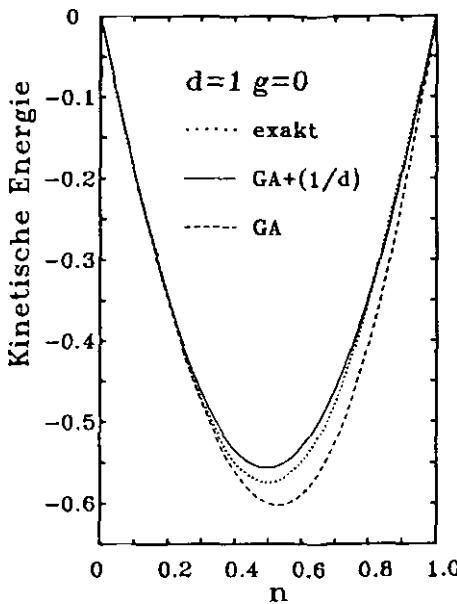


Abbildung 7: Mittlere kinetische Energie in der Gutzwiller-Wellenfunktion in Abhangigkeit von der Bandfellung in $d = 1$ fur den hochkorrelierten Grenzfall ($g = 0$). Das exakte Ergebnis [12] und das Ergebnis der $(1/d)$ -Entwicklung zur Ordnung $(1/d)$ werden verglichen.

ersehen. Dort vergleichen wir unsere Resultate mit dem exakten Ergebnis in $d = 1$ [12] bzw. mit dem numerischen Ergebnis in $d = 2$ [14] fur $g = 0$ in Abhangigkeit von der Bandfellung n . Selbst in diesem extremen Fall (niedrige Dimension d , hochkorreliertes Regime $g = 0$) werden die exakten und numerischen Daten durch die erste Ordnung der $(1/d)$ -Entwicklung ausgezeichnet reproduziert.

Fur $n = 1, g \rightarrow 0$ erhalten wir

$$\frac{1}{L} \langle \hat{T} \rangle = c_1 \bar{\epsilon}_0 g \quad \text{fur } g \rightarrow 0. \quad (118a)$$

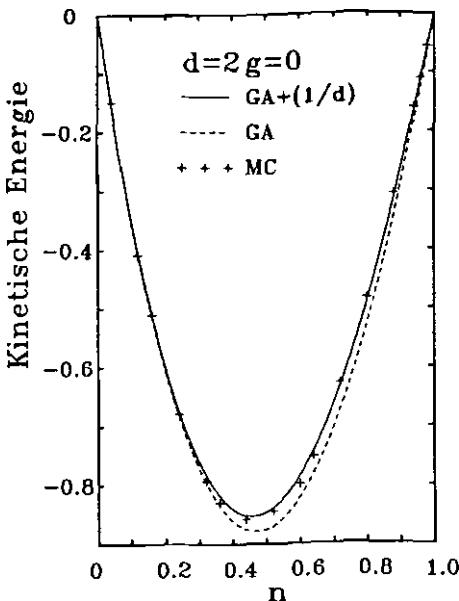


Abbildung 8: Mittlere kinetische Energie in der Gutzwiller-Wellenfunktion in Abhängigkeit von der Bandfüllung in $d = 2$ für den hochkorrelierten Grenzfall ($g = 0$). Numerische Ergebnisse [14] und das Ergebnis der $(1/d)$ -Entwicklung zur Ordnung $(1/d)$ werden verglichen.

In Ordnung $(1/d)^2$ gilt (siehe Gleichungen (113a), (113b))

$$c_1 = 4 \left[1 - \frac{(\bar{\epsilon}_0)^2}{2d} - \left(\frac{1}{2d} \right)^2 (\bar{\epsilon}_0)^4 \left(-3 + 9(\bar{\epsilon}_0)^2 - \bar{\epsilon}_0(\bar{\epsilon}_0^3) \right) \right] \quad . \quad (118b)$$

Da wir nun sowohl $\bar{d}(g, n)$ als auch $\langle \hat{T}(g, n) \rangle$ kennen, können wir jetzt den Erwartungswert des Hamiltonoperators $\langle \hat{H}(g, n) \rangle / L = \langle \hat{T}(g, n) \rangle / L + U \bar{d}(g, n)$ bezüglich g für vorgegebene Wechselwirkung U minimieren und $g^{opt}(U, n)$ bestimmen. Dies liefert dann als Grundzustandsenergie $E(U, n) = \langle \hat{H}(g^{opt}, n) \rangle / L$. Zur Erinnerung sei bemerkt, daß in unserer Notation $U = U/t^* = U/(\sqrt{2d}t)$ ist. In Abbildung 9 zeigen wir das

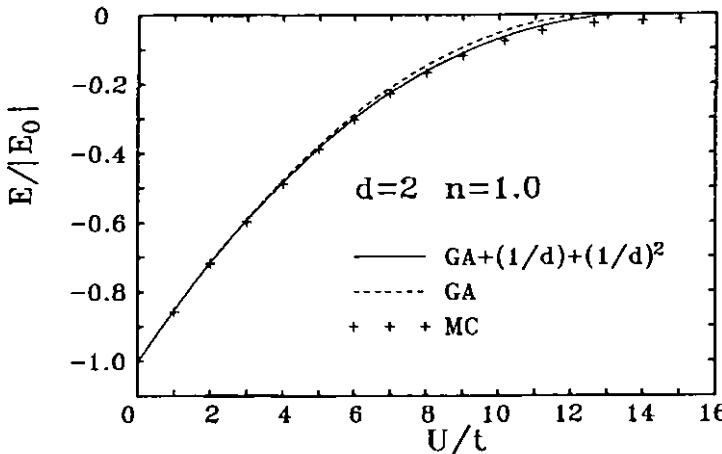


Abbildung 9: Grundzustandsenergie für die Gutzwiller-Wellenfunktion für halbvolles Band in $d = 2$. Das numerische Ergebnis [14] und das Ergebnis der $(1/d)$ -Entwicklung zur Ordnung $(1/d)^2$ werden verglichen.

analytische Ergebnis für $E(U/t, n = 1)$ zusammen mit dem numerischen Resultat in $d = 2$ aus Referenz [14]. In Abbildung 10 zeigen wir das Ergebnis für $E(U/t, n = 1)$ in $d = 3$ zusammen mit der Gutzwiller-Approximation. Weil sowohl $\bar{d}(g, n = 1)$ als auch $\langle \hat{T}(g, n = 1) \rangle$ von g linear abhängen, finden wir einen unphysikalischen Lokalisierungsübergang bei $U = U_c$, d. h. $E(U/t, n = 1) = 0$ für alle $U \geq U_c$. Hierbei ist U_c gegeben durch [26]

$$U_c/t^* = \frac{c_1}{c_2} |\bar{e}_0| \quad . \quad (119)$$

Dieser Übergang ist der bekannte Brinkman-Rice Übergang [7], der in Wirklichkeit *nur* in $d = \infty$ auftritt, der aber *nie* in irgendeiner endlichen Dimension [14,26] existieren sollte. Jede endliche Ordnung der $(1/d)$ -Entwicklung verschiebt U_c lediglich zu einem

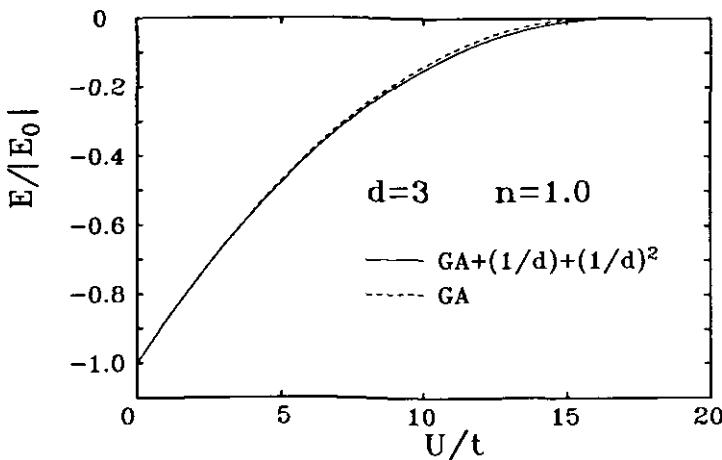


Abbildung 10: Grundzustandsenergie für die Gutzwiller-Wellenfunktion für halbvolles Band in $d = 3$. Das Ergebnis der Gutzwiller-Approximation ($d = \infty$) und das Ergebnis der $(1/d)$ -Entwicklung zur Ordnung $(1/d)^2$ werden verglichen.

größeren Wert. Zur Ordnung $(1/d)^2$ erhalten wir

$$U_c^d = U_c^\infty \left[1 + \frac{1}{d} (\bar{\epsilon}_0)^2 \left((\bar{\epsilon}_0)^2 - \frac{1}{2} \right) + \left(\frac{1}{2d} \right)^2 (\bar{\epsilon}_0)^4 [3 + \bar{\epsilon}_0 (\bar{\epsilon}^3_0) - 19(\bar{\epsilon}_0)^2 + 22(\bar{\epsilon}_0)^4] \right] \quad (120a)$$

$$U_c^\infty = 8 |\bar{\epsilon}_0| \quad . \quad (120b)$$

Die Korrekturen zu U_c^∞ sind tatsächlich sehr klein, d. h. von der Größenordnung 8% in $d = 2$ und 4% in $d = 3$. Das bedeutet, daß man sich auf die Ergebnisse der $(1/d)$ -Entwicklung bis zu Werten von U verlassen kann, die sehr nahe bei U_c^d liegen. Weiterhin kann man aus Abbildung 10 erkennen, daß die Gutzwiller-Approximation für die Gutzwiller-Wellenfunktion eine gute Näherung in $d = 3$ für alle Werte von U darstellt. Demzufolge ist die Gutzwiller-Approximation für die Gutzwiller-Wellenfunktion

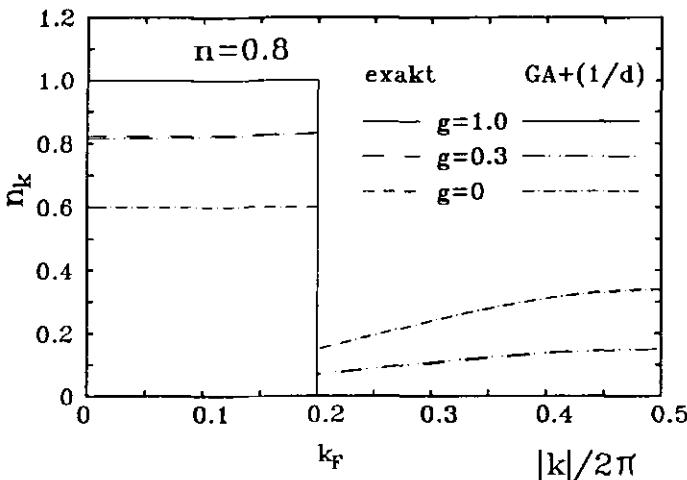


Abbildung 11: Impulsverteilung in der Gutzwiller-Wellenfunktion für $n = 0.8$ in $d = 1$ für verschiedene Wechselwirkungsparameter g . Das exakte Ergebnis [12] und das Ergebnis der $(1/d)$ -Entwicklung zur Ordnung $(1/d)$ werden verglichen.

eine quantitativ sehr gute Näherung für alle U , die nicht zu nahe bei U_c^∞ liegen.

7.3 Impulsverteilung und Sprung an der Fermikante

Als letztes Beispiel für die Anwendbarkeit der $(1/d)$ -Entwicklung betrachten wir die Impulsverteilung. Wir vergleichen $\langle \hat{n}_{k\sigma} \rangle$ in Gleichung (109b) mit dem exakten Ergebnis in $d = 1$. Abbildung 11 zeigt den Fall $n = 0.8$, Abbildung 12 den Fall $n = 1.0$ für verschiedene Werte von g . Die Kurven stimmen sehr gut überein – nicht nur qualitativ, sondern sogar quantitativ. Es ist klar, daß die Übereinstimmung für $d = 2, 3$ sogar noch besser sein wird [15]. Es ist beachtenswert, daß unsere Entwicklung die unerwar-

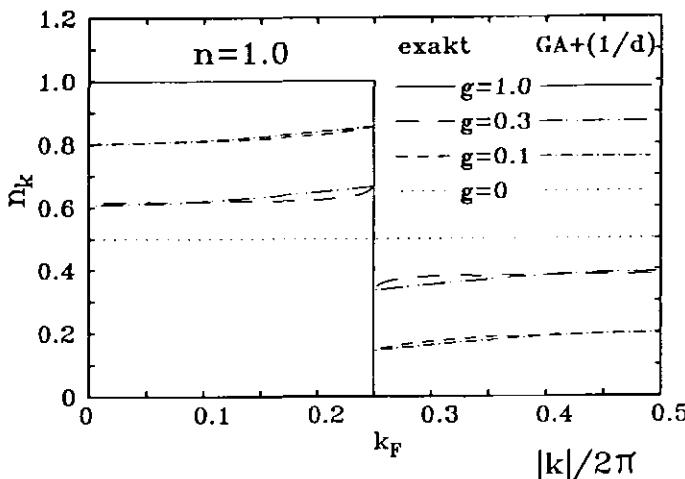


Abbildung 12: Impulsverteilung in der Gutzwiller-Wellenfunktion für $n = 1.0$ in $d = 1$ für verschiedene Wechselwirkungsparameter g . Das exakte Ergebnis [12] und das Ergebnis der $(1/d)$ -Entwicklung zur Ordnung $(1/d)$ werden verglichen.

tete Krümmung von $\langle \hat{n}_{k\sigma} \rangle$ in der Gutzwiller-Wellenfunktion richtig wiedergibt, was mit anderen Methoden nicht gelang [54].

