

Erweiterte Gutzwiller-Wellenfunktionen zur Bestimmung von Streifenstrukturen am eindimensionalen Hubbard-Modell

Der Fakultät für Physik an der Technischen Universität Dortmund
zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der
Naturwissenschaften (Dr.rer.nat.)
eingereichte

D i s s e r t a t i o n

vorgelegt von

Rolf Wöste

aus Dortmund
Juli 2010

Erweiterte Gutzwiller-Wellenfunktionen zur Bestimmung von Streifenstrukturen am eindimensionalen Hubbard-Modell

Der Fakultät für Physik an der Technischen Universität Dortmund
zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der
Naturwissenschaften (Dr.rer.nat.)
eingereichte

D i s s e r t a t i o n

vorgelegt von

Rolf Wöste

aus Dortmund
Juli 2010

Tag der mündlichen Prüfung: 17.09.2010
Vorsitzender und Dekan: Prof.Dr. B. Spaan
1. Gutachter: Prof.Dr. W. Weber
2. Gutachter: Prof.Dr. J. Stolze
Vertreter der promovierten
wissenschaftlichen Mitarbeiter: Dr. Stefano Pasini

Organisation

Herr K. sagte einmal: "Der Denkende benützt kein Licht zuviel, kein Stück Brot zuviel, keinen Gedanken zuviel."

Bertolt Brecht, Geschichten vom Herrn Keuner

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	3
1 Materialien	7
1.1 CuO ₂ -Ebenen supraleitender Kuprate	7
1.2 Ordnungsphänomene in einer und in zwei Dimensionen	8
1.2.1 Quasi-Eindimensionale Ordnungen	8
1.2.2 Statische und fluktuierende Ordnung	9
1.3 Streifenstrukturen im Experiment	9
1.3.1 Neutronenstreuung	10
1.3.2 Röntgenstreuung	10
1.3.3 Tunnelmikroskopie	11
2 Mikroskopische Modelle	13
2.1 Tight-Binding-Modell der CuO ₂ -Ebenen	13
2.2 Elektron-Elektron-Wechselwirkung	13
2.2.1 Einband-Hubbard-Modell	14
2.2.2 Mehr-Band-Hubbard-Modelle	15
2.2.3 t-J-Modell	15
2.3 Unterschiede zwischen 1D und 2D Modellen	15
2.4 Numerische Studien in zwei Dimensionen	17
2.4.1 Streifenstrukturen in Hartree-Fock-Näherung	17
2.4.2 DMRG-Rechnungen	17
2.4.3 Gutzwiller Rechnungen	18
2.5 Numerische Studien in einer Dimension	18
2.5.1 Zielsetzung der Arbeit	18
3 Gutzwiller-Formalismus	21
3.1 Einteilchenbasen	21
3.1.1 Darstellungsoperatoren	23
3.1.2 Magnetische Momente	23
3.1.3 Ordnungsparameter	24
3.2 Das Hubbard-Modell	24
3.3 Gutzwiller-Wellenfunktionen	25
3.3.1 Gutzwiller-Korrelator	25

3.3.2	Erwartungswerte in der Gutzwiller-Näherung	25
3.4	Äußere Variationsfelder	27
3.4.1	Austauschfelder	28
3.4.2	Orbital-Verschiebung	28
3.5	Bestimmung des variationellen Grundzustandes	28
3.5.1	Einteilchen-Wellenfunktionen	29
3.5.2	Minimierung der Doppelbesetzungen	30
4	Numerische Durchführung	33
4.1	Symmetriebrechung durch Superzellen	33
4.1.1	Äußere Symmetriebrechung	33
4.1.2	Innere Symmetriebrechung	34
4.2	Streifen-Superzellen	34
4.2.1	Symmetrieoperatoren	34
4.2.2	Kollineare Streifen-Superzellen (KSZ)	35
4.2.3	Spiralen-Streifen-Superzellen (SSZ)	38
4.3	Durchführung der Minimierung	39
4.3.1	Simultane vs. Separierte Minimierung	39
4.3.2	Innere Minimierung	40
4.3.3	Äußere Minimierung	40
4.3.4	Verfahren für kollineare Streifen-Superzellen	41
4.3.5	Variationsverfahren für SSZ	41
5	Ergebnisse	43
5.1	Systeme ohne Übernächste-Nachbar-Hoppings	43
5.1.1	Grundzustände für $d = 1/8$ und $d = 1/10$	43
5.1.2	Grundzustände in Abhängigkeit von U	52
5.1.3	Grundzustände in Abhängigkeit von der Dotierung	53
5.1.4	Übergang zur halben Bandfüllung	55
5.1.5	Übergangsstrukturen	58
5.2	Systeme mit Übernächstem-Nachbar-Hopping	59
5.2.1	Grundzustandsbestimmung in Abhängigkeit von t' , d und U	59
6	Zusammenfassung	79
A	Daten für $t' = 0$	83
A.1	$d = 1/n$	83
A.1.1	$d=1/10$	87
A.2	Übergangsstrukturen	89
A.2.1	$d=7/48$	89
A.2.2	$d=9/80$	90
B	Daten für $t' \neq 0$	93
B.1	$U = 8eV$	93
B.1.1	$d = 1/10$	93
B.1.2	$d = 1/8$	95

<i>INHALTSVERZEICHNIS</i>	3
B.1.3 d=1/6	97
B.2 U = 10eV	99
B.2.1 d= 1/10	99
B.2.2 d= 1/8	101
B.2.3 d= 1/6	103
B.3 U = 15eV	104
B.3.1 d=1/10	104
B.3.2 d=1/8	106
B.3.3 d=1/6	108
Literatur	121
Erklärung	123
Danksagung	125

Vorwort

Seit Bednorz und Müller 1986 in $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ überraschend Supraleitung bei einer kritischen Temperatur von 40K entdeckten [BM86], stellt die Erforschung dotierter Kupratoxide – daraufhin auch als Kuprat-Supraleiter bezeichnet – eines der aktivsten Felder der theoretischen und experimentellen Festkörperphysik dar. Die Kuprat-Supraleitung unterscheidet sich in mehrfacher Hinsicht von den bis dato bekannten Supraleitern: Zum einen erwies sich der supraleitende Zustand als stark anisotrop: So liegt die kritische Stromdichte parallel zu den dotierten CuO_2 -Ebenen innerhalb der perovskitartigen Kristallstrukturen um zwei oder mehr Größenordnungen über den entsprechenden Werten in dazu senkrechter Richtung. Ferner stellte sich bald heraus, daß die Elektron-Phonon-Wechselwirkung, die zuvor die konventionelle Supraleitung erfolgreich beschreiben konnte, nicht die Ursache der Kuprat-Supraleitung sein kann. Der entsprechende mikroskopische Mechanismus wird gemeinhin in Vielteilcheneffekten, bedingt durch die Coulomb-Wechselwirkung der Valenzelektronen innerhalb der CuO_2 -Ebenen, vermutet; ein befriedigendes Modell steht hier noch als ungelöstes Problem im Raum.

Neben der Hochtemperatur-Supraleitung selbst weckte später eine weitere Eigenschaft der Kuprat-Supraleiter reges Forschungsinteresse: Neutronenstreuexperimente von J.M. Tranquada zeigten [TSJ⁺95] bei hinreichend tiefen Temperaturen quasi-eindimensionale Ladungs- und Spinverteilungen – sog. Streifenstrukturen – innerhalb der dotierten CuO_2 -Ebenen auf. Auch experimentelle Daten aus Versuchen mit elastischer Röntgenstreuung [AAS⁺05] und aus der Tunnelmikroskopie wiesen auf die Möglichkeit eines inhomogenen Grundzustandes hin.

Theoretisch waren die Streifenstrukturen schon einige Jahre vor ihrem experimentellen Nachweis in Hartree-Fock-Rechnungen, u.a. von Jan Zaanen [ZG89] vorausgesagt worden. Später wurden zweidimensionale t-J und Hubbard-Modelle intensiv untersucht. Die Ergebnisse dieser Studien stehen einerseits in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Daten, andererseits ist ihrer Aussagekraft durch die Notwendigkeit beschränkt, den numerischen Verfahren zweidimensionale Grundstrukturen mit Randbedingungen- Superzellen- zugrunde zu legen.

Wir versuchen in dieser Arbeit, solche inhomogenen Zustände in *einer* Dimension als Grundzustände des dotierten Einband-Hubbard-Modells mit Hilfe von verallgemeinerten Gutzwiller-Wellenfunktionen in Abhängigkeit von Dotierung, Wechselwirkung und Hoppingparametern systematisch zu erfassen. Zwar sind wir auch in einer Dimension

an die Vorgabe von Superzellen gebunden, können aber durch den geringeren Rechenaufwand eine deutlich größere Anzahl entsprechender Strukturen betrachten und die Grundzustände in Abhängigkeit von den Modellparametern systematischer erfassen, als es bisher für zweidimensionale Modelle möglich war. Die Arbeit gliedert sich wie folgt:

In Kapitel 1 führen wir in die Materialklasse der Kuprat-Supraleiter ein. Dabei werden wir zunächst die charakteristische perovksitartige Kristallstruktur mit dotierten CuO_2 -Ebenen darlegen. Dann beschreiben wir die erwähnten Streifenstrukturen phänomenologisch, um schließlich auf dieser Basis experimentelle Ergebnisse - vor allem aus der Neutronenstreuung - diskutieren zu können.

In Kapitel 2 erörtern wir grundsätzliche Aspekte der mikroskopischen Modellierung der Elektronenstruktur innerhalb der CuO_2 -Ebenen. Zunächst wird durch eine sinnvolle Abschätzung der atomaren Elektronen-Konfigurationen ein geeignetes Tight-Binding-Modell aufgestellt. Anschließend führen wir mit dem t - J und dem Hubbard-Modell die hier relevanten Modelle der (atomaren) Elektron-Elektron-Wechselwirkung ein, schließlich geben wir einen Überblick über numerische Studien an diesen Modellen und formulieren vor diesem Hintergrund die Zielsetzung der vorliegenden Arbeit.

In Kapitel 3 führen wir das eindimensionale Einband-Hubbard-Modell, welches unseren Rechnungen zugrunde liegt, auf quantenmechanischer Ebene ein. Anschließend formulieren wir den Gutzwiller-Formalismus im Einband-Fall und führen eine Erweiterung der Verfahrens zur Untersuchung inhomogener Zustände ein.

In Kapitel 4 wird zunächst die eindimensionale Phänomenologie inhomogener Zustände anhand von Ordnungsparametern erläutert und deren Struktur in einer Dimension anhand von Streifen-Superzellen klassifiziert. Anschließend erörtern wir einige praktische Aspekte des Verfahrens.

In Kapitel 5 kommen wir zur Präsentation der numerischen Ergebnisse. Die Präsentation des Datenmaterials erfolgt in zwei Teilen: Zunächst werden Parametersätze mit ausschließlich Nächstem-Nachbar-Hopping betrachtet, während im zweiten Teil endliche Übernächste-Nachbar-Hoppings hinzugezogen werden.

In Kapitel 6 stellt eine Zusammenfassung der Arbeit dar und gibt einen Ausblick auf mögliche Fortführungen des Projekts.

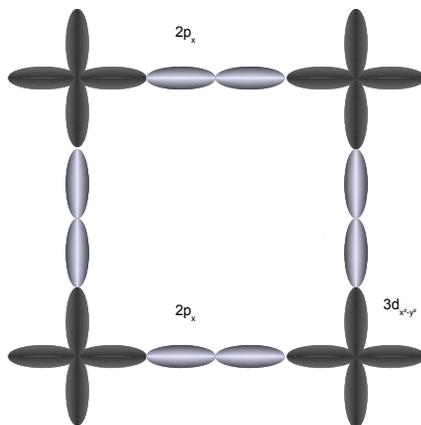
Kapitel 1

Materialien

1.1 CuO₂-Ebenen supraleitender Kuprate

Supraleitende Kuprate kristallisieren in perovskitartigen Strukturen mit Kupfer-Sauerstoff Oktaedern, bei denen die Apex-Positionen des Sauerstoffs entlang der c-Achse elongiert sind. Es bilden sich dadurch CuO₂-Ebenen, bei denen die Kupfer-Atome auf einem Quadratgitter angeordnet sind. Auf den Mittelpunkten der Verbindungslinien zwischen zwei Kupferatomen befindet sich jeweils ein Sauerstoffatom. Es gibt viele Varianten dieser perovskitartigen Grundstruktur, zum Beispiel Doppel- und Mehrfach-Schichtstrukturen, bei denen die Apex-Atome der Sauerstoffoktaeder teilweise oder ganz fehlen, die CuO₂-Ebenen jedoch erhalten bleiben. Die Valenzelektronen liegen in den Konfigurationen $2p_{x,y}$ am Sauerstoff und $3d_{x^2-y^2}$ am Kupfer vor. Aufgrund der deutlich tieferen Orbitalenergien des Sauerstoffs wird häufig davon ausgegangen, daß die p-Schalen am Sauerstoffs fast vollständig gefüllt sind und somit keinen Beitrag zu Ladungstransport und Magnetisierung leisten. Die 3d-Kupferorbitale dagegen sind im undotierten Fall jeweils halb gefüllt und bilden ein fermionisches Spin- $\frac{1}{2}$ -System, dessen Grundzustand bekanntermaßen gegeben ist durch einen antiferromagnetischen Mott-Isolator.

Durch Dotierung – z.B. über die Beimischung von Ba in $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ – geben die CuO₂-Ebenen eine entsprechende Anzahl von Ladungsträgern ab und bilden dadurch dotierte Mott-Isolatoren mit einer Anordnung von Ladungen und magnetischen Momenten bzw. Spins auf dem Quadratgitter der Kupferionen, die den eigentlichen Gegenstand dieser Studie ausmachen sollen.

Abbildung 1.1: Orbitale der CuO₂-Ebenen

1.2 Ordnungsphänomene in einer und in zwei Dimensionen

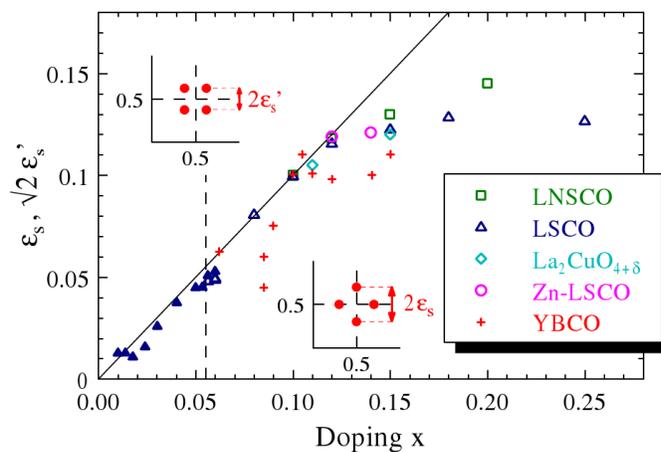
1.2.1 Quasi-Eindimensionale Ordnungen

Unter einer *Streifenstruktur* verstehen wir im folgenden eine inhomogene Ladungs- und Spinordnung auf einem Quadratgitter, die ihrerseits in parallele eindimensionale Substrukturen (*Streifen*) zerfällt. Ladungs- und magnetische Ordnungen innerhalb der Streifen können dabei unterschiedliche Periodizitäten n_c bzw. n_s aufweisen und sowohl in den axialen Richtungen des Quadratgitters als auch in Richtung der Flächendiagonalen auftreten. Streifen brechen somit sowohl die Translations- als auch die C_4 -Punktsymmetrie sowie die Inversionsymmetrien des Gitters. Den Periodenlängen n_c und n_s einer Streifenstruktur entsprechen im reziproken Raum des Atomgitters die Wellenvektoren ϵ_c und ϵ_s mit $\epsilon_c = 2\pi/n_c$ bzw. $\epsilon_s = 2\pi/n_s$. In der Literatur haben sich für die Ladungsordnungen mit $n_c = 1/d$ und $n_c = 1/2d$ bei Dotierung d relativ zur halben Bandfüllung die Bezeichnungen *gefüllte Streifen* (filled stripes) und *halbgefüllte Streifen* (half filled stripes) eingebürgert. Neben ihren Periodizitäten werden Streifen durch ihre Symmetrie charakterisiert: so spricht man von plattformzentrierten (site-centered) und mittenzentrierten (bond-centered) Streifen je nach Position des Symmetriezentrums. Zerfällt die Verteilung der Ladungen und Momente dagegen in homogene eindimensionale Substrukturen, so spricht man von *nematischen* Phasen. Von den echt zweidimensionalen Strukturen, die auch der C_4 -Punktsymmetrie des Gitters genügen, sind in diesem Zusammenhang vor allem sog. Checkerboard-Strukturen relevant.