Eine der physikalisch interessantesten Größen ist der Sprung an der Fermikante, wo $\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_F$ gilt. Grund hierfür ist, daß der Vergrößerungsfaktor für die effektive Masse m^*/m im Rahmen der Fermiflüssigkeitstheorie [8] proportional zu q^{-1} ist, d. h. es divergiert die effektive Masse für $q \rightarrow 0$ (Lokalisierungsübergang). Weil nun aber $q^{-1} \propto (1/g)$ gilt, erhalten wir eine divergente effektive Masse für $g \rightarrow 0$. Die obige Diskussion zeigt uns, daß g innerhalb eines kleinen Bereichs um $U \rightarrow U_c$ auf sehr kleine Werte abfällt. Das bedeutet, daß m^* sehr schnell ansteigt und die Fermionen scheinbar

lokalisiert werden („fast lokalisierte Fermiflüssigkeit“ [8]). Wir bestätigen daher die Argumentation in Referenz [10]: das Bild fast lokalisierter Fermionen bleibt richtig, auch wenn der Lokalisierungsumgang in Wirklichkeit gar nicht auftritt.

Wenn man dasselbe Konzept auf einen Metall-Isolator-Übergang anwendet [7], bedeutet dies, daß in allen endlichen Dimensionen die Leitfähigkeit auch in der Gutzwiller-Wellenfunktion *nicht* auf Null abfällt. Sie bleibt klein aber endlich für alle $U < \infty$ und ein Metall-Isolator-Übergang im Sinne von Mott und Hubbard [1,4] tritt nicht auf.

8 Neue Variationswellenfunktionen

Im letzten Kapitel haben wir gezeigt, daß die $(1/d)$ -Entwicklung im Falle der Gutzwiller-Wellenfunktion eine quantitative Berechnung von Erwartungswerten in endlichen Dimensionen erlaubt. Wir folgern daraus, daß das Konzept hoher Dimensionen auch für kompliziertere Gutzwiller-korrelierte Variationswellenfunktionen in niedrigen Dimensionen fruchtbar gemacht werden kann. Dies ist deshalb nötig, weil die Gutzwiller-Wellenfunktion sicher eine zu einfache Variationswellenfunktion ist und beispielsweise den im Hubbard-Modell erwarteten Antiferromagnetismus nicht beschreiben kann. Durch die Berücksichtigung der Möglichkeit einer magnetischen Struktur kann man eine bessere obere Schranke für die Grundzustandsenergie im Hubbard-Modell ableiten als sie von der Gutzwiller-Wellenfunktion geliefert wird.

In diesem Kapitel betrachten wir eine allgemeine Klasse Gutzwiller-korrelierter antiferromagnetischer Spindichtewellen als mögliche Grundzustände für das Hubbard-, t-J- und antiferromagnetische Spin-1/2 Heisenberg-Modell (vgl. auch Unterabschnitt 3.1.2). In Abschnitt 8.1 schlagen wir eine neue Variationswellenfunktion für das Hubbard- und das t-J-Modell vor, die die Form der optimalen Gutzwiller-korrelierten antiferromagnetischen Spindichtewelle in $d = \infty$ hat. In Abschnitt 8.2 schlagen wir eine weitere Variationswellenfunktion für das Heisenberg-Modell vor, wofür wir bis zur Ordnung $(1/d)$ rechnen.

8.1 Hubbard- und t-J-Modell

Für numerische Untersuchungen haben Yokoyama und Shiba [14] folgende Gutzwiller-korrelierte Spindichtewelle $|\Psi_g\rangle$ verwendet

$$|\Psi_g\rangle = g^{\hat{D}} |\Psi_0\rangle = g^{\hat{D}} \prod_{\epsilon(\mathbf{k}) \leq \epsilon_F} \prod_{\sigma} \left[u_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^+ + \sigma v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^+ \right] |\text{Vakuum}\rangle , \quad (121)$$

wobei sie eine Hartree-Fock Form für $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ angenommen haben. Wir haben in Unterabschnitt 3.1.2 die optimale Gutzwiller-korrelierte antiferromagnetische Spindichtewelle in $d = \infty$ bestimmt. Aus diesen Ergebnissen kann man ersehen, daß die von Yokoyama und Shiba verwendete Parametrisierung in hohen Dimensionen nicht optimal ist. Es ist möglich, die in Unterabschnitt 3.1.2 gewonnene Wellenfunktion in die Form von Gleichung (121) umzuschreiben. Die Parameter $\tilde{u}_{\mathbf{k}}, \tilde{v}_{\mathbf{k}}$ in den Gleichungen (48b), (50) und $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ in Gleichung (121) sind durch die folgende einfache Lineartransformation miteinander verknüpft

$$u_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\gamma} \right) \tilde{u}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\gamma} \right) \tilde{v}_{\mathbf{k}} \quad (122a)$$

$$v_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\gamma} \right) \tilde{u}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\gamma} \right) \tilde{v}_{\mathbf{k}} , \quad (122b)$$

wobei wir

$$\gamma = \left(\frac{4 - x(n + m_0)(2 - n + m_0)}{4 - x(n - m_0)(2 - n - m_0)} \right)^{1/2} \quad (123a)$$

$$x = x_1 = \frac{4(4\bar{d} - n^2 + m_0^2)}{(n^2 - m_0^2)[(2 - n)^2 - m_0^2]} \quad (123b)$$

gesetzt haben. Die letztere der beiden Gleichungen folgt aus Gleichung (45). Hierbei ist n die Teilchendichte im System. Die Untergittermagnetisierung in $|\Phi_0\rangle$ ist mit m_0 bezeichnet, wobei $|\Psi_g\rangle = g^{\hat{K}} |\Phi_0\rangle$ gilt. In $d = \infty$ ist die Untergittermagnetisierung m des wechselwirkenden Systems durch $m = m_0$ gegeben. Wir haben

$$m = m_0 = \frac{2}{L} \sum_{\epsilon(\mathbf{k}) \leq \epsilon_F} \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + [\epsilon(\mathbf{k})]^2}} . \quad (124)$$

Gleichung (121) und die Parametrisierung in den Gleichungen (122a) und (122b) definieren jetzt eine neue Variationswellenfunktion, die nur mehr von zwei Variationsparametern (Δ, g) abhängt, da $\tilde{u}_{\mathbf{k}}$ und $\tilde{v}_{\mathbf{k}}$ gemäß Gleichungen (48b) und (50) lauten

$$\begin{aligned}\widetilde{u}_{\mathbf{k}} &= \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{|\epsilon(\mathbf{k})|}{\sqrt{[\epsilon(\mathbf{k})]^2 + \Delta^2}} \right)} \\ \widetilde{v}_{\mathbf{k}} &= -\text{sgn}(\epsilon(\mathbf{k})) \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{|\epsilon(\mathbf{k})|}{\sqrt{[\epsilon(\mathbf{k})]^2 + \Delta^2}} \right)}\end{aligned}\quad (125)$$

Diese einfache Wellenfunktion kann nunmehr in Dimensionen $d < \infty$ numerisch untersucht werden. Wir sind davon überzeugt, daß es möglich ist, die Resultate früherer numerischer Rechnungen von Yokoyama und Shiba [14] zu verbessern, wenn man eine Variationswellenfunktion verwendet, die die Form der *optimalen* Gutzwiller-korrierten antiferromagnetischen Spindichtewelle in $d = \infty$ hat. Entsprechende Rechnungen dazu werden bereits in Angriff genommen [66].

Der Formalismus in Kapitel 3 kann auch auf das t-J-Modell [35-37] angewendet werden. Dieses Modell kann man aus dem Hubbard-Modell erhalten, indem man für große Wechselwirkungsstärke U in entarteter Störungstheorie in $t/U \rightarrow 0$ einen effektiven Hamiltonoperator ableitet und sich auf den Unterraum ohne doppelbesetzte Gitterplätze beschränkt. Wir können diese Einschränkung dadurch erfüllen, daß wir in unseren Ausdrücken $g = 0$ setzen. Dadurch wird der Gutzwiller-Korrelator $g^{\hat{D}}$ zum Projektor auf diesen Unterraum, $\hat{P}_{\hat{d}=0} = \prod_i (1 - \hat{D}_i)$. Das t-J-Modell lautet dann

$$\hat{H}_{t,J} = \hat{P}_{\hat{d}=0} \left[\sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon(\mathbf{k}) \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{J^*}{2d} \sum_{\langle ij \rangle} (\hat{S}_i \hat{S}_j - \hat{n}_i \hat{n}_j) \right] \hat{P}_{\hat{d}=0} \quad ; \quad J^* = 4 \frac{(t^*)^2}{U}, \quad (126)$$

wobei \hat{S}_i der Vektoroperator für Spin-1/2 aus Gleichungen (75a) und (75e) ist. Im Modell sind Anteile in Ordnung $(t^*)^2/U$, die von drei verschiedenen Gitterplätzen herrühren („3-site-Beiträge“), nicht mitberücksichtigt. Zur Begründung führen Zhang et al. [36] an, daß das t-J-Modell nur in der Nähe halber Bandfüllung studiert werden soll. Da die 3-site-Beiträge proportional zur (geringen) Löcherkonzentration sind, werden sie gegen die kinetische Energie und den Spinterm vernachlässigt. Diese Argumentation ist

natürlich nur für $J \ll t$ zulässig.

Alle Größen sind so definiert, daß wir endliche Ergebnisse in $d = \infty$ erhalten (siehe hierzu auch Abschnitt 4.2). Wenden wir unsere allgemeine Gutzwiller-korrelierte antiferromagnetische Spindichtewelle auf diesen Hamiltonoperator an, so erhalten wir in $d = \infty$ ($n \leq 1$)

$$\langle \hat{H}_{tJ} \rangle / L = 2q(m_0) \frac{1}{L} \sum_{\epsilon(\mathbf{k}) \leq \epsilon_F} \epsilon(\mathbf{k}) \sqrt{1 - \tilde{\theta}_{\mathbf{k}}^2} - \frac{J^*}{4} (m_0^2 + n^2) \quad . \quad (127)$$

In $d = \infty$ ist die Untergittermagnetisierung durch $m = m_0 = (2/L) \sum_{\epsilon(\mathbf{k}) \leq \epsilon_F} \tilde{\theta}_{\mathbf{k}}$ gegeben und es gilt $q(m_0) = 2(1 - n)/\sqrt{(2 - n)^2 - m_0^2}$. Führen wir das Variationsverfahren durch, so erhalten wir ebenfalls die Hartree-Fock Form der Gleichung (125) für $\tilde{u}_{\mathbf{k}}$, $\tilde{v}_{\mathbf{k}}$. Die Parameter $u_{\mathbf{k}}$ und $v_{\mathbf{k}}$ folgen aus den Gleichungen (122a) und (122b). Wegen $g = 0$ vereinfacht sich Gleichung (123a) zu $\gamma = \sqrt{(2 - n + m_0)/(2 - n - m_0)}$. Zu beachten ist, daß der einzige Beitrag der Spinwechselwirkung in Gleichung (127) von der gebrochenen Spinsymmetrie herröhrt. Alle Fluktuationen sind in $d = \infty$ unterdrückt (dasselbe würde für die 3-site-Beiträge gelten). Diese Effekte sind aber für $d < \infty$ sehr wichtig und die $(1/d)$ -Korrekturen sollten für eine gründliche Behandlung des t-J-Modells miteinbezogen werden. Für den Spezialfall halber Bandfüllung im t-J-Modell werden wir diese Untersuchung in Abschnitt 8.2 durchführen.