1.2.2 Statische und fluktuierende Ordnung

Die Streifenstrukturen wie auch die nematischen oder zweidimensionalen Strukturen werden in dieser Arbeit als langreichweitige, statische Ordnungen auf dem Atomgitter der CuO_2 -Ebenen aufgefaßt. In Anwendung auf reale Materialien stellt dies allerdings ein starke Idealisierung dar: Zum einen treten in dotierten Kupratsupraleitern Verzerrungen der Gitterperiodizität durch Beimischung der Fremdatome auf. Fluktuierende Ordnungen treten auf, wenn sich einzelne Ordnungszustände energetisch nur geringfügig unterscheiden und es durch Quantenfluktuationen zur Koexistenz verschiedener Phasen kommt.

1.3 Streifenstrukturen im Experiment



Dreiecke: $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO) nach [YLK⁺98][WSE⁺99] [WBK⁺00][MFY⁺00][MLG⁺00][MFY⁺02], für $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ zeigen die gefüllten Dreiecke zusätzlich diagonale Streifen mit einer Periodizität von $\sqrt{2\epsilon_s'}$ an. Quadrate: $\text{La}_{2-x-y}\text{Nd}_y\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LNSCO) nach [TSJ⁺95][Tra97]. Rhomben: $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ [WLK⁺97] [LBK⁺99] Kreise $\text{La}_{2-x-y}\text{Nd}_y\text{Zn}_x\text{CuO}_4$ (Zn-LNSCO)[TIKU99] Kreuze: $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{2+\delta}$ nach [DMHD01][MDDH00][HHF⁺08]

Abbildung 1.2: Yamada-Plot

Die wichtigsten experimentellen Hilfsmittel zur Messung der Streifenstrukturen stellen Streuexperimente mit Neutronen und Röntgenstrahlung dar. Abbildung 1.2, der

„Yamada-Plot“, entnommen aus [Voj09], zeigt die Periodizität magnetischer Inhomogenitäten $\varepsilon_s \pi$ in Abhängigkeit von der Dotierung x in unterschiedlichen Materialien.

1.3.1 Neutronenstreuung

Langreichweitige periodische magnetische Ordnungen in Festkörpern, die nicht der zugrundeliegenden Gitterstruktur entsprechen lassen sich anhand von Neutronenstreuexperimenten nachweisen. Dabei äußert sich eine Periodizität der Länge ε_s in einem Maximum der Streuintensität bei $k_s = 2\pi/\varepsilon_s$. Während sich magnetische Ordnungen dabei direkt nachweisen lassen, können Ladungsordnungen lediglich indirekt über Gitterverzerrungen beobachtet werden. Dabei ist zu beachten, daß die Streuung der Neutronen nicht elastisch, sondern inelastisch mit Energieüberträgen im Bereich einiger meV erfolgt. Das Auftauchen von jeweils 4 Bragg-Peaks für Spin- und Ladungsordnung lässt zunächst zwei Deutungen zu: Einerseits eine 2D-Schachbrett-Struktur, andererseits eine Überlagerung von eindimensionalen Streifen in beide Raumrichtungen des Kristalls. Schachbrettartige Strukturen führen jedoch ebenso zu Bragg-Peaks in Richtung der Raumdiagonalen.

Der antiferromagnetische Grundzustand in der undotierten Substanz La_2CuO_4 wurde 1987 von D. Vaknin [VSM⁺87] nachgewiesen, der erste experimentelle Nachweis statischer Streifenstrukturen gelang J.M. Tranquada 1995 [TSJ⁺95] an

$\text{La}_{2-x-0.4}\text{Nd}_{0.4}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ bei einer Dotierung $x = 0.12$. Die Messungen zeigten unterhalb einer kritischen Temperatur von 55K Bragg-Peaks mit einer Abweichung von $\varepsilon_s = 0.12\pi$ vom Quadratgitter, was einer periodischen magnetischen Ordnung mit $n_s \approx 8$ entspricht. Für die Ladungsordnung wurde ein Wert von $\varepsilon_s = \varepsilon_c/2$ gemessen, die Inhomogenität der Ladung weist also eine Periodizität von $n_c \approx 4$ gegenüber der magnetischen Inhomogenität und somit eine Verkürzung der Periodenlänge um einen Faktor 2 auf. Wenig später wurden vom gleichen Autor an $\text{La}_{2-x-y}\text{Nd}_y\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ die ε_c und ε_s in Abhängigkeit von der Dotierung im Bereich $0.08 \leq d \leq 0.20$ erfasst und der Zusammenhang $\varepsilon_s = \varepsilon_c/2 = x$ bestätigt. [Tra97].

Durch Fortschritte in der Bereitstellung von Einkristall-Proben konnten diese Messungen in jüngerer Zeit auf eine große Anzahl ähnlicher Substanzen ausgedehnt werden. So führte [FGY⁺04] Messungen an $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ an bei Dotierungen $x = 0.125$ und $x = 0.075$ durch; für $\text{La}_{2-x-y}\text{Eu}_y\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ konnte M. Hücker [Hüc07] den gesamten Bereich der Dotierung ausmessen.

1.3.2 Röntgenstreuung

Messungen mit Röntgenstrahlen erlauben den direkten Nachweis von Ladungsordnungen. Entsprechende Experimente wurden zuerst von Abbomente [AAS⁺05] im Jahr 2005 vorgestellt. Untersucht wurden dabei $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ -Proben bei einer Dotierung von $d = 1/8$. Die Ergebnisse zeigten eine Ladungsinhomogenität der Periodizität $n_c = 4$ und bestätigten somit die Aussagen Neutronenstreuexperimente. Für $\text{La}_{2-x-0.4}\text{Nd}_{0.4}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ wurde dieser Zusammenhang bei Dotierungen $d = 1/8$ und $d = 0.15$ ebenfalls bestätigt [FSW⁺09].

1.3.3 Tunnelmikroskopie

Im Gegensatz zu den Streuexperimenten erlauben Messungen per Rastertunnelmikroskopie (STM) direkte Messungen im Ortsraum. Grundsätzlich können per STM nur statische Streifen beobachtet werden, fluktuierende Streifen nur wenn sie an Störstellen gebunden sind (Pinning). Ferner sind STM-Experimente sehr oberflächensensitiv und liefern nur bedingt Aussagen über Volumeneffekte. Aufgrund der hohen Anforderung an die Qualität der Proben stehen hier bislang nur wenig Daten zur Verfügung, vgl. [FKMA⁺07].

Kapitel 2

Mikroskopische Modelle

In diesem Abschnitt beschreiben wir quantenmechanische Modelle der Elektronen innerhalb der CuO_2 -Ebenen. Zuerst wird eine Einteilchenbasis im Rahmen der Tight-Binding-Näherung vorgestellt, anschließend geeignete Modelle der Elektron-Elektron-Wechselwirkung (WW). Zudem diskutieren wir Ergebnisse aus bisherigen numerischen Studien zu Kuprat-Supraleitern, aus denen heraus dann die Zielsetzung unserer eigenen Arbeit motiviert werden soll.

2.1 Tight-Binding-Modell der CuO_2 -Ebenen

Unter der Annahme, daß die Elektronen an den jeweiligen Kupfer- bzw. Sauerstoff-Atomen lokalisiert sind, lassen sich die zugehörigen Eigenfunktionen mittels der LCAO-Methode (Linearkombinationen der atomaren Orbitale) konstruieren. Die Matrixelemente dieses 3-Band-Modells werden bestimmt durch Orbitalenergien, Kristallfeld-Terme und Hüpfmatrix-Elemente. Unter Vernachlässigung der voll besetzten Sauerstoff-Orbitale können wir zu einem vereinfachten Ein-Band-Modell übergehen, in dem nur noch die $3d_{x^2-y^2}$ -Orbitale des Kupfers Berücksichtigung finden. Da die einzelnen Kupfer-Atome untereinander nicht ausgezeichnet sind, treten in diesem Modell weder Kristallfeld-Terme noch Orbitalenergien auf und der Tight-Binding-Hamiltonian reduziert sich auf die Hopping-Matrixelemente.

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \hat{c}_{\sigma_i}^\dagger \hat{c}_{\sigma_j} - t' \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle, \sigma} \hat{c}_{\sigma_i}^\dagger \hat{c}_{\sigma_j} \quad (2.1)$$

Die Ausdrücke $\langle ij \rangle, \sigma$ und $\langle\langle ij \rangle\rangle, \sigma$ bezeichnen hier die Summation über Paare von Spinorbitalen im gleichen Zustand an nächsten bzw. übernächsten Nachbarn.

2.2 Elektron-Elektron-Wechselwirkung

Das wechselwirkungsfreie Tight-Binding-Modell liefert einen homogenen, paramagnetischen, metallischen Grundzustand und somit weder eine Erklärung für die beobachteten Inhomogenitäten in dotierten Substanzen noch einen antiferromagnetischen

Grundzustand im Falle halber Bandfüllung. Um die charakteristischen elektronischen und magnetischen Eigenschaften der CuO_2 -Ebenen erfassen zu können ist es notwendig, neben den Tight-Binding-Parametern und der Dotierung die Coulomb-Abstoßung der Valenzelektronen untereinander in die Modellierung einzubeziehen. Bekanntermaßen führt die Berücksichtigung *sämtlicher* Elektron-Elektron-WW untereinander auf ein Vielteilchen-Problem, welches in der Praxis schon für kleine Systeme nicht mehr sinnvoll zu behandeln ist. Die theoretische Festkörperphysik hat daher verschiedene Ansätze entwickelt, die Wechselwirkung zumindest näherungsweise zu berücksichtigen. Eine wesentliche Vereinfachung besteht dabei in der Annahme, daß atomare Wechselwirkung dominiert, während langreichweitige WW zu vernachlässigen sind. Auf dieser Basis wurden verschiedene Modellsysteme entwickelt, welche die Physik korrelierter Elektronensysteme erfolgreich beschreiben konnten. Realistisch ist diese Forderung nur im Fall starker Abschirmung wie in Metallen. Langreichweitige Coulomb-Wechselwirkungen lassen sich jedoch nur unzureichend in Mean-Field-Näherungen wie der Hartree-Fock-Näherung beschreiben.

2.2.1 Einband-Hubbard-Modell

Anfang der 1960er Jahre entwickelten Hubbard [Hub63][Hub64a][Hub64b], Kanamori [Kan63] und Gutzwiller [Gut63][Gut64] unabhängig voneinander zur Untersuchung wechselwirkender Elektronensysteme das Hubbard-Modell:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \hat{c}_{\sigma_i}^\dagger \hat{c}_{\sigma_j} - t' \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle, \sigma} \hat{c}_{\sigma_i}^\dagger \hat{c}_{\sigma_j} + U \sum_i \hat{n}_{\sigma_i} \hat{n}_{\sigma_i'} \quad (2.2)$$

Der Hamiltonian des Hubbard-Modells besteht zu einem aus dem Anteil der kinetischen Energie, wie er dem Tight-Binding-Modell (Glg. 2.1) entspricht. Zum anderen aus dem Anteil der lokalen Coulomb-Wechselwirkung, beschrieben durch einen gitterplatzunabhängigen Parameter U und die atomaren Besetzungszahlen $n_{\sigma_i} n_{\sigma_i'}$. Die Eigenschaften dieses Modells werden bestimmt durch das Verhältnis U/t respektive U/t' und t/t' bei Hinzunahme des Übernächsten-Nachbar-Hoppings t' . Einer verbreiteten Konvention folgend setzen wir im folgenden stets $t = 1\text{eV}$.

Für verschwindende Coulomb-Wechselwirkung ($U/t \rightarrow 0$) entspricht das Modell dem wechselwirkungsfreien Tight-Binding-Modell mit einem spinentarteten Band. Im umgekehrten Fall großer U wird diese Entartung aufgehoben und es bildet sich ein *oberes* sowie ein *unteres* Hubbard-Band. Bei halber Bandfüllung liegt die Fermi-Energie gerade zwischen beiden Bändern, so daß bei hinreichend großen U ein Metall-Isolatorübergang bekannt als Mott-Hubbard-Übergang[Mot90] auftritt. Auf diesem Weg läßt sich der antiferromagnetische Grundzustand der CuO_2 -Ebenen in *undotierten* Kuprat-Supraleitern verstehen.

Im Limes großer Wechselwirkungen $U/t \rightarrow \infty$ und halber Bandfüllung geht das Hubbard-Modell schließlich in das antiferromagnetische Heisenberg-Modell über[And63]:

$$\hat{H} = \sum_{\langle ij \rangle} -J_{ij} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \right) \quad (2.3)$$

Dessen Grundzustand ist in einer Dimension durch einen antiferromagnetischen Isolator gegeben, wie sich (allerdings nur in diesem Spezialfall) anhand exakter Diagona-

lisierung nachweisen läßt [Mat81].

Der Grundzustand des *dotierten* Einband-Hubbard-Modells weist dagegen eine Entmischung zwischen undotierten (halb gefüllten) und maximal dotierten Bereichen auf [Vis74].

2.2.2 Mehr-Band-Hubbard-Modelle

V.J. Emery schlug 1987 ein Dreiband-Hubbard-Modell [Eme87] zur Untersuchung der Kuprat-Supraleiter vor, das sowohl die Sauerstoff- als auch die Kupferorbitale berücksichtigt und neben der lokalen Hubbard-WW auch eine Nächste-Nachbar-WW zwischen Kupfer- und Sauerstoffatomen enthält. Vor allem aufgrund der Nächste-Nachbar-WW ist dieses Modell für numerische Verfahren nur schwer bzw. für die hier angewandte Gutzwiller-Methode überhaupt nicht mehr zugänglich. Unter Vernachlässigung der Sauerstoff-Orbitale läßt sich dieses Modell auf das einfacher zu handhabende Einband-Hubbard-Modell abbilden, daß neben verwandten Spin-Modellen wie dem Heisenberg- oder dem t-J-Modell die Grundlage für den überwiegenden Teil der numerischen Untersuchungen auf diesem Feld darstellt.