Der Vorschlag einer neuen Variationswellenfunktion in Gleichung (121), spezifiziert durch die Gleichungen (122)-(125), gilt also sowohl für das Hubbard- wie für das t-J-Modell. Die Qualität dieser Variationswellenfunktion wird jetzt in niedrigen Dimensionen numerisch untersucht werden [66]. Es sei an dieser Stelle am Rande vermerkt, daß der Unterschied zwischen der vorgeschlagenen und bisher verwendeten Wellenfunktion nur für $\gamma \ll 1$, Gleichung (123a), signifikant ist. Hierzu müssen m_0 und x erheblich von Null abweichen, d. h. es muß $\Delta \gg 1$ und $g \ll 1$ gelten. Da dies nur für größeres U der

Fall ist, wird man erst ab $U \simeq 4t^*$ einen Unterschied zwischen den beiden Wellenfunktionen feststellen können.

8.2 Spin-1/2-Heisenberg-Modell

Wir leiten jetzt die optimale Gutzwiller-korrierte antiferromagnetische Spindichtewelle für das Spin-1/2 Heisenberg-Modell zur Ordnung (1/d) ab. Das t-J-Modell reduziert sich zu diesem Hamiltonian im Falle halber Bandfüllung. Der Hamilton Operator ist durch folgende Gleichung gegeben

$$\hat{H}_{Heis} = \frac{J^*}{2d} \sum_{\langle ij \rangle} \hat{S}_i \hat{S}_j \quad ; \quad J^* = \frac{4(t^*)^2}{U} \quad , \quad (128)$$

wobei wir eine triviale additive Konstante weggelassen haben. Auf den hier betrachteten AB-Gittern ist der exakte Grundzustand dieses Modells in $d = \infty$ bekannt. Es ist der Néel-Zustand [67,68], den man aus der Gutzwiller-korrierten antiferromagnetischen Spindichtewelle für $u_{\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}} = 1/\sqrt{2}$ erhält. In diesem Fall gibt es in der Startwellenfunktion $|\Psi_0\rangle$ (Gleichung (121)) keine Doppelbesetzungen und der Gutzwiller Projektor $P_{d=0} = \prod_i (1 - \hat{D}_i)$ ist irrelevant.

In den folgenden drei Unterabschnitten werden wir zunächst die Berechnung der optimalen Gutzwiller-korrierten antiferromagnetischen Spindichtewelle vorführen, wobei wir technische Details in den Appendices behandeln. Danach vergleichen wir unsere Ergebnisse mit den Resultaten anderer Verfahren zur Bestimmung von Grundzustandseigenschaften des Heisenberg-Modells. Im dritten Unterabschnitt werden wir die optimale Gutzwiller-korrierte antiferromagnetische Spindichtewelle zu interpretieren versuchen.

8.2.1 Optimale Gutzwiller-korrelierte antiferromagnetische Spindichtewelle zur Ordnung 1/d

Die Berechnung der optimalen Form der $u_{\mathbf{k}}$, $v_{\mathbf{k}}$ zur Ordnung (1/d) für $|\Psi_{g=0}\rangle$ in Gleichung (121) ist in den Appendices A1 und A2 durchgeführt. Aus Gleichung (A1.11a)–(A1.11c) erhalten wir

$$m = 1 - \frac{1}{d} \langle \epsilon^2 \rangle^2 \quad (129a)$$

$$\langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+\tau} \rangle = \left(-\frac{1}{4} \right) \left[1 + \frac{2}{d} \langle \epsilon^2 \rangle (1 - \langle \epsilon^2 \rangle) \right] \quad (129b)$$

$$\langle \epsilon^2 \rangle = 2 \int_{-\epsilon_{cut}}^0 d\epsilon \rho(\epsilon) \epsilon^2 , \quad (129c)$$

wobei ϵ_{cut} der einzige noch verbleibende Variationsparameter ist (ähnlich wie in Abschnitt 3.1.2 kann man also die funktionale Form der unendlich vielen Variationsparameter $u_{\mathbf{k}}$, $v_{\mathbf{k}}$ in Abhängigkeit eines Parameters schreiben). Der analytische Ausdruck von $u_{\mathbf{k}} = u(\epsilon(\mathbf{k})) = u(\epsilon)$, $v_{\mathbf{k}} = v(\epsilon(\mathbf{k})) = v(\epsilon)$ in Gleichung (121) ist durch

$$u(\epsilon), v(\epsilon) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{2}} & \text{für } -\epsilon_B \leq \epsilon \leq -\epsilon_{cut} \\ \sqrt{\frac{1}{2}} \left(1 \pm \frac{|\epsilon|}{\sqrt{\langle \epsilon^2 \rangle}} \right) & \text{für } -\epsilon_{cut} \leq \epsilon \leq 0 \end{cases} \quad (130)$$

gegeben, wobei $-\epsilon_B = -\sqrt{2d}$ die untere Bandkante bezeichnet.

Die Grundzustandsergie zur Ordnung (1/d) erhält man aus Gleichung (129b), die man durch die Wahl $\langle \epsilon^2 \rangle = 1/2$ ganz einfach optimieren kann. Zur Ordnung (1/d) findet man daher

$$m_{opt} = 1 - \frac{1}{4d} \quad (131a)$$

$$\langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+\tau} \rangle_{opt} = \left(-\frac{1}{4} \right) \left(1 + \frac{1}{2d} \right) . \quad (131b)$$

Wenden wir diese Beziehungen in $d = 2$ an, so finden wir $m_{opt} = 0.875$ und $\langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+r} \rangle_{opt} = -0.3125$. Diese Ergebnisse werden wir in Unterabschnitt 8.2.2 mit denen anderer Verfahren vergleichen.

Man kann sich fragen, ob man aus den Resultaten zur Ordnung $(1/d)$ wieder den Neél-Zustand erhält, wenn man $d = \infty$ setzt. Da ϵ_{cut} in allen Dimensionen von Null verschieden ist ($\epsilon_{cut} \simeq 1.5$ für $d \geq 2$), gibt es in allen Dimensionen Elektronenpaare in der Energieschale $-\epsilon_{cut} \leq \epsilon \leq 0$, für die $u(\epsilon), v(\epsilon) \neq \sqrt{1/2}$ gilt. Der Beitrag dieser Energieschale zu $\langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+r} \rangle$ ist stets von Ordnung $(1/d)$ und verschwindet für $d = \infty$, so daß wir wieder einen Zustand mit der Energie des Neél-Zustandes erhalten. Im Limes $d = \infty$ sind jedoch sehr viele Zustände mit dem Neél-Zustand entartet (antiferromagnetische Magnonen haben eine Energie der Ordnung $(1/d)$ [47]). Wesentlich ist also, daß diese Energieschale für alle Dimensionen $d \leq \infty$ existiert. Die formale Ableitung dieses Resultats als $(1/d)$ -Entwicklung um den Neél-Zustand war deshalb möglich, weil wir zuerst den Limes $g \rightarrow 0$ und *danach* den Limes $d \rightarrow \infty$ ausgeführt haben.

8.2.2 Vergleich mit anderen Verfahren

Es gibt verschiedene Ansätze, $\langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+r} \rangle$ exakt zu berechnen oder zumindest Schranken für diese Größe anzugeben. Tabelle 2 zeigt einige der Monte-Carlo Ergebnisse für den Hamiltonoperator in $d = 2$ (exakte Diagonalisierung endlicher Systeme, Monte-Carlo bei endlichen Temperaturen und bei $T = 0$) im Vergleich mit Resultaten von Variations-Monte-Carlo. Aus diesen Untersuchungen kann man schließen, daß der exakte Wert im Bereich $-0.335 \leq \langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+r} \rangle \leq -0.334$ liegt. Eine rigoros abgeleitete untere Grenze wurde von Anderson [67] angegeben, nämlich $-(1/4)(1 + (1/d))$, d. h. -0.375 in $d = 2$. Analytische obere Grenzen aus dem Variationsprinzip sind in Tabelle 3 angegeben. Diese Tabelle enthält auch die Ergebnisse analytischer (im wesentlichen perturbativer)

Tabelle 2: Vergleich von Diagonalisierung endlicher Systeme/ Monte-Carlo versus Variations-Monte-Carlo Ergebnissen für $\langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+\tau} \rangle$ in $d = 2$

Diagonalisierung endlicher Systeme, Monte-Carlo	Variations-Monte-Carlo
–0.336 [69]	–0.328 [69]
–0.3364 [70]	–0.3319 [74]
–0.3336 [71]	–0.321 [14]
–0.3350 [72]	
–0.33459 [73]	

Methoden. Die beste obere Schranke aus dem Variationsprinzip ist –0.3344, die von Liang et al. [79] angegeben wurde. Diese Gruppe untersuchte eine Variationswellenfunktion mit drei Parametern auf einem 180×180 Gitter mit Variations-Monte Carlo. Sachdev [78] erhielt durch eine analytische Rechnung mit einer einparametrischen Variationswellenfunktion die obere Schranke –0.3317.

Wir sind der Überzeugung, daß die Gutzwiller-korrelierte antiferromagnetische Spin-dichtewelle $|\Psi_{g=0}\rangle$, die in Gleichung (121) mit $u_{\mathbf{k}} = u(\epsilon(\mathbf{k})) = u(\epsilon)$, $v_{\mathbf{k}} = v(\epsilon(\mathbf{k})) = v(\epsilon)$ aus Gleichung (130) definiert ist, ein Ergebnis für $\langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+\tau} \rangle$ liefert, das sehr nahe an diese Werte herankommt. Hierzu ist eine numerische Auswertung in $d = 2$ erforderlich. Entsprechende Anstrengungen werden von Shiba [66] in Angriff genommen. Die Überzeugung, daß wir eine sehr gute Wellenfunktion gefunden haben, wird unterstützt durch einen Vergleich der optimalen Gutzwiller-korrelierten antiferromagnetischen Spin-dichtewelle mit der von Yokoyama und Shiba in Referenz [14] numerisch untersuchten Variationswellenfunktion. Diese Gruppe verwendete

Tabelle 3: Vergleich von Ergebnissen aus Variations- und störungstheoretischen Methoden für $\langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+\tau} \rangle$ in $d = 2$

Variationsverfahren	Störungstheoretische Methoden
-0.324 [75]	-0.358 [80]
-0.322 [76]	-0.332 [81]
-0.3221 [77]	-0.3336 [82]
-0.3317 [78]	-0.3337 [83]
-0.3344 [79]	-0.3348 [84]

$$u_{YS}(\epsilon), v_{YS}(\epsilon) = \sqrt{\frac{1}{2}} \sqrt{1 \pm \frac{2|\epsilon|}{\sqrt{4\epsilon^2 + \Delta_{YS}^2}}} , \quad (132)$$

wobei Δ_{YS} ihr Variationsparameter ist. Identifizieren wir $\Delta_{YS} \equiv \sqrt{\langle \epsilon^2 \rangle} \leq 1$, so kann man erkennen, daß beide Variationswellenfunktionen für $|\epsilon| \ll \Delta_{YS}$, d. h. in der Umgebung von $\epsilon = 0$, tatsächlich übereinstimmen. Sie unterscheiden sich aber erheblich für $|\epsilon| \gg \Delta_{YS}$. In diesem Bereich (in der Nähe der Bandkante also) haben Yokoyama und Shiba die Parameterwerte $u_{YS}(\epsilon) \simeq 1, v_{YS}(\epsilon) \simeq 0$, d. h. die Yokoyama-Shiba-Variationswellenfunktion beschreibt einen projizierten Fermi-See *freier* Elektronenzustände. Für die optimale Gutzwiller-korrierte antiferromagnetische Spindichtewelle finden wir stattdessen $u(\epsilon), v(\epsilon) = 1/\sqrt{2}$ nahe der Bandkante, d. h. wir beschreiben projizierte *antiferromagnetisch geordnete* Zustände. Dieser Unterschied gibt unserer Überzeugung nach die Möglichkeit, die guten Ergebnisse von Yokoyama und Shiba [14] weiter zu verbessern. Diese Gruppe erhielt für ihre Wellenfunktion den Wert $\langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+\tau} \rangle = -0.321$.