2.2.3 t-J-Modell

Das t-J Modell wurde 1977 von Josef Spałek et al. zur Untersuchung stark korrelierter fermionischer Systeme aus dem Hubbard-Modell abgeleitet [Spa07][SO77] und wurde später zum zweiten wichtigen Modellsystem für die Erforschung der Kuprat-Supraleiter. Es setzt sich zusammen aus einem Hopping-Anteil analog zum Hubbard-Modell und einer antiferromagnetischen Heisenberg-Wechselwirkung:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \hat{c}_{\sigma_i}^\dagger \hat{c}_{\sigma_j} + \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{n_i n_j}{4} \right) \quad (2.4)$$

mit einer gitterplatzabhängigen Kopplungskonstanten J_{ij} gegeben durch:

$$J_{ij} = 4t_{ij}^2/U. \quad (2.5)$$

Im Unterschied zum Hubbard-Modell sind im t-J-Modell sämtliche Doppelbesetzungen aus dem Hilbert-Raum ausgeschlossen; es läßt sich als Grenzfall das Einband-Hubbard-Modells für große Werte von U/t auffassen. Wie im Hubbard-Modell gibt es auch im dotierten t-J-Modell die Tendenz zur Entmischung. [vD91]

2.3 Unterschiede zwischen 1D und 2D Modellen

Wir erweitern den Parameterbereich um Systeme mit endlichem Übernächstem-Nachbar-Hopping $t' \neq 0$. Dabei ist hinsichtlich der Rolle von t' ein wesentlicher Unterschied zwischen 1-D und 2-D Modellen zu beachten: Im eindimensionalen Fall ist der übernächste Nachbar zum Gitterplatz i der Platz $i \pm 2$, im zweidimensionalen ist der übernächste Nachbar zum Gitterplatz (i, j) der Platz $(i \pm 1, j \pm 1)$ entlang der Flächendiagonalen. Während im Fall $t' = 0$ Hüpfprozesse im 2D-Modell nur entlang der unipolaren Raum-

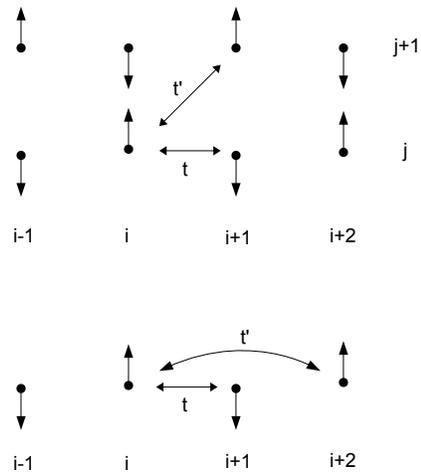


Abbildung 2.1: Übernächstes-Nachbar-Hopping in 1D und 2D

richtungen zu benachbarten Gitterplätzen auftreten, d.h. senkrecht zur Ausbreitungsrichtung der Streifen, tritt im Fall $t' \neq 0$ das Hopping entlang der Flächendiagonalen hinzu. Somit wird die physikalische Aussagekraft der quasi-eindimensionalen Näherung deutlich eingeschränkt und liefert nur für kleine Werte von t' ein physikalisch adäquates Modell für die CuO_2 -Ebenen der Kuprate. Gleichwohl weisen 1D und 2D Modelle gemeinsame Merkmale auf, die eine Fortführung der Untersuchung im 1D-Fall motivieren. So implizieren beide Modelle eine frustrierte Spinordnung für $t' \neq 0$. Im -unphysikalischen- Grenzfall $t' \gg t$ zerfällt das 1D-Modell und damit die Superzelleogeometrie in zwei ungekoppelte Systeme, die sich ihrerseits wie im Fall $t' = 0$ verhalten.

2.4 Numerische Studien in zwei Dimensionen

Im Hinblick auf die inhomogenen Ordnungsphänomene in den CuO_2 -Ebenen wurden dotierte Hubbard- und t-J-Modelle in 2D mit verschiedenen Verfahren untersucht. Exakte Diagonalisierungsverfahren eignen sich aufgrund des exponentiell mit der Systemgröße anwachsenden Speicherbedarfs nur für Systeme mit bis zu 40 Gitterplätzen, wodurch sich keine hinreichend große Superzellen bilden lassen.

2.4.1 Streifenstrukturen in Hartree-Fock-Näherung

J. Zaanen und O. Gunnarson [ZG89] untersuchten 1989 das schwach dotierte Emery-Modell [Eme87] in zwei Dimensionen in Hartree-Fock-Näherung. Dabei führten sie im Ortsraum zweidimensionale Superzellen mit periodischen Randbedingungen ein. Die Rechnungen lieferten erste Hinweise auf die Existenz von Streifen und deren Struktur: So ordneten sich die Löcher in parallelen Linien zwischen halbgefüllten antiferromagnetischen Bereichen an. Die Periodenlänge dieser Streifen betrug gerade $n_c = 1/d$. Ferner wurden die Streifen als Site-Centered identifiziert und konnten als phasenumkehrende Domänenwände bezeichnet werden. Die Resultate der Rechnungen hingen jedoch stark von der Wahl der jeweiligen Superzellen ab, so ergaben sich unter anderem auch echt zweidimensionale Ordnungen wie Ringstrukturen. Zeitgleich untersuchten Schulz [Sch89] und Machida [Mac89] ebenfalls in Hartree-Fock-Näherung Einband-Hubbard-Modelle und kamen zu ähnlichen Resultaten.

2.4.2 DMRG-Rechnungen

Ein Ansatz mittels Dichtematrix-Renormierungsgruppen (DMRG) zum t-J Modell in zwei Dimensionen wurde 1998 von S. White und D.J. Scalapino [WS98] entwickelt. Die Autoren untersuchten zunächst den Fall $d = 1/8$; dabei wurden den Rechnungen Cluster der Form $L \times 8$ zugrunde gelegt. Die Ergebnisse zeigten jeweils halbgefüllte Streifen (also $n_c = 8$) mit einem Phasensprung π . Dabei sind die Streifenstrukturen Bond-Centered und Site-Centered energetisch nur minimal verschieden, woraus die Autoren auf fluktuierende Ordnungen schlossen.

Später [WS99] [WS00] wurden Streifenstrukturen auch für andere Dotierungen nachgewiesen. Im Unterschied zu den Hartree-Fock-Ansätzen fand man für Dotierungen $0.17 < d$ die Abhängigkeit „halb gefüllte Streifen“ mit $n = 1/2d$, und für größere Dotierungen wieder den Wert $n = 1/d$. Auch diese Arbeiten wurden jedoch kontrovers beurteilt. Hauptkritikpunkt war wiederum die Abhängigkeit der Ergebnisse von der gewählten Clustergröße und den Randbedingungen.

2.4.3 Gutzwiller Rechnungen

Der Gutzwiller-Ansatz zu Ein- und Dreiband-Hubbard-Modellen wurde von der Gruppe von G. Seibold und J. Lorenzana entwickelt. Zunächst wurde dabei ein Einband-Hubbard-Modell mit zusätzlicher langreichweitiger Coulomb-Wechselwirkung (LRC) V diskutiert [SCDCG98]. Die Ergebnisse zeigten – im Gegensatz zu den Hartree-Fock-Rechnungen – halb gefüllte Streifen mit $n = 1/2d$. Die Stabilität der halb gefüllten Streifen führten die Autoren auf die LR-Coulomb-WW zurück und bestätigten damit eine Studie von Löw et. al zum Ising-Modell [LEFK94].

In jüngerer Zeit untersuchte die gleiche Gruppe [SBRL04] Gutzwiller-Wellenfunktionen zum Einband-Hubbard-Modell mit übernächstem-Nachbar-Hopping t' und fand wiederum Streifenstrukturen, wobei die Füllung der Streifen in diesem Fall durch das Verhältnis $|t'/t|$ bestimmt wurde. Allerdings waren in den Rechnungen die Fälle Bond-Centered, Site Centered und Diagonalstreifen energetisch nicht zu unterscheiden. Für hinreichend große $|t'/t|$ wurde auch ein Übergang zu Checkerboard-Strukturen gefunden [SL07].

2.5 Numerische Studien in einer Dimension

Der experimentelle Befund der eindimensionalen symmetriegebrochenen Zustände in den CuO_2 -Ebenen supraleitender Kuprate legt die Reduktion der mikroskopischen Modelle auf den eindimensionalen Fall nahe. Gleichwohl liegen entsprechende Studien zu 1D-Hubbard- und t-J-Modellen u.E. nicht vor.

Zwar zeigen auch zahlreiche numerische Studien in 2D Streifenstrukturen auf, die Aussagekraft dieser Rechnungen ist jedoch durch die Vorgabe von Superzellen in der Ebene eingeschränkt. Die Vielzahl möglicher symmetriegebrochener Zustände ließe sich nur unter numerisch kaum mehr vertretbarem Aufwand auf ein System von 2D-SZ abbilden.

2.5.1 Zielsetzung der Arbeit

In unserer Arbeit versuchen wir, den Grundzustand des dotierten eindimensionalen Einband-Hubbard-Modells in Abhängigkeit der Modellparameter t, t', d und U auf inhomogene Zustände hin zu untersuchen und die Struktur der magnetischen und der Ladungsordnung zu beschreiben. Das Konzept der Superzellen soll in unserem 1D-Ansatz übernommen werden. Zwar wird die Abhängigkeit der Grundzustände von der Superzelle nicht aufgehoben, im Gegensatz zum 2D-Fall lässt sich in einer Dimension jedem

symmetriegebrochenen Zustand auf ein-eindeutige Weise eine Superzelle zuordnen, was eine sinnvolle Klassifikation dieser Zustände erlaubt. Wir erhoffen uns von dieser Vorgehensweise zum einen umfassendere quantitative Aussagen über die erwähnten inhomogenen Zustände, als dies bisher in 2D-Superzellen-Rechnungen möglich war. Das Einband-Hubbard-Modell soll dabei anhand von Gutzwiller-Wellenfunktionen untersucht werden. Da die Gutzwiller-Methode in der Gutzwiller-Näherung eine Mean-Field-Näherung darstellt, können die entsprechenden Variationswellenfunktionen sehr wohl inhomogene Eigenschaften aufweisen.

So steht trotz zahlreicher numerischer Studien in 2D eine quantitative Analyse des magnetischen und des elektronischen Grundzustandes des dotierten Einband-Hubbard-Modells in einer Dimension in Abhängigkeit von Tight-Binding Parametern, Nächstem- und Übernächstem-Nachbar-Hopping, der Dotierung und der Stärke der Coulomb-Wechselwirkung nach wie vor aus und soll den Fokus der vorliegenden Arbeit bilden. Offen ist auch die Frage, ob sich Streifenstrukturen bereits aus der lokalen Coulomb-Wechselwirkung ergeben oder ob ggf. Effekte der langreichweitigen Coulomb-Wechselwirkung zu berücksichtigen sind.

Die Grundzustände zu den einzelnen Parametersätzen sollen im Rahmen der Gutzwiller-Näherung variationell bestimmt werden. Da der ursprüngliche Gutzwiller-Ansatz paramagnetische Lösungen liefert, wird das Verfahren um externe Variationsparameter erweitert, die eine Ausprägung symmetriegebrochener Zustände erlauben.

Kapitel 3

Gutzwiller-Formalismus

In diesem Kapitel wird zunächst eine Nomenklatur zur Beschreibung der Einteilchen- und Zweiteilchenzustände formuliert. Darauf basierend werden der Gutzwiller-Ansatz sowie die äußeren Variationsparameter eingeführt, schließlich wird noch die Berechnung der Wellenfunktionen im reziproken Raum erläutert.

3.1 Einteilchenbasen

Grundlage unserer Untersuchungen ist das eindimensionale Einband-Hubbard-Modell in einer Superzellen-Geometrie aus N äquidistant angeordneten Gitterplätzen i . Dabei nehmen wir periodische Randbedingungen an, alle physikalischen Eigenschaften an einem Gitterplatz $i' = i + N$ entsprechen also den Eigenschaften am Gitterplatz i . Für jeden Gitterplatz i betrachten wir den Hilbertraum des Spin-Operators

$$\hat{S}^i = \sigma_x^i + \sigma_y^i + \sigma_z^i \quad (3.1)$$

mit den jeweiligen Pauli-Matrizen. Als Basisvektoren wählen wir die Eigenzustände $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ von σ_z^i bzw. die zugehörigen Spinoren

$$\chi_+^i = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \chi_-^i = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

sowie Erzeuger und Vernichter:

$$|\gamma_i^+\rangle = \hat{h}_{\gamma_i^+}^\dagger |\emptyset\rangle = |\uparrow\rangle \quad (3.3)$$

$$|\gamma_i^-\rangle = \hat{h}_{\gamma_i^-}^\dagger |\emptyset\rangle = |\downarrow\rangle. \quad (3.4)$$

Die Eigenzustände an den einzelnen Gitterplätzen i, j werden mittels Transferoperatoren \hat{K}_{ij} ineinander überführt:

$$\hat{K}_{ij} = k_{ij}^\gamma \hat{h}_{\gamma_i}^\dagger \hat{h}_{\gamma_j}. \quad (3.5)$$

Wir betrachten dabei ausschließlich *isotrope* Systeme, in denen keine Kopplungen zwischen Spin und Raumrichtungen (etwa durch externe Felder oder Spin-Bahn-Kopplung) vorkommen. Damit gleichbedeutend ist die Forderung, daß die \hat{K}_{ij} mit beliebigen 2×2 Drehungen \hat{D}_θ kommutieren:

$$[\hat{K}_{ij}, \hat{D}_\theta] = 0 \quad \text{bzw.} \quad D_\theta^{-1} K_{ij} D_\theta = K_{ij} \quad (3.6)$$

Die Darstellungsmatrizen K_{ij} der Transferoperatoren sind also basisunabhängig. Diese Relationen erlauben eine Äquivalenzrelation zwischen Basen χ_\pm^i und χ_\pm^j an unterschiedlichen Gitterplätzen i, j :

Eine Basis χ_\pm^j am Platz j heißt *äquivalent* zu einer Basis χ_\pm^i an i , wenn gilt:

$$\chi_\pm^j = \hat{K}_{ij} \chi_\pm^i \quad \text{mit} \quad K_{ij} = \mathbb{1}. \quad (3.7)$$

Unitäre Transformationen in den lokalen Spinräumen lassen sich als Drehungen um eine Achse \mathbf{n}_i unter dem Winkel ϑ_i auffassen:

$$U_i(\vartheta_i) = \exp\left\{\frac{i}{2} \vartheta_i \mathbf{n}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}\right\} \quad (3.8)$$

Unter der Anwendung des Transferoperators \hat{K}_{ij} werden die lokalen Drehachsen \mathbf{n}_i entsprechend mit transformiert, wodurch wir eine globale Achse \mathbf{n} erhalten und daraus folgend eine gemeinsame Darstellung für Drehungen in den lokalen Spinräumen:

$$U(\vartheta_i) = \exp\left\{\frac{i}{2} \vartheta_i \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}\right\}. \quad (3.9)$$

Der Zustandsraum des Gesamtsystems $|\gamma\rangle$ setzt sich als direktes Produkt aus den lokalen Zustandsräumen zusammen. Dementsprechend definieren wir nun eine globale Basis des Gesamtsystems aus äquivalenten lokalen Basen:

$$|\gamma\rangle = |\gamma_1^+, \gamma_1^-, \gamma_2^+, \gamma_2^-, \dots, \gamma_N^+, \gamma_N^-\rangle \quad (3.10)$$

Da die lokalen Spin-Räume untereinander nicht koppeln, weisen die Einteilchen-Dichtematrizen in einer beliebigen normierten Einteilchen-Lösung $|\phi_0\rangle$:

$$C_{\gamma_i, \gamma_i'}^0 = \langle \phi_0 | \hat{h}_{\gamma_i}^\dagger \hat{h}_{\gamma_i} | \phi_0 \rangle \quad (3.11)$$

eine blockdiagonale Struktur aus 2×2 -Blöcken entlang der Hauptdiagonalen auf. Durch geeignete unitäre Transformationen lässt sich eine Basis

$$|\sigma\rangle = |\sigma_1^+, \sigma_1^-, \sigma_2^+, \sigma_2^-, \dots, \sigma_N^+, \sigma_N^-\rangle \quad (3.12)$$

finden, in der die Dichtematrix Diagonalgestalt annimmt:

$$C_{\sigma_i, \sigma_i'}^0 = \langle \phi_0 | \hat{c}_{\sigma_i}^\dagger \hat{c}_{\sigma_i} | \phi_0 \rangle = n_{\sigma_i} \delta_{\sigma_i, \sigma_i'}. \quad (3.13)$$

Die Basen $|\gamma_i^+\rangle, |\gamma_i^-\rangle$ und $|\sigma_i^+\rangle, |\sigma_i^-\rangle$ bzw. die zugehörigen Erzeuger- und Vernichter lassen sich dabei über unitäre Transformationen ineinander überführen:

$$\hat{h}_{\sigma_i}^\dagger = \sum_{\gamma_i} \hat{F}_{\sigma_i}^{\gamma_i \dagger} \hat{c}_{\gamma_i}^\dagger \quad \hat{h}_{\sigma_i} = \sum_{\gamma_i} \hat{F}_{\sigma_i}^{\gamma_i} \hat{c}_{\gamma_i} \quad (3.14)$$

Die Operatoren \hat{F}^\dagger und \hat{F} lassen sich dabei als die Drehmatrizen U_i zu einem geeigneten Winkel ϑ_i schreiben:

$$\hat{F}_{\sigma_i}^{\gamma_i} = U(\vartheta_i) \quad \hat{F}_{\sigma_i}^{\gamma_i^\dagger} = U^\dagger(\vartheta_i) \quad (3.15)$$

Im Spezialfall $\vartheta_i = 0 \quad \forall i = 1, \dots, N$ lässt sich eine globale Basis

$$|\sigma\rangle = |\sigma_1^+, \sigma_1^-, \sigma_2^+, \sigma_2^-, \dots, \sigma_N^+, \sigma_N^-\rangle \quad (3.16)$$

finden. Im folgenden werden wir diesen Fall als *kollineares System* bezeichnen.

3.1.1 Darstellungsoperatoren

Wir definieren für die Diagonalbasen $|\sigma_i^+\rangle, |\sigma_i^-\rangle$ die Besetzungsoperatoren

$$\hat{n}_{\sigma_i^+} = \hat{c}_{\sigma_i^+}^\dagger \hat{c}_{\sigma_i^+} \quad \hat{n}_{\sigma_i^-} = \hat{c}_{\sigma_i^-}^\dagger \hat{c}_{\sigma_i^-} \quad (3.17)$$

sowie den Operator der Doppelbesetzung

$$\hat{m}_{i;12} = |\sigma_i^+, \sigma_i^-\rangle \langle \sigma_i^+, \sigma_i^-| \quad (3.18)$$

Hieraus konstruieren wir den Operator der Leerbesetzung aus der Vollständigkeitsrelation

$$\hat{m}_{i;0} = 1 - \hat{n}_{\sigma_i^+} - \hat{n}_{\sigma_i^-} + \hat{m}_{i;12} \quad (3.19)$$

Einer Sprachkonvention der Arbeitsgruppe folgend definieren wir neben den „Brutto-Operatoren“ noch die „Netto-Operatoren“

$$\hat{m}_{\sigma_i^+} = \hat{n}_{\sigma_i^+} - \hat{m}_{i;12} \quad (3.20)$$

$$\hat{m}_{\sigma_i^-} = \hat{n}_{\sigma_i^-} - \hat{m}_{i;12} \quad (3.21)$$

Für einen gegebenen Zustand $|\gamma\rangle$ werden die Erwartungswerte $n_{\sigma_i^\pm}$ und die Winkel ϑ_i durch Diagonalisierung aus der zugehörigen Dichtematrix bestimmt.

3.1.2 Magnetische Momente

Die lokalen Spinzustände lassen sich anhand der Besetzungszahlen n_i^\pm aus (3.8) und des Drehwinkels ϑ_i (3.17) in ein zweidimensionales Vektormodell überführen. Der Zustand γ_i^\pm entspricht einem Vektor \vec{S}_i^\pm der Länge n_i^\pm und dem Winkel ϑ_i zur y-Achse

$$\vec{S}_i^\pm = n_i^\pm \begin{pmatrix} \sin \vartheta_i \\ \cos \vartheta_i \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

Jedem lokalen Spinoperator \hat{S}^i ist auf kanonische Weise ein magnetisches Moment $\hat{\mu}_i$ zugeordnet:

$$\hat{\mu}_i = g \frac{e}{2mc} \hat{S}^i. \quad (3.23)$$

In der Spindarstellung lauten die Momente:

$$\vec{M}_i^\pm = g\vec{S}_i^\pm \quad (3.24)$$

Die lokale Magnetisierung ergibt sich aus der Differenz der beiden Spinzustände

$$\vec{M}_i = \vec{M}_i^+ - \vec{M}_i^- = g(n_i^+ - n_i^-) \begin{pmatrix} \sin\vartheta_i \\ \cos\vartheta_i \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

3.1.3 Ordnungsparameter

Die Ladungsinhomogenitäten lassen sich anhand eines skalaren Ordnungsparameters (OP) beschreiben. Dabei eignet sich als OP für die Ladungsverteilung die Abweichung der lokalen Besetzung n_i von der mittleren Ladung $\rho = \frac{1}{2} - d$ bei einer Dotierung d relativ zur halben Bandfüllung:

$$\varphi_i^c = n_i - \rho \quad (3.26)$$

Die vektoriellen Erwartungswerte \vec{M}_i der lokalen Magnetisierung ergeben je einen OP für den Betrag und die Ausrichtung der jeweiligen Momente. Als OP der Ausrichtung wählen wir die Ausrichtungswinkel ϑ_i aus Glg.3.8 und für den Betrag:

$$\varphi_i^\mu = |\vec{M}_i| \quad (3.27)$$

Die OP φ_i^μ und φ_i^c lassen sich als $\varphi_i^{\mu;c}$ zusammenfassen.

3.2 Das Hubbard-Modell

Wir können nun den Hamiltonian des Ein-Band-Hubbard-Modells in unserer Einteilchen-Basis formulieren. Dabei betrachten wir zunächst den Anteil der kinetischen Energie. Im Falle einer Diagonalebasis verschwinden alle nicht-diagonalen Elemente der Hopping-Matrizen, ebenso sind beide Diagonalelemente gleich:

$$t_{\sigma_j}^{\sigma_i} = t \delta_{\sigma_i \sigma_j} \quad i = i \pm 1 \quad (3.28)$$

$$t'_{\sigma_j}^{\sigma_i} = t' \delta_{\sigma_i \sigma_j} \quad i = i \pm 2 \quad (3.29)$$

$$\hat{H}_{kin} = -t \sum_{i,j=i\pm 1} \sum_{\sigma_i, \sigma_j} \hat{c}_{\sigma_i}^\dagger \hat{c}_{\sigma_j} - t' \sum_{i,j=i\pm 2} \sum_{\sigma_i, \sigma_j} \hat{c}_{\sigma_i}^\dagger \hat{c}_{\sigma_j} \quad (3.30)$$

Im allgemeinen Fall sind die Matrizen entsprechend mitzutransformieren

$$t_{ij} = t_{ij}^\gamma = \hat{F}_{\sigma_i}^\gamma \dagger t_{\sigma_i}^{\sigma_j} \hat{F}_{\sigma_j}^{\sigma_j} \quad (3.31)$$

Der Wechselwirkungsterm ist gegeben durch:

$$\hat{H}_{int} = U \sum_i \hat{m}_{i,12}. \quad (3.32)$$

Die Wechselwirkung wird im Ein-Band-Hubbard-Modell als gitterplatz-unabhängige Coulomb-Abstoßung zwischen Elektronen am gleichen Gitterplatz in jeweils verschiedenen Spin-Zuständen angenommen. Im Ein-Band-Fall gibt es pro Gitterplatz nur zwei Spin-Zustände und somit nur einen Zwei-Teilchen-Operator, weshalb als Parameter lediglich ein U auftaucht.

3.3 Gutzwiller-Wellenfunktionen

3.3.1 Gutzwiller-Korrelator

Zur Untersuchung des Einband-Hubbard-Modells (vgl.2.2.1) führte M. Gutzwiller die nach ihm benannten variationellen Wellenfunktionen ein [Gut63] [Gut64][Gut65]. Gutzwiller-Wellenfunktionen werden aus den unkorrelierten Einteilchen-Eigenzuständen mittels eines Projektionsoperators berechnet:

$$|\phi_G\rangle = \hat{P}_G |\phi_0\rangle = \prod_i \hat{P}_{G;i} |\phi_0\rangle. \quad (3.33)$$

Der Gutzwiller-Korrelator \hat{P}_G lässt sich als Produkt lokaler Korrelatoren $\hat{P}_{G;i}$ auffassen. Dabei bezeichnet $|\phi_0\rangle$ eine beliebige, normierte Lösung des Ein-Teilchen-Problems. Die lokalen Faktoren $\hat{P}_{G;i}$ des Gutzwillerkorrelators werden bestimmt durch die Doppelbesetzungsooperatoren $\hat{m}_{i;12}$ und einen reellen Parameter g_i :

$$P_{G;i} = g^{\hat{m}_{i;12}} = (1 + (g_i - 1))\hat{m}_{i;12} \quad (3.34)$$

3.3.2 Erwartungswerte in der Gutzwiller-Näherung

Die explizite Auswertung von Erwartungswerten in der Gutzwiller-Wellenfunktion führt auf eine hypergeometrische Reihe in den Doppelbesetzungen m_i . Gutzwiller führte hierzu eine Näherungsformel ein, in dem er diese Reihe durch ihr führendes Glied ersetzte [Gut65]. Diese Gutzwiller-Näherung wird im Limes unendlicher Raumdimensionen $D = \infty$ exakt, der entsprechende Fehler für endliche Raumdimensionen in Abhängigkeit von D wurde von F. Gebhard [Geb90] bestimmt. Dieser Fehler wird zwar im Fall $D = 1$ maximal, erlaubt aber auch in diesem Fall hinreichend genaue Berechnungen von Erwartungswerten. Eine detaillierte Herleitung der Gutzwiller-Näherung in einer Raumdimension findet sich in der Arbeit von J. Bünemann[Bün98].

Im folgenden bezeichnen wir Erwartungswerte eines Operators \hat{A} in unkorrelierten bzw. korrelierten Wellenfunktionen mit

$$A^0 = \langle \hat{A} \rangle_0 = \langle \phi_0 | \hat{A} | \phi_0 \rangle \quad (3.35)$$

$$A^G = \langle \hat{A} \rangle_G = \frac{\langle \phi_G | \hat{A} | \phi_G \rangle}{\langle \phi_G | \phi_G \rangle} \quad (3.36)$$

Der Nenner in der letzten Gleichung wird erforderlich, da im allgemeinen die korrelierte Wellenfunktion $|\phi_G\rangle$ nicht mehr normiert ist.

Wir wollen nun den Erwartungswert des Modell-Hamiltonians in der Gutzwiller-Näherung explizit bestimmen. Dabei betrachten wir zunächst nur kollineare Systeme:

$$E_{tot} = \langle \hat{H} \rangle_G = \sum_{\sigma_i, \sigma_j} t_{\sigma_j}^{\sigma_i} \langle \hat{c}_{\sigma_i}^\dagger \hat{c}_{\sigma_j} \rangle_G + \sum_{\sigma_i, \sigma_j} t_{\sigma_j}^{\prime \sigma_i} \langle \hat{c}_{\sigma_i}^\dagger \hat{c}_{\sigma_j} \rangle_G + U \sum_i \langle \hat{m}_{i,12} \rangle_G \quad (3.37)$$

Die Gesamtenergie E_{tot} teilt sich offensichtlich in einen Anteil an kinetischer Energie E_{kin} und die Wechselwirkungsenergie E_{ww} auf. Wir bestimmen zunächst den Anteil der Wechselwirkungsenergie. Hierzu berechnen wir den Erwartungswert des Doppelbesetzungsoperators in der Gutzwiller-Näherung:

$$E_{ww} = U \sum_i \langle \hat{m}_{i,12} \rangle_G \quad (3.38)$$

Hieraus erhalten wir einen Ausdruck für die reellen Variationsparameter g_i

$$g_i^2 = \frac{m_{i,12} m_{i,0}}{m_{\sigma_i^+} m_{\sigma_i^-}}. \quad (3.39)$$

Für die Bestimmung der kinetischer Energie betrachten wir zunächst den Spezialfall diagonalen Dichtematrizen. Die Auswertung der Hopping-Erwartungswerte führt auf den Ausdruck:

$$\langle \hat{c}_{\sigma_i^+}^\dagger \hat{c}_{\sigma_j^+} \rangle = \sqrt{q_{\sigma_i^+} q_{\sigma_j^+}} \langle \hat{c}_{\sigma_i^+}^\dagger \hat{c}_{\sigma_j^+} \rangle_0 \quad (3.40)$$

$$\langle \hat{c}_{\sigma_i^-}^\dagger \hat{c}_{\sigma_j^-} \rangle = \sqrt{q_{\sigma_i^-} q_{\sigma_j^-}} \langle \hat{c}_{\sigma_i^-}^\dagger \hat{c}_{\sigma_j^-} \rangle_0 \quad (3.41)$$

Die Hopping-Reduktionsfaktoren $q_{\sigma_i^+}$ und $q_{\sigma_i^-}$ sind gegeben durch:

$$q_{\sigma_i^+} = \frac{1}{n_{\sigma_i^+} (1 - n_{\sigma_i^+})} (\sqrt{m_{i,0} m_{\sigma_i^+}} + \sqrt{m_{i,12} m_{\sigma_i^-}}) \quad (3.42)$$

$$q_{\sigma_i^-} = \frac{1}{n_{\sigma_i^-} (1 - n_{\sigma_i^-})} (\sqrt{m_{i,0} m_{\sigma_i^-}} + \sqrt{m_{i,12} m_{\sigma_i^+}}). \quad (3.43)$$

Im Fall beliebiger blockdiagonaler Dichtematrizen sind die Hopping-Reduktionsfaktoren durch geeignete Transformationen in die globale Basis zu überführen:

$$Q_{\sigma_i^+}^{\sigma_i^-} = \begin{pmatrix} \sqrt{q_{\sigma_i^+}} & 0 \\ 0 & \sqrt{q_{\sigma_i^-}} \end{pmatrix} \quad (3.44)$$

Die diagonalen Q-Matrizen werden dann in die lokalen Basen zurückgedreht:

$$Q_i = Q_{\gamma_i}^{\gamma_i} = F_{\sigma_i^+}^{\gamma_i^\dagger} Q_{\sigma_i^-}^{\sigma_i^+} F_{\gamma_i}^{\sigma_i^-} \quad (3.45)$$

Als Ausdruck für die Gesamtenergie folgt:

$$\langle \hat{H} \rangle_G = \sum_{i \neq j} Q_i^{\gamma_i} t_{ij}^{\gamma_j} (Q_j^{\gamma_j})^T \langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j \rangle_0 + U \sum_i \hat{m}_{i,12} \quad (3.46)$$

$$= \sum_{i \neq j} Q_i t_{ij} Q_j^T \langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j \rangle_0 + U \sum_i \hat{m}_{i,12}. \quad (3.47)$$

Die Hopping-Parameter t_{ij} und die Hopping-Reduktions-Matrizen Q_i lassen sich zu effektiven Tight-Binding-Parametern zusammenfassen:

$$\tilde{t}_{ij} = Q_i t_{ij} Q_j^T \quad (3.48)$$

In beiden Fällen können wir die Variationsparameter durch die variationelle Grundzustandsenergie als Funktional der gitterplatz-abhängigen Doppelbesetzungsoperatoren $\hat{m}_{i,12}$ formulieren:

$$E_{tot} = E_{tot} \{ \hat{m}_{i,12} \} \quad (3.49)$$

Dabei ist zu beachten, daß nach dem Ritzschen Variationsprinzip der Erwartungswert des kinetischen Anteils des Modell-Hamiltonians in der Gutzwiller-Wellenfunktion stets größer oder gleich dem entsprechenden Erwartungswert in der unkorrelierten Wellenfunktion ist:

$$\langle \hat{H} \rangle_G^{kin} \geq \langle \hat{H} \rangle_0^{kin} \quad (3.50)$$

Wird diese Energiedifferenz durch die Wechselwirkungsenergie überkompensiert, ergibt sich eine korrelierte Wellenfunktion als Grundzustand.