Jetzt vergleichen wir unsere Resultate für die Gutzwiller-korrierte antiferromagne-

Tabelle 4: Ergebnisse der Spinwellentheorie für $\langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+\tau} \rangle$ in $d = 2$ für $S = 1/2$

Parameter und Ordnung der Entwicklung	$\langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+\tau} \rangle$
$(1/d)$	-0.3125 [85,86]
$(1/Sz)$	-0.329 [85,86]
$(1/d)^2$	-0.3340 [85,87]
$(1/Sz)^2$	-0.3352 [85,87]

tische Spindichtewelle mit denen der linearen Spinwellentheorie. Diese Theorie verwendet $(1/Sz)$ als kleinen Parameter für eine Reihenentwicklung für das Heisenberg-Modell. Hierbei ist $z = 2d$ die Zahl nächster Nachbarn und S der Gesamtspin (üblicherweise wird S als „groß“ angenommen). Die Spinwellentheorie basiert auf einer bosonischen Darstellung des Heisenberg-Modells (Holstein-Primakoff-Transformation [47]), während wir eine fermionische Darstellung verwenden. Der analytische Ausdruck für $\langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+\tau} \rangle$ zur Ordnung $(1/Sz)^2$ kann für $S = 1/2$ folgendermaßen geschrieben werden [85,87]

$$\langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+\tau} \rangle = \left(-\frac{1}{4} \right) [1 + 2c_0 + c_0^2] \quad (133a)$$

$$c_0 = \int_{-\epsilon_B}^{\epsilon_B} d\epsilon \rho(\epsilon) \left[1 - \sqrt{1 - \frac{\epsilon^2}{2d}} \right] \quad (133b)$$

Es ist klar, daß die Ergebnisse einer $(1/Sz)$ -Entwicklung sich von denen einer $(1/d)$ -Entwicklung unterscheiden. Zur Ordnung $(1/d)^2$ erhalten wir

$$c_0 = \frac{1}{4d} + \frac{1}{16d^2} \int_{-\epsilon_B}^{\epsilon_B} d\epsilon \rho(\epsilon) \epsilon^4 \quad (134)$$

Das bedeutet insbesondere, daß die Ergebnisse für $\langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+\tau} \rangle$ und m für die Gutzwiller-korrelierte antiferromagnetische Spindichtewelle mit denen der linearen Spinwellentheorie zur Ordnung $(1/d)$ völlig übereinstimmen. In Tabelle 4 stellen wir die Resultate

dieser Theorie gemäß Gleichung (133) in $d = 2$ dar. Das $(1/d)^2$ -Ergebnis in linearer Spinwellentheorie kommt dem erwarteten exakten Ergebnis in $d = 2$ sehr nahe. Dies unterstützt unsere Überzeugung, daß wir auch für die oben abgeleitete Gutzwiller-korrelierte antiferromagnetische Spindichtewelle eine sehr gute Übereinstimmung mit den exakten Werten erhalten.

8.2.3 Interpretation der neuen Wellenfunktion

Wir wollen jetzt die Physik interpretieren, die durch die optimale Gutzwiller-korrelierte antiferromagnetische Spindichtewelle beschrieben wird. In $d = \infty$ sind alle Zustände in der Neél-Ordnung „eingefroren“ (\uparrow -Spins auf dem A -, \downarrow -Spins auf dem B -Untergitter). In endlichen Dimensionen wird es aber Spinflips geben oder –in einem Bild beweglicher Fermionen– die \uparrow - und \downarrow -Elektronen werden sich aufgrund (virtueller) Hüpfprozesse aus der Neélordnung herausbewegen. Die Problemstellung ist nun die folgende: *wie* muß die starre Kopplung zwischen den Elektronenanteilen \hat{c}_k^+ und \hat{c}_{k+Q}^+ aufgebrochen werden, um die Wellenfunktion mit niedrigster Energie zu finden?

Da der Grundzustand des Hubbard-Modells für halbvolles Band für $U \rightarrow \infty$ in den Grundzustand des Heisenberg-Modells übergeht, liegt es nahe, das Bild beweglicher Elektronen mit Dispersionsrelation $\epsilon(\mathbf{k})$ zugrunde zu legen. Die antiferromagnetische Hartree-Fock-Lösung des Hubbard-Modells liefert für $U > 0$ zwei Bänder in der magnetischen Brillouinzone, deren Rand durch $\epsilon(\mathbf{k}) = 0$ gegeben ist. Im Hartree-Fock Grundzustand ist das untere der beiden Bänder bis zum Rand der magnetischen Brillouinzone vollständig gefüllt und beschreibt für $U = \infty$ den Neél-Zustand, der in $d = \infty$ der exakte Grundzustand des Heisenberg-Modells ist. Für $d < \infty$ ist der Neél-Zustand nicht mehr der exakte Grundzustand des Heisenberg-Modells, d. h. wir erwarten Anregungen von Zuständen des unteren Bandes und zwar in der Nähe der Fermienergie $\epsilon_F = 0$.

dieses Bandes. Daraus folgern wir, daß in der Gutzwiller-korrierten antiferromagnetischen Spindichtewelle Elektronenpaare $\hat{c}_{\mathbf{k}}^{\dagger}, \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{\dagger}$ in der Nähe der unteren Bandkante ($\epsilon(\mathbf{k}) \simeq -|\epsilon_B|$) in starrer Neél-Korrelation bleiben, während die Elektronenpaare $\hat{c}_{\mathbf{p}}^{\dagger}, \hat{c}_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^{\dagger}$ in der Nähe der magnetischen Brilloquinzone ihre Neél-Korrelation schwächen (hier ist $\epsilon(\mathbf{p}) \simeq 0$).

Dieses Abschwächen der Korrelation bedeutet andererseits, daß Doppelbesetzungen erzeugt werden. Diese müssen durch den Gutzwiller-Projektor wieder entfernt werden. Dadurch wird der Vorteil des Aufbrechens der Neél-Korrelation verringert und alle \mathbf{k} -Zustände werden durchmischt. Die Aussagekraft der Argumentation mit zwei gepaarten Elektronen kann daher in Zweifel gezogen werden. Man kann aber argumentieren, daß der Gutzwiller-Projektor alle Elektronenpaare $\hat{c}_{\mathbf{k}}^{\dagger}, \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{\dagger}$ in der gleichen Weise beeinflußt. Das bedeutet, daß die Dispersionsrelation $\epsilon(\mathbf{k})$ des nicht-wechselwirkenden Fermiystems entscheidet, welche der $\hat{c}_{\mathbf{k}}^{\dagger}, \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{\dagger}$ -Paare aufgebrochen werden müssen. Entlang dieser Argumentationskette kann man ein intuitives Verständnis dafür entwickeln, warum es eine scharfe Abschneideenergie ϵ_{cut} in den Parametern $u(\epsilon), v(\epsilon)$ gibt, die die Gutzwiller-korrierte antiferromagnetische Spindichtewelle bestimmen. ϵ_{cut} ist einfach diejenige Energie, oberhalb derer die Neél-Korrelationen aufgebrochen werden.

Weil die Gutzwiller-korrierte antiferromagnetische Spindichtewelle auf einer fermionischen Beschreibung des Spin-1/2 Heisenberg-Models beruht, ist man versucht, ϵ_{cut} als eine Fermienergie von Spin-1/2 Quasiteilchen („Spinonen“ [37,88]) zu interpretieren. Einerseits erhält man die Abschneideenergie ϵ_{cut} aus einer analytischen Rechnung mit unendlich vielen Variationsparametern, setzt diese Energie also keineswegs per Hand hinein. Zudem sind die Ergebnisse zur Ordnung ($1/d$) für diese Wellenfunktion recht zufriedenstellend, da wir die Resultate der linearen Spinwellentheorie für die Nächst-Nachbar-Spinkorrelation $\langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+\tau} \rangle$ und die Untergittermagnetisierung m

in dieser Ordnung erhalten. Andererseits ist die Gutzwiller-korrelierte antiferromagnetische Spindichtewelle lediglich ein Variationszustand, so daß man lediglich eine genäherte Beschreibung des wahren Grundzustandes des Heisenberg-Modells erhalten kann. Außerdem ist der Begriff einer Fermienergie eng mit den Anregungen eines Systems verknüpft, deren Beschreibung außerhalb des Rahmens von Grundzustands-Variationswellenfunktionen liegt. Schließlich gilt es noch zu bedenken, daß wir mit hochkorrelierten Variationswellenfunktionen $|\Psi_{g=0}\rangle = \prod_i (1 - \hat{D}_i) |\Psi_0\rangle$ arbeiten, die nicht nur die Einteilchen-Produktwellenfunktion $|\Psi_0\rangle$, sondern auch den Gutzwiller-Projektor enthalten. Demzufolge ist die Physik in $|\Psi_{g=0}\rangle$ nicht nur durch diejenige in $|\Psi_0\rangle$ gegeben, sondern auch durch den Gutzwiller-Korrelator bestimmt. Man sollte deshalb die Eigenschaften der Einteilchen-Produktwellenfunktion $|\Psi_0\rangle$ nicht überinterpretieren.

9 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit haben wir einen Formalismus vorgestellt, mit dem man allgemeine Gutzwiller-korrelierte Variationswellenfunktionen in endlichen Dimensionen d mittels einer $(1/d)$ -Entwicklung untersuchen kann. Das Konzept hoher Dimensionen wurde durch Metzner und Vollhardt [20,25] eingeführt. Für den Spezialfall der Gutzwiller-Wellenfunktion zeigten sie [12,20,25], daß die Gutzwiller-Approximation für die Gutzwiller-Wellenfunktion in $d = \infty$ exakt wird. Diese Erkenntnis eröffnete damit erstmals den Weg, die Gutzwiller-Approximation *systematisch und kontrolliert* auf verallgemeinerte Gutzwiller-korrelierte Variationswellenfunktion zu erweitern. Unter Verwendung eines Vieleilchen-Graphenformalismus erhielten diese Autoren in $d = \infty$ ein geschlossenes, aber unendlichdimensionales Gleichungssystem, dessen Lösung die Energie für solche Variationswellenfunktionen bestimmt. Die Lösung des Systems war für die Gutzwiller-Wellenfunktion (Gutzwiller korrelierter Fermisee) und die Gutzwiller-korrelierte antiferromagnetische Spindichtewelle möglich, nicht allerdings für beliebige Variationswellenfunktionen. Die Berechnung von $(1/d)$ -Korrekturen war im Formalismus von Metzner und Vollhardt selbst für die einfache Gutzwiller-Wellenfunktion sehr mühsam [43]. Für kompliziertere Gutzwiller-korrelierte Wellenfunktionen ist eine $(1/d)$ -Entwicklung in ihrem Formalismus praktisch undurchführbar.

Um den Limes hoher Dimensionen etwas ökonomischer auszunutzen, verwendeten wir dieselben Graphen wie Metzner und Vollhardt, wir haben aber den „Vertices“ und „Linien“ eine neue Interpretation gegeben. Dies wurde dadurch erreicht, daß wir den Gutzwiller-Korrelator geeignet umgeschrieben haben, ohne daß wir weitere Spezifikationen über die Variationswellenfunktionen treffen mußten. Dadurch konnte das Verfahren auf *allgemeine* Gutzwiller-korrelierte Variationswellenfunktionen angewendet werden. Als Konsequenz der neuen Interpretation von Linien ergab sich, daß wir in $d = \infty$

keinen Beitrag der Selbstenergie erhalten haben. Daher konnten wir in diesem Limes die Grundzustandsenergie für das Hubbard- und das periodische Anderson-Modell für allgemeine Gutzwiller-korrelierte Variationswellenfunktionen exakt berechnen, ohne einen Graphen auswerten zu müssen. Neben den allgemeinen Ausdrücken lieferten wir die Resultate für die Gutzwiller-korrelierte antiferromagnetische Spindichtewelle für das Hubbard-Modell und die Rice-Ueda-Brandow-Wellenfunktion für das periodische Anderson-Modell; diese Ergebnisse erhielten wir in unserem Formalismus als einfache Spezialfälle. Die Resultate, die mit Hilfe der Methode von Metzner und Vollhardt erzielt wurden [20,25,27], leiteten wir damit auf eine recht einfache und direkte Weise ab.

Weiterhin betrachteten wir allgemeine Zweiteilchen-Korrelationsfunktionen, für die wir den Graphenformalismus von Gebhard und Vollhardt [13,26] mit den neuen Vertices und Linien verwenden konnten. Für allgemeine Gutzwiller-korrelierte Variationswellenfunktionen gaben wir die zur Ordnung $(1/d)$ exakten Ausdrücke für beliebige Nächst-Nachbar-Korrelationsfunktionen an. Für die Gutzwiller-Wellenfunktion lieferten wir geschlossene Ausdrücke für die Korrelationsfunktionen im Impulsraum und bestätigten so die Resultate, die mit Hilfe der Methode von Metzner und Vollhardt abgeleitet wurden [26].