3.4 Äußere Variationsfelder

In der bisher betrachteten Form beschreiben die Gutzwiller-Wellenfunktionen paramagnetische Grundzustände. Um die mögliche Ausprägung von magnetischen Momenten und Ladungsfluktuationen untersuchen zu können, erweitern wir Gutzwillers ursprünglichen Ansatz. Die Vorgaben unseres Modells erlauben drei Freiheitsgrade pro Gitterplatz i :

- Die Erwartungswerte der lokalen Besetzungsoperatoren n_i unter Berücksichtigung der vorgegebenen Teilchenzahl
- Die Erwartungswerte der beiden Spinzustände n_{σ_i} $n_{\sigma'_i}$ bzw. der Betrag des magnetischen Moments μ_i
- Ausrichtung der magnetischen Achse ϑ_i

Die Variationswellenfunktionen ϕ^{eff} werden gebildet als Eigenzustände des effektiven Hamiltonians

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{H}_{kin}^{\text{eff}} + \hat{H}_{int} + \sum_i \hat{B}_i + \sum_i \hat{A}_i \quad (3.51)$$

3.4.1 Austauschfelder

Das Austauschfeld B bezeichnet ein Pseudo-Magnetfeld, das die Entartung der Spin-zustände $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ aufheben soll. Zwar führt dies zu einer Erhöhung der Energie im Einteilchen-Sektor, was jedoch durch Minimierung der Doppelbesetzungsenergie überkompensiert werden kann. Der Austausch-Operator \hat{B} setzt sich additiv aus Operatoren B_i zusammen. Diese sind in Polarkoordinaten-Darstellung gegeben durch den Betrag B_i und einen Drehwinkel θ_i

$$\hat{B}_i = B_i(\hat{c}_{\gamma_i^+}^\dagger, \hat{c}_{\gamma_i^-}^\dagger) \begin{pmatrix} \cos(\theta_i) & -\sin(\theta_i) \\ \sin(\theta_i) & \cos(\theta_i) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{\gamma_i^+}^\dagger \\ \hat{c}_{\gamma_i^-}^\dagger \end{pmatrix} \quad (3.52)$$

Im Falle eines kollinearen Systems nimmt θ_i nur die Werte 0 und π an. Somit vereinfacht sich der Hamiltonian zu

$$\hat{B}_i = \pm B_i [\hat{c}_{\sigma_i^+}^\dagger \hat{c}_{\sigma_i^+} - \hat{c}_{\sigma_i^-}^\dagger \hat{c}_{\sigma_i^-}] \quad (3.53)$$

Der Operator \hat{B} bewirkt im effektiven Hamiltonian \hat{H}^{eff} eine Aufspaltung der beiden lokalen Spin-Niveaus unter dem Winkel θ_i . Dadurch kommt es ggf. zur Ausprägung eines magnetischen Moments unter dem Winkel ϑ_i . Die Winkel θ_i und ϑ_i müssen nicht übereinstimmen.

3.4.2 Orbital-Verschiebung

Die skalare Orbitalverschiebung A bewirkt eine Verschiebung der atomaren Einteilchenenergien, die im paramagnetischen Zustand entartet sind. In einer Superzelle wird diese Entartung jedoch durch die Austauschspaltung aufgehoben, was innerhalb der Streifenstrukturen zu einem Ladungsfluss zwischen Teilbereichen mit fast halber Bandfüllung und ladungsträgerverarmten Bereichen führt. Mittels der Orbitalverschiebung soll dieser ggf. kompensiert werden.

$$\hat{A}_i = A_i \sum_{\sigma_i} \hat{c}_{\sigma_i}^\dagger \hat{c}_{\sigma_i} \quad (3.54)$$

3.5 Bestimmung des variationellen Grundzustandes

Wir zeigen nun die Berechnung der variationellen Grundzustandswellenfunktion und des entsprechenden Energie-Erwartungswertes zu einem gegebenen Satz äußerer Variationsparameter B_i, A_i, θ_i . Die Berechnung wird in einem Selbstkonsistenz-Zyklus durchgeführt, wobei jeder Iterationsschritt jeweils aus der Berechnung der effektiven Ein-Teilchen-Wellenfunktion und der anschließenden Variation der Doppelbesetzungen besteht.

3.5.1 Einteilchen-Wellenfunktionen

Wir ergänzen zunächst die Indizes der Ein-Teilchen-Operatoren $\hat{c}_{\gamma_i}^\dagger$ und \hat{c}_{γ_i} um Indizes κ der jeweiligen Superzellen:

$$|\gamma_{i;\kappa}^+\rangle = \hat{c}_{\gamma_{i;\kappa}^+}^\dagger |\emptyset\rangle \quad (3.55)$$

$$|\gamma_{i;\kappa}^-\rangle = \hat{c}_{\gamma_{i;\kappa}^-}^\dagger |\emptyset\rangle \quad (3.56)$$

Somit folgt für den kinetischen Teil des effektiven Hamiltonians:

$$T_{1;l';\kappa;\kappa'}(k) = t_{1;l';\kappa;\kappa'} e^{ik(R_l - R_{l'} + r_\kappa - r_{\kappa'})} \quad (3.57)$$

Dabei geben die Werte r_κ die jeweilige Superzelle an, während R_l die Atome innerhalb der Superzelle bezeichnet. Wir bilden nun für jeden ausgewählten k -Punkt den zugehörigen transformierten Hamiltonian. Dabei ist zu beachten, daß lokale Beiträge bis auf den Faktor $\frac{1}{N}$ unverändert bleiben:

$$\tilde{T}(k) = Q_i T_{ij}(k) Q_j^T \quad (3.58)$$

$$\hat{H}^{\text{eff}}(k) = \sum_{i \neq j} Q_i T_{ij} Q_j^T \hat{c}_{\gamma_i}^\dagger \hat{c}_{\gamma_j} + \hat{B} + \hat{A} \quad (3.59)$$

Wir bestimmen nun durch Diagonalisierung die Eigenwerte E_{k_μ} und Eigenvektoren $|\phi_{k_\mu}\rangle$:

$$\hat{H}^{\text{eff}} |\phi_{k_\mu}\rangle = E_{k_\mu} |\phi_{k_\mu}\rangle \quad (3.60)$$

Um die Wellenfunktion im Ortsraum zu erhalten, ordnen wir die einzelnen Zustände $|\phi_{k_\mu}\rangle$ aufsteigend nach ihrem Energieeigenwert E_{k_μ} und zählen dabei die Anzahl der Zustände ab. Die vorgegebene Dotierung des Systems geht dabei als Anteil der besetzten Zustände an der Gesamtzahl der Zustände in die Rechnung ein. Die Energie des höchsten besetzten Zustandes ist gerade die Fermienergie E_{k_μ} . Dabei gilt:

$$P = \begin{cases} 1 & E_{k_\mu} < E_{k_F} \\ 0 & E_{k_\mu} > E_{k_F} \end{cases} \quad (3.61)$$

Davon abweichend werden bestimmten Zustandsindizes modifizierte Gewichtungsfaktoren zugeordnet, sollte der Zustand der Fermi-Energie Entartungen aufweisen. Daneben ist es in bestimmten Fällen zu Erreichen der Selbstkonsistenz sinnvoll, beim Fermi-Faktor eine effektive Temperatur einzuführen, was im Zusammenhang mit der numerischen Durchführung der Studie erörtert werden soll.

$$|\phi\rangle = \sum_{k_\mu \leq k_F} P_{k_\mu} |\phi_{k_\mu}\rangle \quad (3.62)$$

Der kinetische Anteil an der Gesamtenergie lässt sich schreiben als Tensor in den Komponenten

$$E_{\gamma_i:\gamma_j}^{\gamma_i:\gamma_j} = \sum_{k_\mu \leq k_F} \phi_{\gamma_i}^{k_\mu} \tilde{T}_{\gamma_j}^{\gamma_i}(k_\mu) \phi_{\gamma_j}^{k_\mu} \quad (3.63)$$

$$\langle E_{kin} \rangle = \sum_{\gamma_i; \gamma_j; \gamma_i; \gamma_j} E_{\gamma_i; \gamma_j}^{\gamma_i; \gamma_j} Q_i Q_j^T \quad (3.64)$$

3.5.2 Minimierung der Doppelbesetzungen

Zu einem vorgegebenen Satz äußerer Parameter B_i, A_i, θ_i wird die entsprechende Grundzustandswellenfunktion über ein Selbstkonsistenzverfahren berechnet. Die Ausgangswellenfunktion $|\phi\rangle_0^{AB}$ wird dabei durch Diagonalisierung des \hat{H}_0^{AB} berechnet. Der Startwert der Hopping-Reduktionsmatrix in diesem Fall gegeben durch die 2×2 -Einheitsmatrix:

$$Q_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.65)$$

Die variationelle Grundzustandsenergie lässt sich als Erwartungswert eines renormierten Modell-Hamiltonians formulieren:

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{AB} = \sum_{i,j} \tilde{t}_{ij} \left\langle \hat{c}_{\gamma_i}^\dagger \hat{c}_{\gamma_j} \right\rangle_0^{AB} + U \sum_i m_{i,12} \quad (3.66)$$

Nun wird der Energieausdruck $\langle \hat{H} \rangle_{AB}$ durch Variation der $m_{i,12}$ minimiert, woraus sich eine iterierte Wellenfunktion $|\phi\rangle^{(1)}$ nebst zugehörigen Hopping-Reduktionsmatrizen $Q_{\gamma_i}^{\gamma_i(1)}$ und somit einem renormierten effektiven Hamiltonian ergibt:

$$\hat{H}_{\text{eff}}^1 = Q_i^{(0)} t_{ij} Q_j^{(0)T} c_{\gamma_i}^\dagger c_{\gamma_j} + \hat{B} + \hat{A} \quad (3.67)$$

Dieses Verfahren lässt sich nun fortführen, indem der k -te Modellhamiltonian rekursiv aus den Hopping-Reduktionsmatrizen des vorhergegangenen Zyklus gewonnen wird:

$$\hat{H}_{\text{eff}}^k = Q_i^{(k-1)} t_{ij} Q_j^{(k-1)T} c_{\gamma_i}^\dagger c_{\gamma_j} + \hat{B} + \hat{A} \quad (3.68)$$

Die Iteration wird nun bis zum Erreichen einer Abbruch-Bedingung fortgeführt:

$$|\langle \hat{H} \rangle^{AB;k} - \hat{H}^{AB;k-1}| < \varepsilon \quad (3.69)$$

Der Ablauf der Iteration ist in Abb.3.1 als Flußdiagramm zusammengefasst:

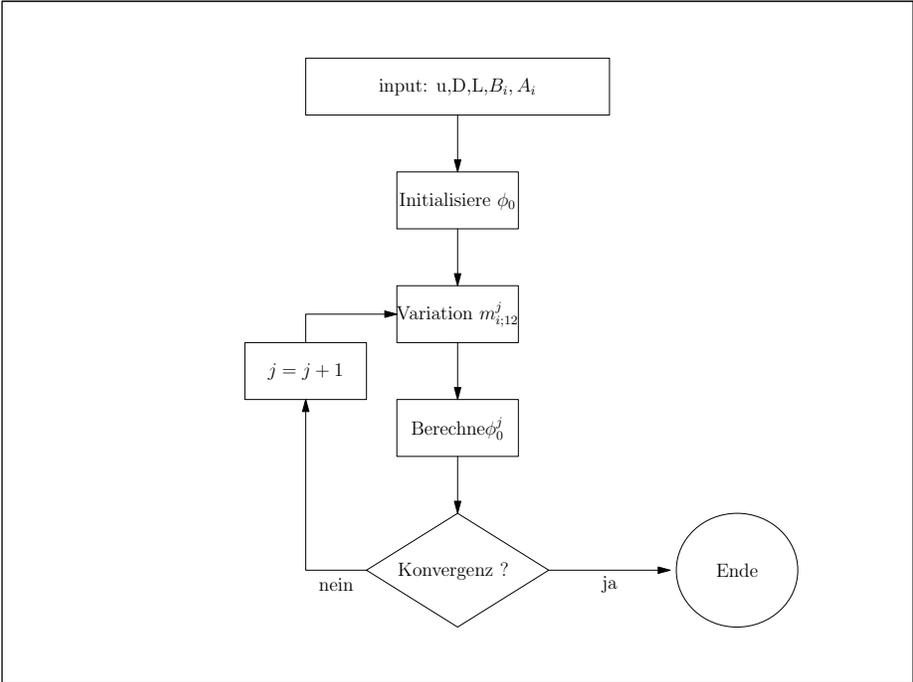


Abbildung 3.1: Flußdiagramm der Minimierung

Kapitel 4

Numerische Durchführung

4.1 Symmetriebrechung durch Superzellen

Ohne Vorgabe von Superzellen und äußeren Variationsparametern liefert die Gutzwiller-Näherung an das eindimensionale Einband-Hubbard-Modell einen räumlich homogenen Grundzustand für sämtliche Dotierungen, Tight-Binding-Parameter und Wechselwirkungen. Diese Symmetrie wird aber bereits durch die Forderung nach periodischen Randbedingungen und die Symmetrie-Bedingungen seitens der Superzellen gebrochen, was sich u.a. in der Bandstruktur durch die Aufprägung eines entsprechenden reziproken Gitters äußert. In unserer Arbeit verfolgen wir das Konzept der Symmetriebrechung durch Superzellen. Dabei geht die Struktur der vorgegebenen Superzelle auf zwei Wegen in den zugehörigen variationellen Grundzustand ein:

4.1.1 Äußere Symmetriebrechung

Die äußere Symmetriebrechung legt die Periodizität und die zugehörigen Symmetrieeoperatoren der jeweils vorgegebene Superzelle den Variationsparametern B , A und damit implizit auch den effektiven Hamiltonians $\hat{H}_{\text{eff}}^{AB}$ zugrunde. Deren Symmetrien übertragen sich wiederum auf die Eigenvektoren und Erwartungswerte, wobei durch den Prozess der numerischen Diagonalisierung Abweichungen im Rahmen der Rechengenauigkeit auftreten können. Zwar sind die Variationsparameter B und A einerseits und das Ordnungsparameterfeld $(\phi^{c,\mu}, \vartheta)$ in der Darstellung zu unterscheiden, beide genügen jedoch den gleichen Symmetrie- und Randbedingungen:

Die Differenzen $\Delta\theta_i$ zwischen den Winkeln θ_i des Austauschfeldes \vec{B}_i und ϑ_i der Momente \vec{M}_i genügen den Symmetrieeoperatoren \hat{O} der jeweiligen Superzellen sowie den periodischen Randbedingungen:

$$\hat{O}_{ij}\Delta\theta_i = \pm\Delta\theta_j \quad \Delta\theta_i = \Delta\theta_{i+N} \quad (4.1)$$

Der OP ϕ_i^c der Ladungswellen erfüllt die gleichen Symmetriebedingungen wie die Or-

bitalverschiebung A_i

$$\hat{O}_{ij}A_i = A_i \Leftrightarrow \hat{O}_{ij}\varphi_i^c = \varphi_i^c \quad (4.2)$$

Analog gilt für Betrag B_i des Austauschfeldes und φ_i^μ :

$$\hat{O}_{ij}B_i = B_i \Leftrightarrow \hat{O}_{ij}\varphi_i^\mu = \varphi_i^\mu \quad (4.3)$$

4.1.2 Innere Symmetriebrechung

Durch die Symmetriebedingungen können wir eine Äquivalenzrelation auf der Menge der Gitterplätze einführen:

Zwei Gitterplätze i, j mit $i \neq j$ heißen *äquivalent* wenn sie im Betrag ihre Ordnungsparameter der Ladung und des Betrags des Moments übereinstimmen:

$$\varphi_i^{\mu;c} = \hat{O}_{ij}\varphi_j^{\mu;c} \quad (4.4)$$

Die *innere Symmetrisierung* bezieht sich auf die Variation der jeweiligen Doppelbesetzungen m_i . Offensichtlich ist für äquivalente Gitterplätze i, j eine identische Doppelbesetzung zu erwarten:

$$\varphi_i^{\mu;c} = \hat{O}_{ij}\varphi_j^{\mu;c} \Rightarrow m_i = m_j \quad (4.5)$$

Daher sind wir dazu übergegangen, die Doppelbesetzungen jeweils repräsentativ für die jeweilige Äquivalenzklasse zu minimieren.

4.2 Streifen-Superzellen

4.2.1 Symmetrieoperatoren

Symmetrieoperatoren lassen sich im eindimensionalen Fall in Translationen und Drehungen klassifizieren, wobei die Spiegelungen und Inversionen als Spezialfälle der Drehung aufgefaßt werden können.

Translationen

Der Translationsoperator \hat{T}_L beschreibt die Verschiebung in den jeweiligen Ordnungsparametern um L Gitterplätze.

$$\hat{T}_L(\varphi_i^{\mu;c}, \vartheta_i) = (\varphi_{i+L}^{\mu;c}, \vartheta_{i+L}) \quad (4.6)$$

Damit läßt sich unsere Forderung nach periodischen Randbedingungen für die Streifen-Superzellen formulieren

$$\hat{T}_N(\varphi_i^{\mu;c}, \vartheta_i) = (\varphi_i^{\mu;c}, \vartheta_i) \quad (4.7)$$

Inversionen

Die Inversionsoperatoren \hat{P}_a und \hat{P}_a werden durch ein Inversionszentrum definiert, das sich entweder auf einem Atom (Site) oder auf dem Mittelpunkt zwischen zwei Atomen (Bond) befinden kann, dementsprechend werden Inversionen als Site-Centered bzw. Bond-Centered bezeichnet. Der Inversionsoperator an einem Punkt a erhält Ladung und den Betrag der magnetischen Momente, während er die Ausrichtung ϑ_i der Momente umkehrt

$$\hat{P}_a \varphi_{i+a}^{c;\mu} = \varphi_{-i+a}^{c;\mu} \quad a \in \{1, 2, \dots, N\} \quad (4.8)$$

$$\hat{P}_a \vartheta_{i+a} = \vartheta_{-i+a} + \pi \quad a \in \{1, 2, \dots, N\} \quad (4.9)$$

Analog lautet der Operator im Bond-Centered-Fall:

$$\hat{P}_b \varphi_{i+b+\frac{1}{2}}^{\mu;c} = \varphi_{-i+b+\frac{1}{2}}^{\mu;c} \quad b \in \left\{ \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, \frac{N-1}{2} \right\} \quad (4.10)$$

$$\hat{P}_b \vartheta_{i+b+\frac{1}{2}} = \vartheta_{-i+b+\frac{1}{2}} + \pi \quad b \in \left\{ \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, \frac{N-1}{2} \right\} \quad (4.11)$$

In einem zweidimensionalen Vektormodell entsprechen die Inversionen somit gerade den Punktspiegelungen.

Spiegelungen

Wir betrachten weiterhin Spiegelungen an Achsen senkrecht zur atomaren Anordnung. Auch Spiegelungen werden in Platzzentriert und Mittenzentriert unterteilt, je nachdem ob die Spiegelachse die Kette zwischen zwei Gitterplätzen oder in einem Gitterplatz schneidet:

$$\hat{S}_a(\varphi_{i+a}^{\mu;c}, \vartheta_i) = (\varphi_{-i+a}^{\mu;c}, \vartheta_i) \quad a \in \{1, 2, \dots, N\} \quad (4.12)$$

$$\hat{S}_b(\varphi_{i+b+\frac{1}{2}}^{\mu;c}, \vartheta_{i+b+\frac{1}{2}}) = (\varphi_{-i+b+\frac{1}{2}}^{\mu;c}, \vartheta_{-i+b+\frac{1}{2}}) \quad b \in \{1, 2, \dots, N\} \quad (4.13)$$

4.2.2 Kollineare Streifen-Superzellen (KSZ)

Kollineare Streifen-Superzellen (KSZ) sind durch die Beschränkung des Wertebereichs von ϑ auf 0 und π charakterisiert, die Momente sind also (anti)-parallel ausgerichtet.

Streifen

Unter einem (*antiferromagnetischen*) Streifen der Breite L verstehen wir eine Anordnung von L Gitterplätzen mit jeweils einem zugehörigen inneren Symmetrieoperator \hat{P}_O bzw. \hat{S}_O , wobei Spins an benachbarten Gitterplätzen jeweils antiparallel ausgerichtet sein sollen. Streifen lassen sich nach ihrer Breite L sowie ihrem zugehörigen Symmetrieoperator charakterisieren. Es ergeben sich 4 Klassen von Streifen, von denen sich 2 mit der geforderten antiferromagnetischen Ordnung vereinbaren lassen.

- *Platzzentriert-Spiegelsymmetrisch*. Es gibt eine Spiegelachse auf dem mittleren Gitterplatz der Kette:

$$\hat{S}_0 = \hat{S}_{L+1/2}, \quad (4.14)$$

bei einer ungerader Anzahl von Gitterplätze L pro Streifen. Dabei ist zu beachten, daß sich die Gesamtmagnetisierung des Streifens von Null unterscheiden kann. Die Anzahl der inäquivalenten Gitterplätze pro Streifen beträgt in diesem Falle gerade $\frac{L+1}{2}$.

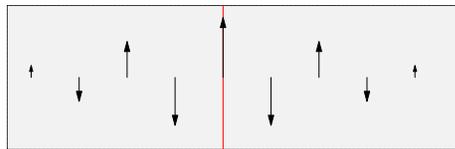


Abbildung 4.1: Platzzentriert-Spiegelsymmetrischer Streifen

- *Mittenzentriert-Inversionssymmetrisch*. Es gibt einen Inversionspunkt in der Mitte des Streifens:

$$\hat{P}_0 = \hat{P}_{L+1/2} \quad (4.15)$$

woraus sich eine gerade Anzahl L von Gitterplätzen pro Streifen und eine verschwindenden Gesamtmagnetisierung des Streifens ergibt. Die Anzahl der inäquivalenten Gitterplätze beträgt gerade $\frac{L}{2}$

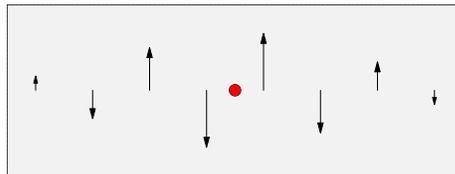


Abbildung 4.2: Mittenzentriert-Inversionssymmetrischer Streifen

- *Mittenzentriert-Spiegelsymmetrisch*. Die Spiegelachse befindet sich zwischen den beiden mittleren Plätzen des Streifens, woraus unmittelbar eine parallele Ausrichtung der beiden mittleren Plätze folgt. Somit ist diese Symmetrie nicht verträglich mit einer antiferromagnetischen Grundordnung.

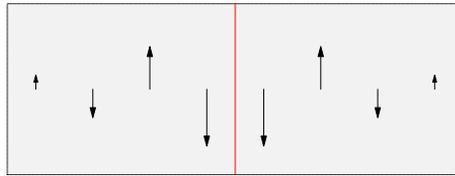


Abbildung 4.3: Mittenzentriert-Spiegelsymmetrischer Streifen

- *Platzzentriert-Inversionssymmetrisch*. Das Inversionszentrum befindet sich gerade auf dem mittleren Gitterplatz des Streifens, weshalb hier das magnetische Moment zwingend verschwindet. Somit ist auch diese Superzelle nicht mit der geforderten antiferromagnetischen Grundordnung vereinbar.

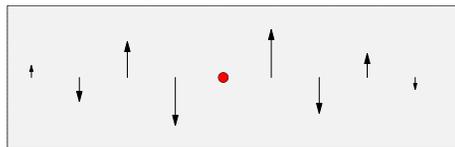


Abbildung 4.4: Platzzentriert-Inversionssymmetrischer Streifen

Superzellen

Die Superzellen setzen sich zusammen aus antiferromagnetischen Streifen sowie ggf. zusätzlich aus paramagnetischen Spiegelatomen. Neben den inneren Symmetrien der Streifen betrachten wir drei verschiedene Kopplungstypen.

- *Ferromagnetische Kopplung*. Dabei befindet sich zwischen zwei Streifen jeweils ein mittenzentriertes Inversionszentrum:



Abbildung 4.5: Ferromagnetische Kopplung

- *Antiferromagnetische Kopplung*. Zwischen den gekoppelten Ketten befindet sich ein mittenzentriertes Inversionszentrum.

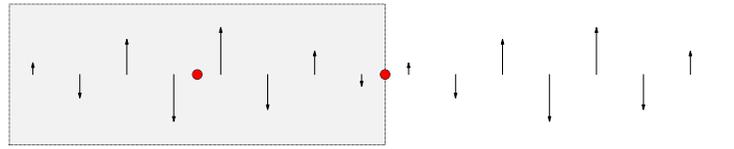


Abbildung 4.6: Antiferromagnetische Kopplung

- Paramagnetische Kopplung. Zwischen den einzelnen Streifen wird ein weiteres Atom eingeführt, auf welchem sich ein platzzentriertes Inversionszentrum befindet



Abbildung 4.7: Paramagnetische Kopplung

Dabei setzen wir die Superzellen zunächst nur aus gleichartigen Streifen zusammen. Neben diesen *einfach zusammengesetzten* Superzellen betrachten wir Superzellen aus zwei unterschiedlichen Streifentypen. Die Zusammensetzung dieser Superzellen geschieht nach dem Muster *ABAB* mit den gleichen Kopplungstypen wie oben. Allerdings stellen die Kopplungen nun keine Symmetriezentren mehr dar, sondern geben lediglich Auskunft über die entsprechenden Spinrichtungen.

4.2.3 Spiralen-Streifen-Superzellen (SSZ)

Im Gegensatz zu den KSZ sind die Werte des Ordnungsparameters ϑ_i in den nun betrachteten Spiralen-Streifen-Superzellen (SSZ) nicht auf 0 und π beschränkt, sondern können - unter Respektierung näher zu erörternder Symmetriebedingungen- variieren. Auch SSZ sind aus gleichartigen Streifen zusammengesetzt. Wir berücksichtigen dabei in diesem Abschnitt ausschließlich SSZ mit durchgängigem Drehsinn. Andersartige Strukturen wurden zwar untersucht, lieferten aber in keinem Fall den Grundzustand und werden daher nicht in die Darstellung aufgenommen.

Streifen

Innerhalb der SSZ erfüllen die Ordnungsparameter $\varphi^{\mu:c}$ zum kollinearen Fall analoge Symmetriebedingungen. Ein Spiral-Streifen der Breite n ist charakterisiert durch die Gleichung:

$$\varphi_i^{\mu:c} = \varphi_{n-i}^{\mu:c} \quad i \in 1, \dots, n \quad (4.16)$$

Neben der Breite sind spiralsiche Streifen charakterisiert durch den mittleren Drehwinkel $\bar{\vartheta}$:

$$\bar{\vartheta} = \frac{1}{N} \sum_i \vartheta_i - \vartheta_{i-1} \quad (4.17)$$

Für die Ausrichtungswinkel geben wir o.B.d.A. für $i = 1$ den Wert $\varphi_1^{\vartheta} = 0$ vor. Der Ausrichtungswinkel setzt sich dann zusammen aus einem mittleren Winkel $\bar{\vartheta}$ und einer Abweichung $\Delta\vartheta_i$:

$$\vartheta_i = (i-1)\bar{\vartheta} + \Delta\vartheta_i \quad (4.18)$$

Dabei genügt $\Delta\vartheta_i$ der Symmetriebedingung:

$$\Delta\vartheta_i = -\Delta\vartheta_{n-i} \quad (4.19)$$

Superzellen

Die Superzellen werden nun aus L einzelnen Streifen zusammengesetzt. Dabei gelten für Ladung und Moment Translationssymmetrie bezüglich der Streifenbreite n :

$$\varphi_{i+n}^{\mu:c} = \varphi_i^{\mu:c} \quad (4.20)$$

während die Ausrichtung durch eine Drehung

$$\vartheta_{i+n} = \vartheta_i + \frac{2\pi}{L} \quad (4.21)$$

gegeben ist.

4.3 Durchführung der Minimierung

4.3.1 Simultane vs. Separierte Minimierung

Zu einer vorgegebenen Superzelle mit entsprechenden Symmetriebedingungen wird nun der zugehörige Gutzwiller-Grundzustand über die Variation der äußeren und inneren Variationsparameter (VP) bestimmt. Im Ein-Band-Gutzwiller-Formalismus existiert für jeden Gitterplatz i mit der entsprechenden Doppelbesetzung m_i genau ein *inneren* VP. Im hier entwickelten Verfahren treten drei *äußere* VP hinzu: Zwei Komponenten (in Polarkoordinaten Winkel und Betrag) des Austauschfeldes B_i und die Orbitalverschiebung A_i . Es ergeben sich unmittelbar zwei unterschiedliche Ansätze für die Durchführung der Variation:

In der *simultanen Minimierung* werden innere und äußere Parameter VP gleichrangig behandelt. Dieser Ansatz liegt den Arbeiten von G. Seibold et.al zugrunde [SCDCG98]. Die Doppelbesetzungen wurden dabei gemäß des Slave-Boson-Verfahrens nach Kotliar-Rückenstein [KR86] behandelt. Die simultane Minimierung stellt deutlich geringere

Anforderungen hinsichtlich der Rechnerleistung als der hier verfolgte Ansatz, allerdings besteht ein wesentlicher Nachteil darin, daß es sich um ein "Black-Box" Verfahren handelt, welches keine Rückschlüsse auf die Rolle der einzelnen Variationsparameter liefert.

In der *separierten Minimierung* dagegen werden die Variationen der inneren und äußeren Parameter als getrennte, hierarchisch strukturierte Probleme behandelt. Dabei wird zu einem gegebenen Satz physikalischer Parameter (Dotierung, Wechselwirkung, Hoppings) und vorgegebener Superzelle jeweils ein Ansatz äußerer Variationsparameter gewählt, für den mittels des Selbstkonsistenzverfahrens die Doppelbesetzungen optimiert werden. Die separierte Minimierung bedeutet einen erheblichen numerischen Mehraufwand, bietet unserer Ansicht nach allerdings auch entscheidende Vorteile: zum einen erlaubt die Kenntnis der äußeren Parameter Aussagen über die ursächlichen Zusammenhänge zwischen Magnetisierung und Ladungsfluktuation. Ferner lassen sich die Ergebnisse deutlich besser nachvollziehen, wodurch es leichter fällt, eventuelle lokale Minima zu erkennen.

4.3.2 Innere Minimierung

Im Prozeß der *inneren Minimierung* wird zu einem gegebenen Satz äußerer Parameter und einer vorgegebenen Superzelle der jeweilige Gutzwiller-Grundzustand gemäß dem Iterationsverfahren aus Kapitel 3 bestimmt. Jede Iteration teilt sich in zwei Blöcke auf: Zunächst wird im Bandstruktur-Teil des Programms die Einteilchen-Wellenfunktion durch Diagonalisierung der effektiven Hamiltonians berechnet. Hieraus lässt sich die Hartree-Fock-Energie bestimmen, wobei die Doppelbesetzungen sich jeweils aus dem Produkt der Einfachbesetzungen ergeben.

In zweiten Teil werden dann die Doppelbesetzungen hinsichtlich der Energie minimiert, indem wir mittels eines stochastischen Verfahrens ausgehend von den Hartree-Fock-Werten variieren. Dabei wurde eine innere Symmetrie in das Programm implementiert, die die Doppelbesetzungen an äquivalenten Atomen gleichgesetzt. Für die Durchführung der inneren Minimierung konnten wir auf stochastische Verfahren zurück greifen, die sich in den letzten Jahren in der Arbeitsgruppe bei der Behandlung der Multiband-Gutzwiller-Probleme bewährt hatten, vgl. z.B. [T.O06]

4.3.3 Äußere Minimierung

Die Optimierung der äußeren Variationsparameter stellte sich als die deutlich komplexere Aufgabe heraus. Hauptproblem war die Struktur der Energielandschaft, die offensichtlich eine große Anzahl lokaler Minima enthält. Ferner sind die einzelnen Parameter untereinander stark korreliert, was einfache stochastische Verfahren wie im Falle der inneren Minimierung unbrauchbar werden läßt. Erste Versuche, alle Parameter frei, d.h. ohne Vorgabe von Symmetrien und funktionalen Zusammenhängen zu bestimmen, lieferten keine befriedigenden Ergebnisse. Wir sind daher dazu übergegangen, aus dem Raum der äußeren Parameter bestimmte Strukturen heraus zugreifen und deren Energien zu einem bestimmten Datensatz zu minimieren. Grundsätzlich sind

daher alle unsere Ergebnisse unter dieser Einschränkung auf diesen Unterraum zu verstehen. Für bestimmte Datensätze ergibt sich daraus eine echte Einschränkung. Die relevanten Superzellen werden wir in den jeweiligen Abschnitten konkret angeben. Falls nicht anders angegeben, haben wir für die äußere Minimierung das bekannte *Downhill-Simplex-Verfahren*[PTVF07] angewandt. Dabei haben wir jeweils einen sinnvoll erscheinenden Datensatz als Startwert vorgegeben. Für einige Spezialfälle erwies sich jedoch auch dieses Verfahren als ungeeignet, worauf wir an den entsprechenden Stellen eingehen werden.