Wir konnten unsere allgemeinen, systematisch abgeleiteten Ergebnisse mit den Resultaten anderer Gruppen verglichen, die ebenfalls versucht hatten, die Gutzwiller-Approximation zu erweitern. Zur Erinnerung sei noch einmal festgehalten, daß die Gutzwiller-Approximation für die Gutzwiller-Wellenfunktion in $d = \infty$ exakt ist. Wir haben gezeigt, daß Gutzwiller-artige Näherungen im Falle der Rice-Ueda-Brandow Wellenfunktion [28-33] für das periodische Anderson-Modell *ebenfalls* exakt werden [28,30, 33]. Wie bereits von Metzner und Vollhardt gezeigt wurde, ist dies *nicht* mehr der

Fall für kompliziertere, z. B. antiferromagnetische Variationswellenfunktionen [36,53-58]. Beispielsweise wurden in manchen Verfahren [36,58] gar keine Erwartungswerte für eine gegebene Variationswellenfunktion ausgerechnet, sondern man machte einen *Ansatz* für die analytische Form von $\langle \hat{H} \rangle(q_{i\sigma}, \vec{d}_i)$, wobei $q_{i\sigma}$ und \vec{d}_i genähert bestimmt wurden. Diese Art von Näherungen wird *nicht* exakt in $d = \infty$: die Faktoren $q_{i\sigma}$ konnten nicht eindeutig bestimmt werden [36,53,58] und stimmten im allgemeinen nicht mit den exakten Werten in $d = \infty$ überein [36,53]. Außerdem *argumentierte* man nur mit Variationswellenfunktionen, ohne mit ihnen wirklich zu *rechnen*. Demzufolge sind die Variationswellenfunktionen, die für diese Argumentation benutzt wurden, *nicht* identisch zu denen, die wir aus der analytischen Behandlung in $d = \infty$ erhalten haben, selbst wenn in einer Arbeit [58] sogar die „richtigen“ Faktoren $q_{i\sigma}$ bestimmt wurden.

Unsere allgemeinen Ergebnisse erlaubten auch einen detaillierten Vergleich mit den Resultaten von Kotliar und Ruckenstein, die das Hubbard-Modell mit einer „Slave-Boson“-Pfadintegral-Methode angegangen sind. Es zeigte sich, daß unsere $d = \infty$ -Ergebnisse für allgemeine Gutzwiller-korrelierte Variationswellenfunktionen den vollen Satz der Sattelpunktsgleichungen von Kotliar und Ruckenstein reproduzierten. Dies erlaubte neue Einblicke in die Bedeutung einer Sattelpunktsapproximation für ein Vielteilchen-Pfadintegral. Insbesondere wurde dadurch klar, daß der „freien Energie“ von Kotliar und Ruckenstein keine mathematisch wohldefinierte Zustandssumme zugrunde liegt. Sie kann daher nur zur Beschreibung von Tieftemperatur-Eigenschaften von korrelierten Fermisystemen benutzt werden.

Wir gingen über die Gutzwiller-Approximation für die Gutzwiller-Wellenfunktion hinaus und berechneten analytische Ausdrücke für die Einteilchen-Dichtematrix, die mittlere Doppelbesetzung und die Grundzustandsenergie in der Gutzwiller-Wellenfunktion zur Ordnung $(1/d)$ für beliebige Korrelationsstärken und Elektronendichten (nur

ein Graph war dazu nötig); für halbvolles Band haben wir bis zur Ordnung $(1/d)^2$ gerechnet (weitere drei Graphen waren dazu nötig). Keine der sogenannten Cluster-Entwicklungen [54-56], die zur Verbesserung der Gutzwiller-Approximation für die Gutzwiller-Wellenfunktion erdacht wurden, stimmte mit dieser systematischen $(1/d)$ -Entwicklung überein. Wir zeigten, daß bereits die Terme in niedrigster Ordnung in der Entwicklung nach $(1/d)$ ausreichen, um die numerischen Ergebnisse in $d = 2, 3$ von Yokoyama und Shiba [14] quantitativ zu beschreiben. Selbst in $d = 1$ war die Übereinstimmung mit der exakten Lösung [12] überraschend gut. Außerdem zeigte sich, daß die Schlussfolgerungen, die aus der Anwendung der Gutzwiller-Approximation für die Gutzwiller-Wellenfunktion auf normalfluides ^3He gezogen worden sind („fast lokalisierte Fermiflüssigkeit“ [8-10]) von den Ergebnissen der $(1/d)$ -Entwicklung unterstützt werden.

Auf der Grundlage dieser erfolgreichen Anwendung des Konzepts *hoher Dimensionen* auf die Physik *niederdimensionaler* Systeme schlugen wir neue Variationswellenfunktionen für das Hubbard-, t-J- und antiferromagnetische Spin-1/2-Heisenberg Modell vor. Diese Wellenfunktionen haben die analytische Struktur der *optimalen* Gutzwiller-korriktierten antiferromagnetischen Spindichtewelle zur Ordnung $(1/d)^0$ (für das Hubbard und t-J-Modell) bzw. zur Ordnung $(1/d)$ (für das Heisenberg-Modell). Wir fanden sehr gute Übereinstimmung unserer Resultate in Ordnung $(1/d)$ mit Ergebnissen anderer Zugänge zum antiferromagnetischen Spin-1/2 Heisenberg Modell (z. B. lineare Spinwellentheorie). Außerdem hängt diese Wellenfunktion nur von einer Abschneide-energie ab, die man als Fermi-Energie von Spin-1/2-Quasiteilchen („Spinonen“ [37,88]) interpretieren kann. In $d = 2$ sollte diese einparametrische Wellenfunktion eine Variationsenergie liefern, die der exakten Grundzustandsenergie aus Monte-Carlo-Rechnungen sehr nahe kommt. Entsprechende numerische Untersuchungen dazu sind im Gange [66].

Der Formalismus, der in dieser Arbeit vorgestellt wurde, ist auf Wellenfunktionen beschränkt, die eine feste Gesamtteilchenzahl haben. Eine Verallgemeinerung auf projizierte BCS-artige Wellenfunktionen liegt jedoch nahe. Es müssen lediglich weitere lokale „chemische Potentiale“ eingeführt werden, die die lokalen Fluktuationen der Cooperpaardichten „nachregeln“, wenn der Gutzwiller-Korrelator auf die Einteilchen-Produktwellenfunktion wirkt (vergleiche hierzu Gleichung (20)). Diese Wellenfunktionen sind deswegen interessant, weil sie eng mit den ursprünglichen RVB-Zuständen verknüpft sind, die von Anderson [89] als mögliche Grundzustände für die Hochtemperatursupraleiter vorgeschlagen wurden. Die Untersuchungen an diesen Zuständen sind allerdings noch nicht ganz abgeschlossen. Erste Ergebnisse lassen aber darauf schließen, daß die von Zhang et al. [36] vorgeschlagene „renormalized mean-field“-Näherung in $d = \infty$ nicht exakt wird.

Der in dieser Arbeit vorgestellte Zugang zu Gutzwiller-korrierten Variationswellenfunktionen eröffnet auch neue Wege zur Behandlung anderer bisher ungelöster Probleme. Beispielsweise sollte es möglich sein, das Verfahren auf den Fall entarter Bänder zu verallgemeinern. Ziel hierbei wäre der Nachweis, daß sich die Slave-Boson-Ergebnisse von Coleman, Read und Newns [45] aus der Behandlung Gutzwiller-korrieter Wellenfunktionen im Limes hoher Entartung gewinnen lassen, womit auch eine einheitliche Behandlung des periodischen Anderson-Modells mit Entartung im Rahmen Gutzwiller-korrieter Variationswellenfunktionen verbunden wäre. Damit wären die unterschiedlichen Slave-Boson-Versahren auf eine gemeinsame, systematische Grundlage gestellt. Weiterhin besteht die Möglichkeit, eine explizite Zeitabhängigkeit in die Wellenfunktionen einzubauen, um die Resultate von „dynamischen“ Slave-Bosonen zu beschreiben. Ziel hierbei wäre es, ein tieferes Verständnis für die Bedeutung von „Fluktuationen um den Sattelpunkt“ zu erhalten und zu lernen, wie man Zeitabhängigkeiten sinnvoll in Variationswellenfunktionen einbauen kann. Anzustreben wäre auch

die Verallgemeinerung der Methode auf $T = 0$ -Greenfunktionen. Ziel hierbei wäre die Lösung des Hubbard-Modells in $d = \infty$ und die Berechnung von $(1/d)$ -Korrekturen. Es dürfte aber nicht leicht sein, diese ehrgeizigen Ziele zu verwirklichen.

Diese Arbeit hat gezeigt, daß die Betrachtung von Variationswellenfunktionen zur Entwicklung neuer Vielteilchenkonzepte (hier: $d = \infty$) und Rechentechniken (hier: spezielle Kontraktionen und „Linien“) beitragen kann. Es wäre natürlich wünschenswert, wenn diese Betrachtungen auch zur Lösung quantenmechanischer Modelle bzw. zur Entwicklung geeigneter kontrollierter Näherungsverfahren für diese Modelle (z. B. die Durchführung einer $1/d$ -Entwicklung) führen würden.

Anhang

A1 Berechnung der $(1/d)$ -Korrekturen für die Gutzwiller-korrelierte antiferromagnetische Spindichtewelle

Wir entwickeln um den Neél-Zustand, wobei wir kleine Abweichungen von diesem Zustand erwarten. Deshalb sollte $\bar{\theta}_{\mathbf{k}}$ in Gleichung (50) nahe Eins sein, d. h. es sollte $\bar{\theta}_{\mathbf{k}} = 1 - \delta_{\mathbf{k}}/d$ mit $0 \leq \delta_{\mathbf{k}} \ll d$ gelten. Auf diese Weise erzeugen wir Doppelbesetzungen in der Startwellenfunktion $|\Phi_0\rangle$, aus der $|\Psi_g\rangle = g^{\hat{K}} |\Phi_0\rangle = g^{\hat{D}} |\Psi_0\rangle$ gebildet wird. Daher müssen wir von *Beginn an* $g = 0$ setzen. Die Behandlung dieses Grenzfalles ist nicht ganz einfach.

Zunächst haben wir

$$\bar{u}_{\mathbf{k}}, \bar{v}_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1}{2}} \left(1 \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\delta_{\mathbf{k}}}{d}} + \mathcal{O}\left(\frac{\delta_{\mathbf{k}}}{d}\right) \right) \quad (\text{A1.1a})$$

$$m_0 = 1 - \frac{(\Delta m)_0}{d} = 1 - \frac{1}{d} \frac{2}{L} \sum_{\epsilon(\mathbf{k}) \leq 0} \delta_{\mathbf{k}} \quad (\text{A1.1b})$$

$$\bar{\epsilon}_0 = \sqrt{\frac{2}{d}} (\Delta \epsilon)_0 = \sqrt{\frac{2}{d}} \frac{2}{L} \sum_{\epsilon(\mathbf{k}) \leq 0} \epsilon(\mathbf{k}) \sqrt{\delta_{\mathbf{k}}} + \mathcal{O}(d^{-3/2}) . \quad (\text{A1.1c})$$

Die Parameter $\bar{u}_{\mathbf{k}}, \bar{v}_{\mathbf{k}}$ sind zwar für unsere Rechnungen wichtig, da sie $|\Phi_0\rangle$ bestimmen und wir immer in der Darstellung $|\Psi_g\rangle = g^{\hat{K}} |\Phi_0\rangle$ rechnen. Im Falle $g = 0$ ist aber diese Form für die physikalische Interpretation weniger günstig, da wir das für $g = 0$ singuläre Verhalten von $g^{\mu_{\mathbf{k}}}, g^{\eta_{\mathbf{k}}}$ im Korrelator \hat{K} in unsere Überlegungen einbeziehen müssen. Aussagekräftiger ist daher die Form von $|\Psi_{g=0}\rangle$ aus Gleichung (121),

$$|\Psi_{g=0}\rangle = \left[\prod_i 1 - \hat{D}_i \right] \prod_{\epsilon(\mathbf{k}) \leq 0} \prod_{\sigma} \left[u_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} + \sigma v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^{\dagger} \right] |\text{Vakuum}\rangle . \quad (\text{A1.2})$$

Für $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ erhalten wir gemäß den Gleichungen (122a), (122b)

$$u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1}{2}} \left(1 \pm \sqrt{\frac{\delta_{\mathbf{k}}}{(\Delta m)_0}} + \mathcal{O}\left(\frac{\delta_{\mathbf{k}}}{d}\right) \right) \quad (\text{A1.3})$$

Man erkennt, daß man in Gleichung (A1.3) $\delta_{\mathbf{k}} = \lambda f_{\mathbf{k}}$ setzen und λ gegen Null gehen lassen darf, ohne daß $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ und damit $|\Psi_{g=0}\rangle$ aus Gleichung (A1.2) trivial werden. Dies wird später wichtig werden.

Wir berechnen jetzt $\langle \hat{S}_{\mathbf{i}} \hat{S}_{\mathbf{i}+\tau} \rangle$. Aus Gleichungen (85a) und (85b) erhalten wir $g_{S^+S^+} = 4$ und $g_{S^+S^-} = 4/(1-m_0^2)$. Unter Verwendung von $\langle \hat{P}_{\tau} \rangle = -(1/(2\sqrt{2d}))\bar{\epsilon}_0$ folgt aus Gleichung (86), daß

$$\langle \hat{S}_{\mathbf{i}} \hat{S}_{\mathbf{i}+\tau} \rangle = \left(-\frac{1}{4} \right) \left[m^2 + \frac{1}{d} (\bar{\epsilon}_0)^2 \left(1 + \frac{2}{1-m_0^2} \right) \right] \quad (\text{A1.4})$$

gilt. Hierbei ist m die Untergittermagnetisierung in $|\Psi_{g=0}\rangle$. Diese Größe hat selbst eine $(1/d)$ -Korrektur via Gleichung (38). Wir definieren S als den Gitterplatz-diagonalen Anteil der Selbstenergie. Wegen der Teilchen-Loch-Symmetrie gilt $S \equiv \tilde{S}_{\uparrow}(\mathbf{i} \in A - \text{Untergitter}) = -\tilde{S}_{\downarrow}(\mathbf{i} \in B - \text{Untergitter})$, wobei \uparrow und \downarrow zu vertauschen sind für $A \leftrightarrow B$.

Der nicht Gitterplatz-diagonale Beitrag in Gleichung (38) kann einfach berechnet werden. Unter Verwendung der Gleichungen (A1.1b), (A1.1c) finden wir zur Ordnung $(1/d)$

$$m = 1 - \frac{1}{d} \left(\frac{[(\Delta\epsilon)_0]^4}{[(\Delta m)_0]^2} + (S+1)(\Delta m)_0 \right) \quad . \quad (\text{A1.5})$$

In erster Ordnung liefert Gleichung (A1.4) dann

$$\langle \hat{S}_{\mathbf{i}} \hat{S}_{\mathbf{i}+\tau} \rangle = \left(-\frac{1}{4} \right) \left[1 + \frac{2[(\Delta\epsilon)_0]^2}{d(\Delta m)_0} \left(1 - \frac{[(\Delta\epsilon)_0]^2}{(\Delta m)_0} \right) - \frac{2}{d} (\Delta m)_0 (1+S) \right] \quad . \quad (\text{A1.6})$$

Der Gitterplatz-diagonale Anteil, S , wird im Anhang A2 berechnet. Wir finden, daß S von der Ordnung Eins ist und daß insbesondere $S > -1$ gilt. Außerdem ist S eine

Funktion der Größen $(\Delta\epsilon)_0$, $(\Delta m)_0$ und von

$$(\Delta\epsilon)_0 = \frac{2}{L} \sum_{\epsilon(\mathbf{k}) \leq 0} \epsilon(\mathbf{k})(\delta_{\mathbf{k}})^{3/2} \quad (\text{A1.7a})$$

$$(\Delta m)_0 = \frac{2}{L} \sum_{\epsilon(\mathbf{k}) \leq 0} (\delta_{\mathbf{k}})^2 . \quad (\text{A1.7b})$$

Die Minimierung der Grundzustandsenergie, Gleichung (A1.6), bezüglich $\delta_{\mathbf{k}}$ liefert die folgende Gleichung für $\delta_{\mathbf{k}} = \delta(\epsilon(\mathbf{k})) \equiv \delta(\epsilon)$

$$[\delta(\epsilon)]^{3/2} + \beta_2 \epsilon \delta(\epsilon) - \beta_1 [\delta(\epsilon)]^{1/2} - \beta_0 \epsilon = 0 , \quad (\text{A1.8})$$

wobei nur noch $\beta_0, \beta_1, \beta_2 \geq 0$ als drei Variationsparameter übrigbleiben. Sie sind allesamt positiv gewählt, damit man für $\delta(\epsilon)$ sinnvolle Resultate an den Zonengrenzen erhält (die obere Bandkante ist $\epsilon = 0$, die untere Bandkante ist $\epsilon = -\epsilon_B = -\sqrt{2d}$). Um Gleichung (A1.6) zu optimieren, müssen wir setzen

$$\delta(-\epsilon_B) = \frac{\beta_0}{\beta_2} \quad (\text{A1.9a})$$

$$\delta(0) = 0 . \quad (\text{A1.9b})$$

Der zweite $(1/d)$ -Term in Gleichung (A1.6) ist immer kleiner oder gleich Null, da $(\Delta m)_0 \geq 0$ und $S > -1$ gilt. Demzufolge müssen wir $(\Delta m)_0 \rightarrow 0$ zulassen. Dies bedeutet $\delta(\epsilon) \rightarrow 0$, was aber keine triviale Variationswellenfunktion aufliest, wie bereits oben diskutiert wurde. Nunmehr folgt aus Gleichung (A1.9a), daß $\beta_2 \rightarrow \infty$ gelten muß ($\beta_0 \rightarrow 0$ liefert ein triviales Resultat). In diesem Fall ist Gleichung (A1.8) quadratisch für $\sqrt{\delta(\epsilon)}$. Definieren wir $\lambda \equiv (\beta_0/\beta_1)^2$, so können wir $\beta_2 \rightarrow \infty$ zulassen und erhalten das Ergebnis

$$\delta(\epsilon) = \begin{cases} 0 & \text{für } -\epsilon_B \leq \epsilon < -\epsilon_{cut} \\ \lambda \epsilon^2 & \text{für } -\epsilon_{cut} \leq \epsilon \leq 0 \end{cases} . \quad (\text{A1.10})$$

Es sind also λ und ϵ_{cut} die beiden noch verbleibenden Variationsparameter. Die Größe $\{(\Delta\epsilon)_0\}^2/(\Delta m)_0$ ist λ -unabhängig. Wir können nun $\lambda \rightarrow 0$ zulassen, um sicherzustellen, daß $(\Delta m)_0 \rightarrow 0$ gilt. Wie wir in Anhang A2 zeigen, geht der lokale Anteil der Selbstenergie S in diesem Limes gegen eine Konstante. Wir haben also letztendlich in den Gleichungen (A1.5) und (A1.6)

$$m = 1 - \frac{1}{d}\langle\epsilon^2\rangle^2 \quad (\text{A1.11a})$$

$$\langle \hat{S}_i \hat{S}_{i+\tau} \rangle = \left(-\frac{1}{4} \right) \left[1 + \frac{2}{d}\langle\epsilon^2\rangle(1 - \langle\epsilon^2\rangle) \right] \quad (\text{A1.11b})$$

$$\langle\epsilon^2\rangle = 2 \int_{-\epsilon_{cut}}^0 d\epsilon \rho(\epsilon) \epsilon^2 \quad . \quad (\text{A1.11c})$$

Insgesamt ist also nur noch *ein* Variationsparameter übrig.

Es sei noch am Rande bemerkt, daß wir die Elimination von zwei der drei Variationsparameter auch numerisch nachgeprüft haben.

A2 Berechnung des Gitterplatz-diagonalen Anteils der Selbstenergie in der Gutzwiller-korrierten antiferromagnetischen Spindichtewelle

Der Gitterplatz-diagonale Anteil der Selbstenergie ist in Gleichung (35) definiert als

$$\widetilde{S}_\sigma(\mathbf{i}, \mathbf{i}) = -x_i \left\{ (n_{i,-\sigma} - \langle \hat{n}_{i,-\sigma} \rangle_0) \mathcal{D} \right\}_0^\epsilon . \quad (\text{A2.1})$$

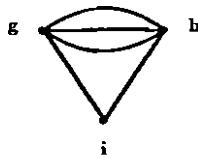
Es gibt eine ganze Klasse von Diagrammen, die zu S in Ordnung $(1/d)$ beitragen. Die Graphen, die zu dieser Klasse gehören, können leicht identifiziert werden. Die ersten beiden Graphen dieser unendlichen Reihe sind in Abbildungen 13a und 13b dargestellt. Beide sind von der Ordnung $(1/d)$, weil eine dreifache Linie von \mathbf{g} nach \mathbf{h} verläuft, sodaß diese beiden Punkte nächste Nachbarn sein müssen. Man kann aber eine unendliche Reihe von „RPA-Blasen“ an den Graphen in Abbildung 13a hängen, ohne seine Ordnung in $(1/d)$ zu ändern. Solch eine Reihe muß im Limes $g = 0, m_0 \rightarrow 1$ sehr sorgfältig behandelt werden, da wir an den Konvergenzradius herangehen. Wie wir weiter unten noch sehen werden, ist die aufsummierte Reihe von Ordnung Eins statt von Ordnung $(1/d)$. Um dies zu zeigen führen wir „angezogene“ Linien ein. Diese sind definiert als

$$\overline{P}_\sigma(\mathbf{i}, \mathbf{j}) = \widetilde{P}_\sigma^0(\mathbf{i}, \mathbf{j}) + \sum_{\mathbf{g}} \widetilde{P}_\sigma^0(\mathbf{i}, \mathbf{g}) \widetilde{S}_\sigma(\mathbf{g}, \mathbf{g}) \widetilde{P}_\sigma^0(\mathbf{g}, \mathbf{j}) \quad (\text{A2.2})$$

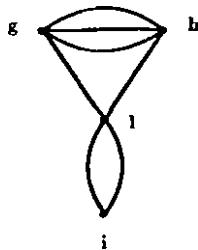
und müssen für jede Linie in den Graphen verwendet werden, da auch der zweite Term in Gleichung (A2.2) im Limes $g = 0, m_0 \rightarrow 1$ von der Ordnung Eins wird. Wir führen nun die Fourier Darstellung [25] durch die Gleichung

$$\overline{P}_\sigma(\mathbf{i}, \mathbf{j}) = \frac{2}{L} \sum_{\epsilon(\mathbf{k}) \leq 0} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{i}-\mathbf{j})} \overline{P}_\sigma^{XY}(\mathbf{k}) \quad (\text{A2.3})$$

ein, wobei \mathbf{i} auf dem X -Untergitter und \mathbf{j} auf dem Y -Untergitter liegen soll. Die Umkehrtransformation lautet



(a)



(b)

Abbildung 13: Die ersten beiden Graphen einer Reihe für den Gitterplatz-diagonalen Anteil der Selbstenergie zur Ordnung $(1/d)$; a) Graph in Ordnung x^3 , b) Graph in Ordnung x^4

$$\overline{P}_\sigma^{XY}(\mathbf{k}) = \frac{2}{L} \sum_{i \in X} \sum_{j \in Y} e^{i\mathbf{k}(i-j)} \overline{P}_\sigma(i, j) \quad . \quad (\text{A2.4})$$

Aus den Größen $\overline{P}_\sigma^{XY}(\mathbf{k})$ kann man nun eine Matrix bilden, wobei $\overline{P}_\sigma^{AA}(\mathbf{k})$ das $(1,1)$ Element, $\overline{P}_\sigma^{AB}(\mathbf{k})$ das $(1,2)$ Element, usw. sein soll. Der Vorteil dieser Darstellungsweise ist, daß das Faltungstheorem für die Matrizen gilt [25], d. h. falls $C(f, h) = \sum_j A(f, j)B(j, h)$ gilt, dann folgt $C(\mathbf{k}) = A(\mathbf{k}) \circ B(\mathbf{k})$ und umgekehrt, wobei \circ das Matrixprodukt von A und B bezeichnen soll. Aus den Gleichungen (A2.2)

und (A2.4) erhalten wir

$$\overline{P}_{\sigma}^{AA}(\mathbf{k}) = \frac{\sigma}{2} \left\{ \widetilde{\theta}_{\mathbf{k}} - m_0 + \frac{S}{2} \left[\left(\widetilde{\theta}_{\mathbf{k}} - m_0 \right)^2 - \left(1 - \widetilde{\theta}_{\mathbf{k}}^2 \right) \right] \right\} \quad (\text{A2.5a})$$

$$\overline{P}_{\sigma}^{BB}(\mathbf{k}) = -\overline{P}_{\sigma}^{AA}(\mathbf{k}) \quad (\text{A2.5b})$$

$$\overline{P}_{\sigma}^{AB}(\mathbf{k}) = \overline{P}_{\sigma}^{BA}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \sqrt{1 - \widetilde{\theta}_{\mathbf{k}}^2} \left[1 + S \left(\widetilde{\theta}_{\mathbf{k}} - m_0 \right)^2 \right] \quad (\text{A2.5c})$$