4.3.4 Verfahren für kollineare Streifen-Superzellen

Da für KSZ keine Abweichungen zwischen den Winkeln θ_i der Austauschfelder und φ_i der Momente beobachtet wurden, waren lediglich die Beträge B_i der Austauschfelder \vec{B} und die Orbitalverschiebungen A_i bei konstantem Winkel $\theta_i = 0$ bzw. $\theta_i = \pi$ zu minimieren.

4.3.5 Variationsverfahren für SSZ

Im Falle spiralförmiger Streifen-Superzellen treten die θ_i als Variationsparameter hinzu. Wiederum stellt sich die Alternative, sämtliche äußeren VP simultan oder die Winkel θ_i separiert von B_i und A_i zu variieren. Im Rahmen dieser Arbeit wurden beide Techniken angewandt. Die simultane Minimierung aller äußeren VP führte wiederum zu lokalen Minima und lieferte keine verwertbaren Ergebnisse, so daß wir auch zu einer separaten Variation übergegangen sind. Dabei haben wir für eine gegebene SSZ zunächst die VP A_i und B_i bei festgehaltenem θ_i minimiert. Die gefundenen Minima von A_i und B_i werden als Konstanten einem zweiten Variationszyklus übergeben, in dem die Abweichungen $\Delta\theta_i$ von der vorgegebenen SSZ minimiert werden. Abschließend werden die B_i und die A_i einmal nachrelaxiert. Weitere Variationszyklen nach dem gleichen Muster ergaben keine signifikante Absenkung der Energie mehr.

Kapitel 5

Ergebnisse

5.1 Systeme ohne Übernächste-Nachbar-Hoppings

Zunächst werden die Ergebnisse für Systeme mit ausschließlich Nächstem-Nachbar-Hopping $t = 1\text{eV}$ diskutiert. Der untersuchte Wertebereich für die Dotierung d erstreckt sich dabei von $d = \frac{1}{4}$ bis zu einem Wert von $d = \frac{1}{25}$ bei Annäherung an die halbe Bandfüllung. Die standardisierten Werte für U betragen 8eV , 10eV und 15eV . Für die Grenzfälle schwacher bzw. starker Wechselwirkung wurden auch Werte von $1\text{eV} < U < 30\text{eV}$ hinzugezogen.

Sämtliche Rechnungen für $t' = 0$ lieferten entweder paramagnetische oder kollineare Grundzustände. Wir beschränken uns daher in der Präsentation der Ergebnisse auf den Vergleich kollinearere Streifen-Superzellen unterschiedlicher Streifenbreite und Kopplungen. Für Dotierungen des Typs $d = \frac{1}{n}$ konzentrieren wir uns auf Superzellen, die aus einem bzw. aus zwei Streifen identischer Breite zusammengesetzt sind. Später werden dann für Übergangsstrukturen Superzellen aus Streifen unterschiedlicher Breite hinzugezogen.

Zunächst werden für zwei exemplarischen Werte ($d = 1/8$ und $d = 1/10$) die Grundzustandsordnungen näher untersucht. In diesem Zusammenhang sollen auch die Wirkungsweise der äußeren Parameter, die verschiedenen Kopplungstypen und das Verhalten für große Wechselwirkungen quantitativ verglichen werden. Später werden dann weitere Dotierungen und Wechselwirkungen hinzugezogen.

5.1.1 Grundzustände für $d = 1/8$ und $d = 1/10$

Streifenbreite

Für die Streifenbreiten n in Abhängigkeit von der Dotierung d finden wir gefüllte Streifen, also den Zusammenhang

$$d = \frac{1}{n}, \quad (5.1)$$

Neben der Breite der Streifen innerhalb der Streifen-Superzellen wurden auch die Kopplungstypen ferro-, antiferro- und paramagnetisch miteinander verglichen. Dabei

ergaben SSZ mit antiferromagnetischer Kopplung oder einem paramagnetischen Randatom deutlich höhere Grundzustandsenergien, so daß wir festhalten können:

Innerhalb der Superzellen sind die Streifen jeweils *ferromagnetisch* gekoppelt.

Die Tabellen 5.1 und 5.2 zeigen die Gutzwiller-Grundzustandsenergien für die Dotierungen $d = 1/8$ bzw. $d = 1/10$ bei einer Wechselwirkung $U = 10eV$ für unterschiedliche Superzellen. Der Grundzustand wird jeweils von Superzellen aus zwei ferromagnetisch gekoppelten Streifen der Breiten $n = 8$ bzw. $n = 10$ eingenommen. Dabei bilden sich in der Mitte der Streifen jeweils Néel-artige Blöcke mit fast vollständig polarisierter Spinstruktur heraus, während die magnetischen Momente im Bereich der Kopplung auf etwa $0.12\mu_B$ abschmelzen. Ebenso prägt sich eine Ladungswelle heraus, wobei die Gitterplätze in der Streifenmitte fast halb gefüllt sind, während sich im Randbereich eine ladungsträgerverarmte Zone herausbildet.

Neben den tatsächlichen Grundzustandsenergien sind die variationellen Energien für antiferromagnetisch gekoppelte Superzellen mit benachbarten Streifenbreiten sowie mit einem zusätzlichen paramagnetischen Kopplungsatom aufgetragen. Letztere zeigen dabei ein ähnliches Minimalverhalten. Superzellen mit ferromagnetische Kopplungen sind dagegen nur für hinreichend schmale Streifen stabil, während für breitere Streifen im Verlauf der Minimierung ein Spin-Paar umklappt, so daß neue, heterogene Superzellen mit antiferromagnetischer Kopplung entstehen. Diese wurden in der Präsentation nicht mehr berücksichtigt.

Die Amplituden der lokalen variationellen Austauschfelder B_i verlaufen ähnlich zu den Beträgen der einzelnen magnetischen Momente \vec{M}_i , wobei die B_i im Kopplungsbereich fast verschwinden. Ein abweichendes Verhalten zeigen dagegen die Orbitalverschiebungen A_i . Setzt man die Orbitalverschiebung der Streifenmitte auf 0, so bilden sich im Kopplungsbereich die relativ stärksten Felder heraus. Die Orbitalverschiebung wirkt also der Ladungstrennung durch die Austauschfelder als Korrektiv entgegen. Dieser Sachverhalt soll unten näher erörtert werden.

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
10	1/8	6	↓↓	-12.40	0.06	-0.06	0.88	0.13	-1.90	3.31
10	1/8	7	↓↓	-20.47	0.11	-0.08	0.93	0.12	-1.94	4.02
10	1/8	8	↓↓	-27.27	0.09	-0.08	0.91	0.12	-2.18	3.51
10	1/8	9	↓↓	-22.79	0.11	-0.07	0.94	0.12	-2.73	4.47
10	1/8	8	↓↓	-17.13	0.11	-0.07	0.93	0.10	-1.47	3.82
10	1/8	11	↓↓	-15.94	0.11	-0.08	0.93	0.00	-1.71	3.76
10	1/8	12	↓↓	-10.90	0.10	-0.17	0.91	0.26	-1.99	2.73
10	1/8	6	↓○↑	-19.59	0.08	-0.07	0.89	0.00	-2.08	3.08
10	1/8	7	↓○↑	-20.97	0.13	-0.11	0.96	0.00	-0.09	6.45
10	1/8	8	↓○↑	-19.88	0.09	-0.07	0.88	0.00	-1.30	2.67
10	1/8	9	↓○↑	-17.23	0.11	-0.10	0.93	0.05	-1.75	3.88
10	1/8	8	↓○↑	-13.01	0.11	-0.10	0.93	0.00	-1.13	3.56
10	1/8	11	↓○↑	-12.33	0.13	-0.15	0.95	0.00	-0.05	5.16
10	1/8	10	↑↑	-10.68	0.10	-0.06	0.93	0.07	-1.85	3.90
10	1/8	12	↑↑	-11.78	0.12	-0.08	0.95	0.02	-1.34	4.24

Tabelle 5.1: Vergleich der KSZ für $d= 1/8$, $U= 10eV$

Zur Legende der Tabellen 5.1 bis 5.12

U	Wechselwirkung in [eV]
d	Dotierung
K	Kopplungstyp ($\uparrow\uparrow$ ferrrom.; $\uparrow\downarrow$ antiferrrom.; $\uparrow \circ \downarrow$ param.)
n	Streifenbreite
$E/Site$	Energieabsenkung im Vergleich zum Paramagneten in [meV]
C_{min}/C_{max}	minimale bzw.maximale Ladung pro Platz
M_{min}/M_{max}	minimales bzw.maximales Moment pro Platz in [μ_B]
A_{max}	maximales Austauschfeld in [eV]
B_{max}	maximale Orbitalverschiebung [eV]

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
10	1/10	6	↓↓	-18.38	0.05	-0.04	0.90	0.39	-2.06	3.61
10	1/10	7	↓↓	-30.69	0.07	-0.07	0.94	0.10	-2.91	4.46
10	1/10	8	↓↓	-36.41	0.09	-0.09	0.94	0.12	-2.15	4.30
10	1/10	9	↓↓	-40.56	0.09	-0.09	0.95	0.18	-2.51	5.04
10	1/10	10	↓↓	-44.79	0.09	-0.10	0.95	0.13	-3.09	4.38
10	1/10	11	↓↓	-39.66	0.10	-0.11	0.96	0.10	-2.33	5.83
10	1/10	12	↓↓	-36.41	0.10	-0.10	0.95	0.08	-1.70	4.70
10	1/10	6	↓○↑	-28.51	0.07	-0.07	0.92	0.00	-2.37	3.99
10	1/10	7	↓○↑	-15.10	0.09	-0.06	0.94	0.00	-2.24	3.77
10	1/10	8	↓○↑	-40.09	0.09	-0.11	0.95	0.03	-2.49	4.51
10	1/10	9	↓○↑	-38.85	0.10	-0.12	0.95	0.00	-2.37	4.76
10	1/10	10	↓○↑	-39.69	0.09	-0.10	0.94	0.00	-1.99	4.11
10	1/10	11	↓○↑	-33.50	0.10	-0.12	0.95	0.00	-1.42	4.67
10	1/10	12	↓○↑	-32.66	0.10	-0.10	0.96	0.00	-0.88	5.04
10	1/10	8	↓↑	-23.46	0.08	-0.06	0.93	0.26	-1.82	3.59
10	1/10	10	↓↑	-28.13	0.09	-0.08	0.94	0.15	-2.55	4.00
10	1/10	12	↓↑	-29.19	0.10	-0.08	0.96	0.01	-2.15	5.31

Tabelle 5.2: Vergleich der KSZ $d=1/8$, $U=10\text{eV}$

Die Abbildungen 5.1 und 5.2 zeigen Ladung, magnetisches Moment und äußere Variationsparameter für $U = 10\text{eV}$ und $d=1/8$ bzw. $d=1/10$. Zur Legende der Abbildungen 5.1, 5.2, 5.5 und 5.6:

- ΔC Abweichung von der mittleren Ladung
- $|M_i|$ Betrag des magnetischen Moments
- \vec{M}_i Vektoriellles Moment
- B/U Betrag des Austauschfeldes in Relation zur WW
- A/U Betrag der Orbitalverschiebung in Relation zur WW