Gleichung (A2.5c) zeigt, daß das Hüpfen von einem *A*- zu einem *B*-Gitterplatz spin-unabhängig ist. Weil nun $(\widetilde{\theta}_{\mathbf{k}} - m_0)$ von der Ordnung $(1/d)$ ist (siehe Gleichungen (A1.1a), (A1.1b)), gibt es keine Korrektur der Ordnung Eins für nächste Nachbarn. Dies rechtfertigt die Verwendung von \overline{P}_{σ}^0 statt \overline{P}_{σ} , als wir die Gleichungen (A1.5) und (A1.6) abgeleitet haben. Die Gleichung (A2.1) für *S* lautet jetzt explizit

$$\begin{aligned} \sigma S \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} &= x^3 \sum_{\mathbf{f}, \mathbf{g}} \overline{P}_{-\sigma}(\mathbf{i}, \mathbf{f}) \left[\overline{P}_{\mathbf{f}} \right]^3 \delta_{\mathbf{f}-\mathbf{g}, \mathbf{r}} \overline{P}_{-\sigma}(\mathbf{g}, \mathbf{i}) \\ &+ (-x)(-\sigma) S \sum_{\mathbf{g}} \left[\overline{P}_{-\sigma}(\mathbf{i}, \mathbf{g}) \right]^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad , \end{aligned} \quad (\text{A2.6})$$

wobei $\left[\overline{P}_{\mathbf{f}} \right] = -(1/\sqrt{2d}) (2/L) \sum_{\epsilon(\mathbf{k}) \leq 0} \epsilon(\mathbf{k}) \overline{P}^{AB}(\mathbf{k})$ gilt. Verwenden wir die Gleichungen (A2.4) und (A2.5), so können wir Gleichung (A2.6) lösen. Wir erhalten

$$S = \frac{2\sqrt{2d} x^3 \left[\overline{P}_{\mathbf{f}} \right]^3 \left[(2/L) \sum_{\epsilon(\mathbf{k}) \leq 0} \epsilon(\mathbf{k}) \sigma \overline{P}_{\sigma}^{AA}(\mathbf{k}) \overline{P}_{\sigma}^{AB}(\mathbf{k}) \right]}{1 - x \left[(2/L) \sum_{\epsilon(\mathbf{k}) \leq 0} \left[\overline{P}_{\sigma}^{AA}(\mathbf{k}) \right]^2 - \left[\overline{P}_{\sigma}^{AB}(\mathbf{k}) \right]^2 \right]} \quad . \quad (\text{A2.7})$$

Bislang haben wir für endliches *g* gerechnet. Wir können jetzt den Limes $g \rightarrow 0$ durchführen, wobei wir in Gleichung (A2.7) $\widetilde{\theta}_{\mathbf{k}} = 1 - \delta_{\mathbf{k}}/d + \kappa_{\mathbf{k}}/d^2$ setzen. An dieser Stelle müssen wir eine formale $(1/d)^2$ -Korrektur, $\kappa_{\mathbf{k}}$, einführen, die aber am Ende der Rechnungen für *S* wieder herausfällt. Wir verwenden $x = (-4)/(1 - m_0^2)$, $m_0 = 2/L \sum_{\epsilon(\mathbf{k}) \leq 0} \widetilde{\theta}_{\mathbf{k}}$ und die Definitionen in Gleichungen (A1.1b), (A1.1c), (A1.7a) und (A1.7b). Nach einigen algebraischen Zwischenschritten erhalten wir endlich

$$S = \frac{2 \left[(\Delta\epsilon)_0 \right]^3 \left[(\Delta\epsilon)_0 (\Delta m)_0 - (1 + S) (\Delta\epsilon_1)_0 \right]}{\left[(\Delta m)_0 \right]^2 \left[(\Delta m_1)_0 (1 + S)^2 - (1 + 2S) \left[(\Delta m)_0 \right]^2 \right]} \quad . \quad (\text{A2.8})$$

Gleichung (A2.8) ist von dritter Ordnung für S und hängt nur noch von bekannten Größen ab. Da für $S \leq -1$ sowohl der Zähler als auch der Nenner positiv sind $((\Delta\epsilon)_0 \leq 0, (\Delta\epsilon_1)_0 \leq 0)$, ist die rechte Seite von Gleichung (A2.8) positiv und es gibt keine Lösung für $S \leq -1$.

Gleichung (A2.8) hat eine einfache Lösung, wenn wir $\delta_k = \lambda f_k$ setzen und $\lambda \rightarrow 0$ zulassen, nämlich $S = -1 + (\Delta m)_0 [(\Delta\epsilon)_0 / (\Delta\epsilon_1)_0] > -1$. S hat also auch im Limes $\lambda \rightarrow 0$ einen endlichen Wert, d. h. wir müssen nicht damit rechnen, daß S in diesem Limes divergiert.

Literaturverzeichnis

- [1] J. Hubbard, Proc. R. Soc. London, Ser. A **276**, 238 (1963); J. Kanamori, Prog. Theor. Phys. **30**, 275 (1963).
- [2] M. C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. **10**, 159 (1963); Phys. Rev. A **134**, 923 (1964); Phys. Rev. A **137**, 1726 (1965).
- [3] Zum Beispiel: *Spin Fluctuations in Itinerant Electron Magnetism*, hrsg. von T. Moriya, *Springer Series in Solid State Sciences 56*, (Springer, Berlin, 1985); *Metallic Magnetism*, hrsg. von H. Capellmann, *Topics in Current Physics 42*, (Springer, Berlin, 1987).
- [4] N. F. Mott, Proc. Phys. Soc. A **62**, 416 (1949); Rev. Mod. Phys. **40**, 677 (1968); *Metal-Insulator Transitions*, (Taylor & Francis, London, 1974).
- [5] Zum Beispiel: G. Czycholl, Phys. Reports **143**, 277 (1986); P. A. Lee, T. M. Rice, J. W. Serene, L. J. Sham und J. W. Wilkins, Comments Cond. Matt. Phys. **12**, 99 (1986).
- [6] P. Fulde, J. Keller und G. Zwicknagel, *Solid State Physics (Advances in Research and Applications)*, **41**, hrsg. von H. Ehrenreich und D. Turnball, 1 (Academic, New York, 1988).
- [7] W. F. Brinkman und T. M. Rice, Phys. Rev B **2**, 4302 (1970).
- [8] Eine Übersicht gibt D. Vollhardt, Rev. Mod. Phys. **56**, 99 (1984).
- [9] K. Seiler, C. Gros, T. M. Rice, K. Ueda und D. Vollhardt, J. Low Temp. Phys. **64**, 195 (1986).
- [10] D. Vollhardt, P. Wölfle und P. W. Anderson, Phys. Rev. B **35**, 6703 (1987).
- [11] Zum Beispiel: A. L. Fetter und J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, New York, 1971).
- [12] W. Metzner und D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **59**, 121 (1987); Phys. Rev. B **37**, 7382 (1988).
- [13] F. Gebhard und D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **59**, 1472 (1987); Phys. Rev. B **38**, 6911 (1988).

- [14] H. Yokoyama und H. Shiba, *J. Phys. Soc. Jpn.* **56**, 1490 (1987); *ibid.* 3570 (1987); *ibid.* 3582 (1987).
- [15] P. G. McQueen und C. S. Wang, *Phys. Rev. B* **39**, 12414 (1989).
- [16] T. A. Kaplan, P. Horsch und P. Fulde, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 889 (1982); P. Horsch und T. A. Kaplan, *J. Phys. C* **16**, L1203 (1983).
- [17] C. Gros, R. Joynt und T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **36**, 381 (1987).
- [18] H. Yokoyama und H. Shiba, *J. Phys. Soc. Jpn.* **57**, 2482 (1988).
- [19] C. Gros, R. Joynt und T. M. Rice, *Z. Phys. B* **68**, 425 (1987); C. Gros, *Phys. Rev. B* **38**, 931 (1988).
- [20] W. Metzner und D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 324 (1989).
- [21] L. M. Falicov und J. C. Kimball, *Phys. Rev. Lett.* **22**, 997 (1969).
- [22] U. Brandt und C. Mielsch, *Z. Phys. B* **75**, 365 (1989).
- [23] H. Schweitzer und G. Czycholl, *Solid State Comm.* **69**, 171 (1989); H. Schweitzer und G. Czycholl, *Z. Phys. B* **74**, 303 (1989).
- [24] E. Müller-Hartmann, *Z. Phys. B* **74**, 507 (1989); *Z. Phys. B* **76**, 211 (1989).
- [25] W. Metzner, Vorabdruck ITP-C 6/89; W. Metzner, Doktorarbeit (unveröffentlicht) (1989).
- [26] P. G. J. van Dongen, F. Gebhard und D. Vollhardt, *Z. Phys. B* **76**, 199 (1989).
- [27] Eine kurze Abhandlung findet sich bei F. Gebhard und D. Vollhardt in *Interacting Electrons in Reduced Dimensions*, hrsg. von D. Baeriswyl und D. Campbell (Plenum Press, New York, 1989).
- [28] T. M. Rice und K. Ueda, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 995 (1985); **55**, 2093 (E) (1985); *Phys. Rev. B* **34**, 6420 (1986).
- [29] B. H. Brandow, *Phys. Rev. B* **33**, 215 (1986).

- [30] P. Fazekas, J. Magn. Magn. Mater. **63 & 64**, 545 (1987); P. Fazekas und B. H. Brandow, Physica Scripta **36**, 809 (1987); P. Fazekas in *Recent Progress in Many Body Theories*, hrsg. von A. J. Kallio, E. Pajanne und R. F. Bishop, 143 (Plenum Press, New York, 1988).
- [31] P. Fazekas, Solid State Comm. **60**, 431 (1986).
- [32] C. M. Varma, W. Weber und L. J. Randall, Phys. Rev. B **33**, 1015 (1985).
- [33] V. Z. Vulović und E. Abrahams, Phys. Rev. B **36**, 2614 (1987).
- [34] G. Kotliar und A. E. Ruckenstein, Phys. Rev. Lett. **57**, 1362 (1986).
- [35] A. B. Harris und R. V. Lange, Phys. Rev. **157**, 295 (1967).
- [36] F. C. Zhang, C. Gros, T. M. Rice und H. Shiba, Supercond. Science and Techn. **1**, 36 (1988).
- [37] P. W. Anderson, G. Baskaran, Z. Zou und T. Hsu, Phys. Rev. Lett. **58**, 2790 (1987).
- [38] E. H. Lieb und F. Y. Wu, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968).
- [39] T. Koyama und M. Tachiki, Vorabdruck (1989).
- [40] E. H. Lieb, Phys. Rev. Lett. **62**, 1201; *ibid.* 1927(E) (1989).
- [41] J. W. Negele und H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems* (Addison-Wesley, New York, 1988).
- [42] Eine Verallgemeinerung auf korrelierte BCS-Wellenfunktionen ist offensichtlich. Diese Zustände sind deswegen interessant, weil sie sehr eng mit den von Anderson (Science **235**, 1196 (1987)) für die Hochtemperatursupraleiter vorgeschlagenen RVB-Zuständen zusammenhängen.
- [43] F. Gebhard, (unveröffentlicht); in der Tat haben wir im Rahmen der $(g^2 - 1)$ -Entwicklung die $(1/d)$ -Korrektur im Falle der paramagnetischen Gutzwiller-Wellenfunktion berechnet. Hierzu mußten alle Symmetrien der Wellenfunktion verwendet werden, so daß diese Vorgehensweise auf die Berechnung der Korrektur in Ordnung $(1/d)$ bei der Gutzwiller-Wellenfunktion beschränkt ist und nicht auf allgemeine Gutzwiller-korrelierte Wellenfunktionen übertragen werden kann.

- [44] Im Zusammenhang mit Variationswellenfunktionen wurde dies erstmals von P. Horsch und P. Fulde, *Z. Phys. B* **36**, 23 (1979) gezeigt.
- [45] P. Coleman, *Phys. Rev. B* **29**, 3035 (1984); N. Read und D. M. Newns, *J. Phys. C* **16**, L1055; *J. Phys. C* **16**, 3273 (1983).
- [46] E. A. Guggenheim, *Mixtures* (Oxford University Press, New York, 1952).
- [47] Zum Beispiel: W. Nolting, *Quantentheorie des Magnetismus 2* (Teubner, Stuttgart, 1986).
- [48] P. Fazekas, B. Menge und E. Müller-Hartmann, Vorabdruck (1989).
- [49] C. M. Varma und Y. Yafet, *Phys. Rev. B* **13**, 2950 (1976).
- [50] O. Gunnarson und K. Schönhammer, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 604 (1983); *Phys. Rev. B* **28**, 4315 (1983).
- [51] V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794 (1987).
- [52] Diese Untersuchungen werden bereits in Angriff genommen; R. Strack und D. Vollhardt, private Mitteilung (1989).
- [53] T. Ogawa, K. Kanda und T. Matsubara, *Prog. Theor. Phys.* **53**, 614 (1975).
- [54] T. Ogawa und K. Kanda, *Z. Phys. B* **30**, 355 (1978); T. Ogawa, T. Ogawa und K. A. Chao, *Phys. Rev. B* **17**, 4124 (1978).
- [55] J. Bernasconi, *Z. Phys. B (Phys. Kond. Mat.)* **14**, 225 (1972).
- [56] H. A. Razafimandimby, *Z. Phys. B* **49**, 33 (1982).
- [57] F. Takano und M. Uchinami, *Prog. Theor. Phys.* **53**, 1267 (1975); J. Florencio und K. A. Chao, *Phys. Rev. B* **14**, 3121 (1976).
- [58] A. M. Oleš und J. Zaanen, *Phys. Rev. B* **39**, 9175 (1989);
- [59] S. K. Sarker, *Phys. Rev. B* **39**, 2155 (1989).
- [60] J. W. Rasul und T. Li, *J. Phys. C* **21**, 5119 (1988).
- [61] M. Lavagna, Vorabdruck (1989).

- [62] T. Li, P. Wölfle und P. J. Hirschfeld, Vorabdruck (1989).
- [63] H. Hasegawa, zur Veröffentlichung in Journ. Cond. Matt., (Vorabdruck als Technical Report of ISSP Ser. A No. 2090, January 1989).
- [64] W. Metzner (unveröffentlicht) (1986).
- [65] G. Czycholl, private Mitteilung (1989).
- [66] H. Shiba, private Mitteilung (1989).
- [67] P. W. Anderson, Phys. Rev. **83**, 1260 (1951).
- [68] T. Kennedy, E. H. Lieb und B. S. Shastry, Phys. Rev. Lett. **61**, 2582 (1988).
- [69] P. Horsch und W. van der Linden, Z. Phys. B **72**, 181 (1988).
- [70] T. Barnes und E. S. Swanson, Phys. Rev. B **37**, 9405 (1988).
- [71] M. Gross, E. Sánchez-Velasco und E. Siggia, Phys. Rev. B **39**, 2484 (1989).
- [72] J. D. Reger, J. A. Riera und A. P. Young, J. Phys. Condens. Matt. C **1**, 1855 (1989); J. D. Reger und A. P. Young, Phys. Rev. B **37**, 5978 (1988).
- [73] J. Carlson, Phys. Rev. B **40**, 846 (1989).
- [74] D. A. Huse und V. Elser, Phys. Rev. Lett. **60**, 2531 (1988).
- [75] R. Kubo, Rev. Mod. Phys. **25**, 344 (1953).
- [76] T. Oguchi, J. Phys. Chem. Solids **24**, 1049 (1963); J. C. Fisher, *ibid.* **10**, 44 (1959).
- [77] M. Ziegler, W. van der Linden und P. Horsch, Vorabdruck (1989).
- [78] S. Sachdev, Phys. Rev. B **39**, 12232 (1989); die gleiche Variationswellenfunktion wurde von R. R. Bartkowiak, Phys. Rev. B **5**, 4536 (1972) studiert. Seine Behandlung ist aber nicht exakt, d. h. sie enthält unkontrollierte Näherungen. Bartkowiak's Technik wurde kürzlich von A. M. Oleś (Vorabdruck (1989)) verfeinert.
- [79] S. Liang, B. Doucot und P. W. Anderson, Phys. Rev. Lett. **61**, 365 (1988).
- [80] M. H. Boon, Nuovo Cimento **21**, 885 (1961).
- [81] H. L. Davis, Phys. Rev. **120**, 789 (1960).

- [82] M. Parrinello und T. Arai, Phys. Rev. B **10**, 265 (1974); D. A. Huse, Phys. Rev. B **37**, 2380 (1988).
- [83] K. W. Becker, H. Won und P. Fulde, Z. Phys. B **75**, 335 (1989).
- [84] R. R. P. Singh, Phys. Rev. B **39**, 9760 (1989).
- [85] R. Kubo, Phys. Rev. **87**, 568 (1952).
- [86] P. W. Anderson, Phys. Rev. **86**, 694 (1952).
- [87] H. Nishimori und S. J. Miyake, Prog. Theor. Phys. **73**, 18 (1985).
- [88] S. Kivelson, D. Rokhsar und J. Shetna, Phys. Rev. B **35**, 8865 (1987).
- [89] P. W. Anderson, Science **235**, 1196 (1987).

Danksagung

Ich danke...

- ... Herrn Professor Dr. Dieter Vollhardt für die Betreuung dieser Arbeit und seine Unterstützung bei all meinen großen und kleinen Anliegen,
- ... Herrn Professor Dr. Gerd Czycholl für die Übernahme des Koreferats dieser Arbeit,
- ... Herrn Dr. Peter G. J. van Dongen für seine Hilfe bei der Formulierung des Vorabdrucks ITPC-7/89, der Teile dieser Arbeit enthält,
- ... Herrn Dipl.-Phys. Walter Metzner und allen Freunden und Kollegen am Institut für theoretische Physik für die hilfreichen Diskussionen, die wir miteinander geführt haben,
- ... der Konrad-Adenauer-Stiftung, St. Augustin bei Bonn, für die finanzielle und ideelle Unterstützung während meiner Promotion, ohne die ich die Arbeit in diesem kurzen Zeitraum nicht hätte abschließen können.

Lebenslauf

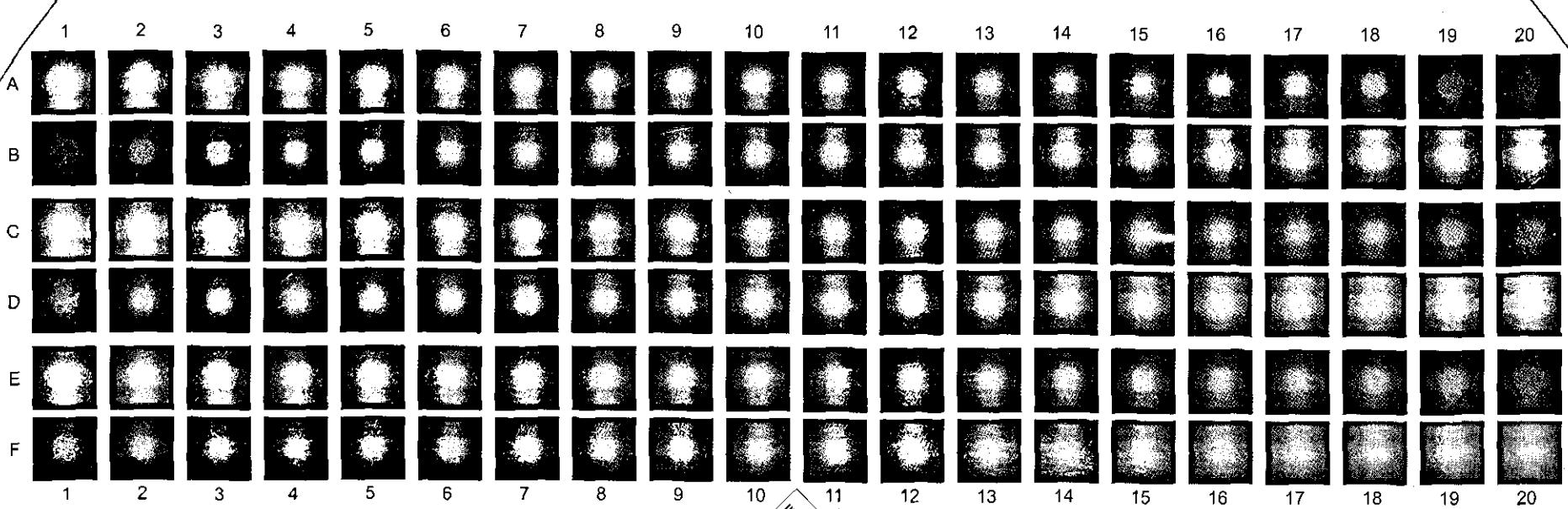
Name	Florian Paul GEBHARD
	Sohn von Waldemar und Olga Gebhard, geb. Haas
Geburtstag	27. Juni 1962
Geburtsort	Tegernsee, Bayern
Ausbildung	
1968-1972	Volksschule Tegernsee
1972-1976	Gymnasium Tegernsee
1976-1981	Gymnasium Wasserburg/Inn
Juni 1981	Abitur
Nov. 1981 – Juni 1987	Studium der allgemeinen Physik an der Technischen Universität München
Okt. 1982 – März 1987	Stipendiat der Hanns-Seidel-Stiftung, München
Juni 1986 – Juni 1987	Diplomarbeit bei Prof. Dr. P. Wölflé über „Fermionen mit Hubbard-Wechselwirkung: Analytische Berechnung der Korrelations- funktionen im Gutzwiller-Ansatz“ (Betreuer: Dr. D. Vollhardt)
Juli 1987	Diplom in Physik
seit Okt. 1987	Doktorand am Lehrstuhl für Theoretische Physik C der RWTH Aachen bei Prof. Dr. D. Vollhardt
seit Dez. 1987	Stipendiat der Konrad-Adenauer-Stiftung, St. Augustin
Anstellung	
Juli 1987 – Sept. 1987	Freier Mitarbeiter am Max-Planck-Institut für Physik und Astrophysik, München
seit Okt. 1987	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Theoretische Physik C der RWTH Aachen bei Prof. Dr. D. Vollhardt

SZ9425=2



SZ9425=2

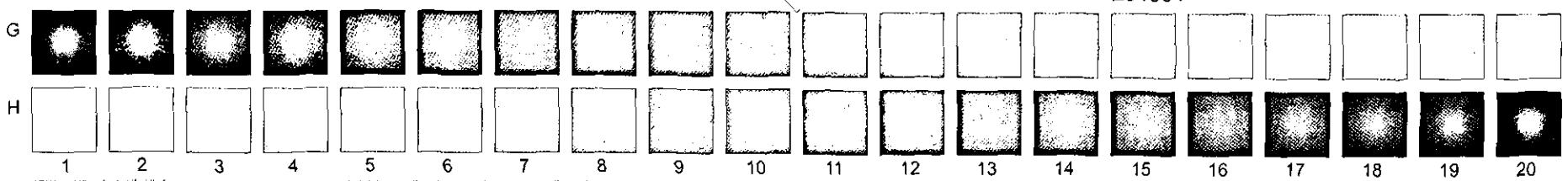
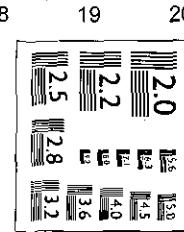
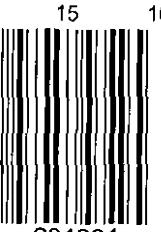
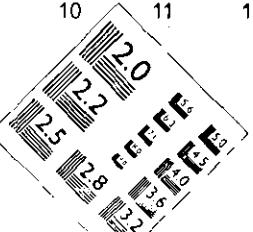
FOTODRUCK J.MAINZ GmbH
Neupforte 13, Nähe Markt, D - 5100 Aachen
Telefon: (0241) 27305 und (0241) 38696



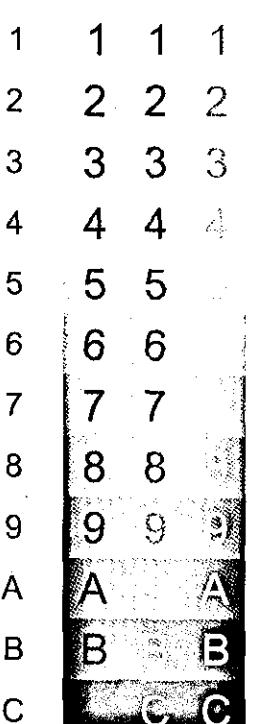
Color Scanner Test Target

S2N CSTT-2a

Batch-Nr.: #201301



Hatzfelder Strasse 161 - 163
D-42281 Wuppertal
Telefon: ++49 (0)202 27058-0
Telefax: ++49 (0)202 27058-40
www.imageaccess.de
www.scan2net.de
E-Mail: info@imageaccess.de



4 p Klounf sjdert jfsj jdhgfr saoeur djfkehc sfhwpuz klgar foxies gmnaschwz hduzmcn vjx vjxjvfdz a Wju licfc jmv prongs wallusi 94846 393 shd94 hah 43 gnurz aploqg ukella bant echinz sagron

6 p Klounf sjdert jfsj jdhgfr saoeur djfkehc sfhwpuz klgar foxies grnn Wju licfc jmv prongs wallusi 94846 393 shd94 hah 43 gnurz ong

8 p Klounf sjdert jfsj jdhgfr saoeur djfkehc sfhwpuzk Wju licfc jmv prongs wallusi 94846 393 shd94 h

10 p Klounf sjdert jfsj jdhgfr saoeur djfkehc Wju licfc jmv prongs wallusi 94846 39

12 p Klounf sjdert jfsj jdhgfr saoeur d Wju licfc jmv prongs wallusi 948