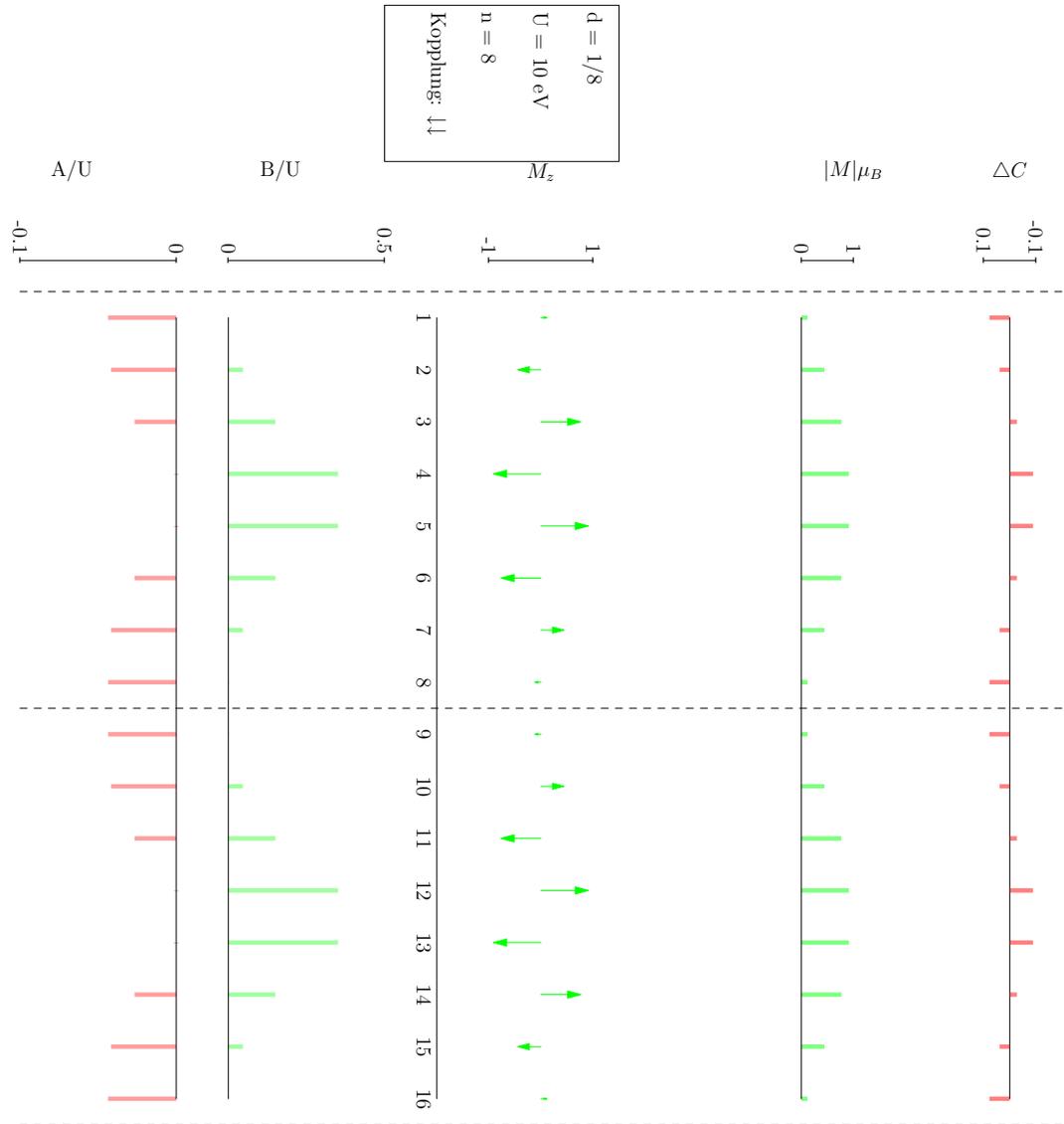


Abbildung 5.1: $U=10\text{eV}$, $d=1/8$

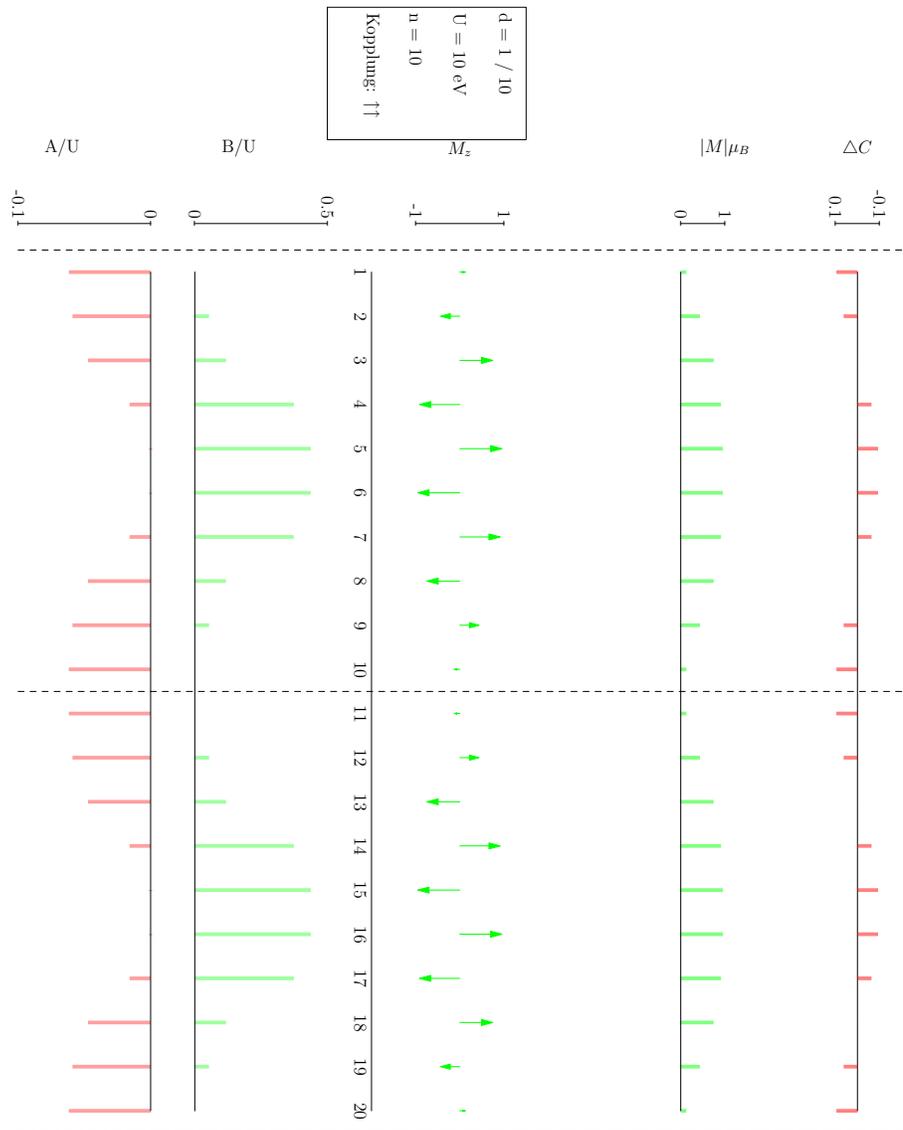


Abbildung 5.2: $U=10\text{eV}$, $d=1/10$

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
10	1/10	10	↓↓	-44.79	0.09	-0.10	0.95	0.13	-3.09	4.38
10	1/10	10	↓↑	-20.46	0.10	-0.10	0.95	0.12	-0.91	4.18

Tabelle 5.3: Vergleich der Kopplungen ferromagnetisch und antiferromagnetisch

Kopplungstypen

Wir vergleichen die jeweiligen Grundzustandsenergien der beiden Kopplungstypen *antiferromagnetisch* und *ferromagnetisch* bei ansonsten gleicher Verteilung von Ladung und Moment sowie festen Werten $U = 10$ und $d = 1/10$ (vgl. Tabelle 5.3). Zu diesem Zweck wurde das Programm um eine Penalty-Funktion erweitert, bei der bezüglich der Abweichung von einer vorgegebenen Superzelle mit einer vorgegebenen Verteilung von Ladung und Moment anstelle der Energie minimiert wird. Zwar konnte in diesem Verfahren die vorgegebenen Momente nur bis zu einer gewissen Genauigkeit reproduziert werden, die Energieabsenkung konnte allerdings recht gut abgeschätzt werden und liefert einen Wert von etwa 24meV pro Atom.

Hinweise auf effektive ferromagnetische Kopplungen finden sich auch in Arbeiten von G.Uhrig[USG04] [USG05], worin Streifenstrukturen in Kuprat-Supraleitern anhand von Spinleitern untersucht wurden.

Bandstruktur-Effekte

Die Forderung nach periodischen Randbedingungen mit Periodizität N im Ortsraum geht einher mit der Ausprägung eines reziproken Gitters im eindimensionalen k -Raum, dessen Brillouin-Zone durch das Intervall $[0, \frac{2\pi}{N}]$ gegeben ist.

Entspricht die Periodizität einem ganzzahligen Vielfachen des Kehrwertes der Dotierung, gilt also N/d ganzzahlig, so ergibt sich gerade eine Bandlücke im Bereich der Fermi-Kante, weshalb man auch von isolierenden Streifen spricht.

Für metallische Streifen traten numerische Probleme auf, da sich rechnerbedingte Schwankungen bei der Bestimmung der Energieeigenwerte in der Besetzung der Zustände in der Nähe der Fermi-Energie auswirkten und zu Verletzungen der inneren Symmetrie führten. Dieses Problem konnte durch Einführung einer effektiven Temperatur beim Fermi-Besetzungsfaktor behoben werden. Dabei wurden die Zustände in einem hinreichend kleinen Intervall um die Fermi-Kante abweichend von Null oder Eins besetzt. Diese Vorgehensweise führte zwar zu einem Anstieg der variationellen Energie, der allerdings deutlich unterhalb der Rechengenauigkeit durch äußere Felder und Superzellen blieb.

Wirkungsweise der äußeren Parameter

Ursprünglich enthielt das Variationsverfahren lediglich die Austauschfelder als äußere VP. Mit dieser Methode konnten wir zwar inhomogene Grundzustände nachweisen; Um die Wirkung der beiden äußeren Variationsparameter Austauschfeld und Orbitalverschiebung näher zu untersuchen, wurden zwei ergänzende Vergleichsrechnungen

angestellt (vgl. Tabelle 5.4 und Abb.5.3). Zum einen wurde – ausgehend vom Grundzustand für $U = 10eV$ und $d = 1/10$ – das zugehörige Austauschfeld beibehalten, während die Orbitalverschiebungen abgeschaltet wurden. In einer zweiten Rechnung wurde von vornherein auf Orbitalverschiebungen verzichtet und die Austauschfelder variiert.

Beide Rechnungen zeigen neben einer erhöhten variationellen Energie- eine nur geringfügig modifizierte Abweichung der magnetischen Momente, allerdings eine deutlich stärker ausgeprägte Ladungsinhomogenität. Wir können aus diesen Ergebnissen Rückschlüsse hinsichtlich der Rolle beider Variationsparameter ziehen: So bilden die inhomogenen Zustände bereits durch Vorgabe geeigneter Austauschfelder \vec{B} aus.

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
10	1/10	10	↓↓	-44.79	0.09	-0.10	0.95	0.13	-3.09	4.38
10	1/10	10	↓↓	-28.60	0.10	-0.16	0.95	0.14	0.00	4.38
10	1/10	10	↓↓	-30.4	0.10	-0.12	0.95	0.08	0.00	4.44

Tabelle 5.4: Vergleichsrechnungen $A=0$ für $d= 1/10$ und $U = 10eV$

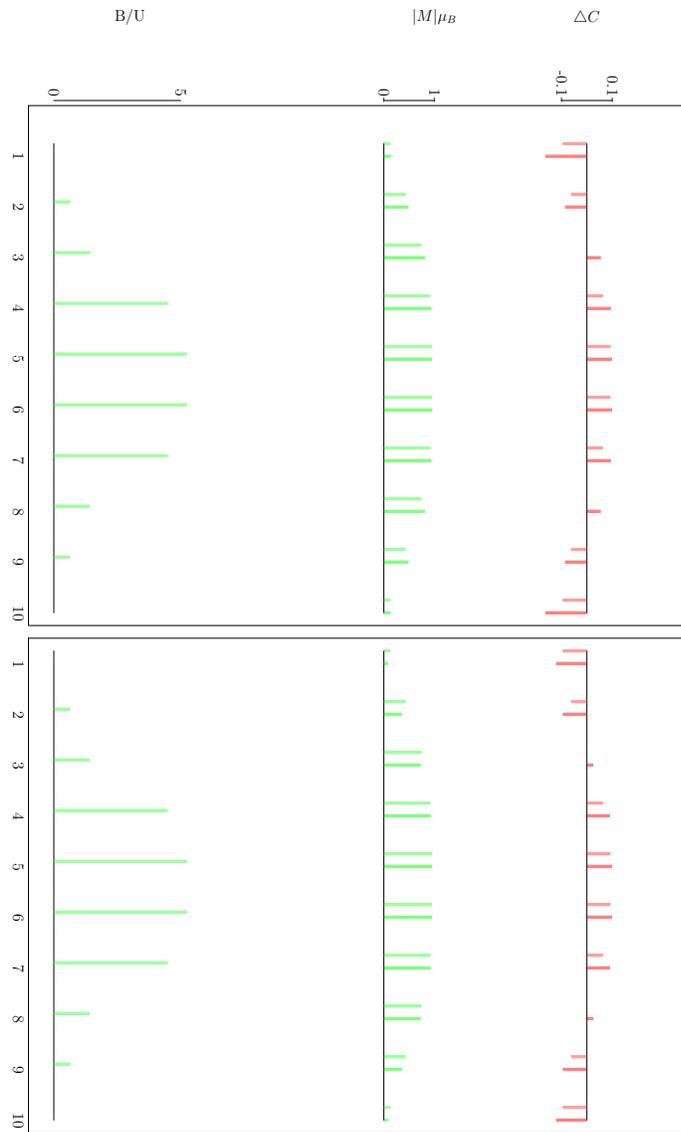


Abbildung 5.3: Vergleichsrechnungen mit $A=0$ für $d=1/10$ und $U=10eV$

Grenzfall großer Wechselwirkungen

Für große Werte des Wechselwirkungsparameters U erwarten wir einen antiferromagnetischen Grundzustand. Allerdings sinkt die Energieabsenkung im Vergleich zur paramagnetischen Lösung, bei zu großen U und d kann das Verfahren daher die entsprechenden Grundzustände nicht mehr bestimmen. Die Inhomogenitäten dagegen sind im Bereich großer U weitgehend konstant.

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
20	1/8	8	↓↓	-14.50	0.07	-0.05	0.93	0.11	-5.37	7.02
25	1/8	8	↓↓	-12.85	0.07	-0.05	0.94	0.07	-7.98	9.81
30	1/8	8	↓↓	-11.39	0.07	-0.05	0.94	0.04	-10.36	12.26

Tabelle 5.5: Grenzfall großer U für d= 1/8

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
20	1/10	10	↓↓	-14.17	0.10	-0.11	0.98	0.06	-3.45	6.00
25	1/10	10	↓↓	-11.80	0.10	-0.09	0.99	0.10	-2.97	4.00
30	1/10	10	↓↓	-5.80	0.08	-0.06	0.97	0.03	-0.26	0.94

Tabelle 5.6: Grenzfall großer U für d= 1/10

Langreichweitige Coulomb-Wechselwirkung

Um den Einfluß langreichweitigen Coulomb-Abstoßung auf nicht-metallische Streifen zumindest qualitativ abschätzen zu können, haben wir die Energie der LRC als Korrektur zu den Gutzwiller-Rechnungen gemäß der Näherung

$$V_{LRC} = \sum_{j>i} V_{ij} = \sum_{j>i} V_0 \frac{\Delta\rho_i \Delta\rho_j}{|i-j|} \quad (5.2)$$

mit $V_0 = E_{Ry}/4$ approximiert. Zum Vergleich wurden die Energiekorrekturen bei Dotierung $d = 1/12$ für antiferromagnetisch gekoppelte Streifen der Breiten $n = 6$ und $n = 12$ bestimmt. Diese lag für $n = 6$ etwa 28eV tiefer als für $n = 12$. Somit könnten „halb gefüllte“ Streifen energetisch günstiger sein als die gefüllten Streifen des Hubbard-Modells.

5.1.2 Grundzustände in Abhängigkeit von U

Wir demonstrieren die Abhängigkeit der Grundzustände von der Wechselwirkung U anhand der Ausprägung von Ladungswelle und der maximalen Magnetisierung. Die Abbildung 5.4 unten zeigt die maximale Magnetisierung (untere Punkte) sowie die

Differenz zwischen maximaler und minimaler Ladung pro Atom (obere Punkte) Deutlich erkennbar laufen beide Kurven für steigendes U in einen Sättigungsbereich mit konstantem M_{max} und ΔC_{max} . Dagegen laufen beide Kurven für kleine U gegen Null, wobei M_{max} deutlich schneller ansteigt als ΔC_{max} und in diesem Bereich die Magnetisierung deutlicher ausgeprägt ist als die Ladungswelle. Für hinreichend kleine Dotierungen $d < 1/5$ finden wir im Grenzfall kleiner U einen stetigen Übergang zur erwarteten paramagnetischen Lösung für $U = 0$, während sich für kleine Dotierungen eine paramagnetische Phase herausbildet.

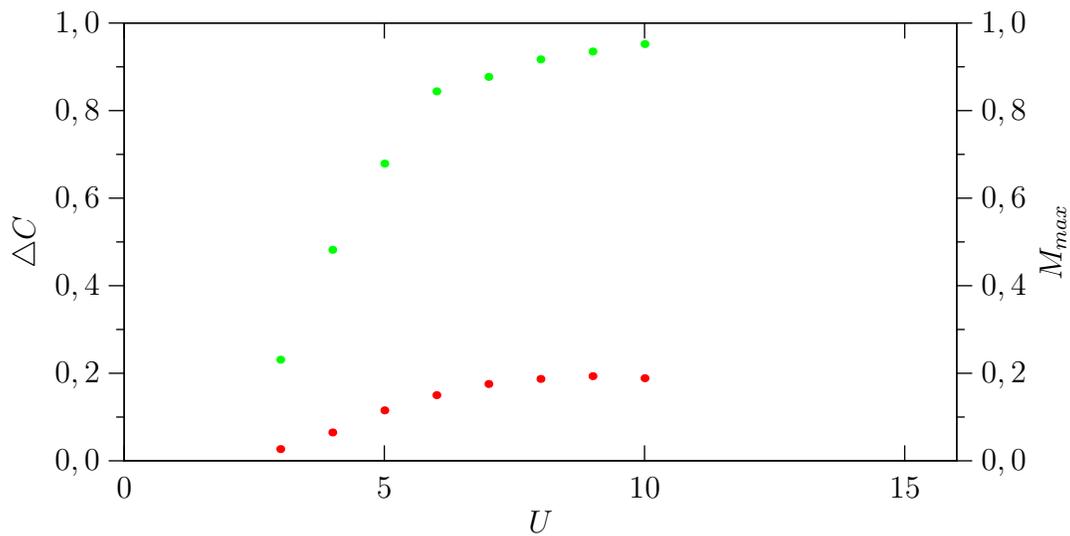


Abbildung 5.4: Magnetisierung und Ladung in Abh. von U für $d=1/10$

5.1.3 Grundzustände in Abhängigkeit von der Dotierung

Wir bestimmen nun die Grundzustandsordnungen für weitere Werte der Dotierung $1/12 \leq d \leq 1/6$. Dabei finden wir jeweils analoge Abhängigkeit der Grundzustandsordnung von der Dotierung wie in Abschnitt 5.1.1. Als charakteristisch für die Lösungen im Übergangsbereich zum Paramagneten bei großen Dotierungen erwies sich das beinahe vollständige Verschwinden der Ladungswellen im Vergleich zur Ausprägung der magnetischen Momente. Dieser Umstand erforderte auch eine Modifikation des Variationsverfahrens. Wir haben daher zu Beginn der jeweiligen äußeren Minimierungen die Orbitalverschiebungen auf Null gesetzt und erst in einem zweiten Schritt nachvariiert.

Legt man den bisher gefundenen Zusammenhang zwischen Kettenlängen und Dotierungen zugrunde, so existiert bei der Dotierung $d = 1/4$ für eine vier-atomige Kette eine natürliche Grenze für die zur Verfügung stehenden Überstrukturen. Tatsächlich

ergaben unsere Rechnungen für diese Dotierung noch eine schwache magnetische Ausrichtung, die allerdings für die Dotierungen 0.24 und 0.23 bereits wieder verschwindet.

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
4	1/4	4	↓↓	-0.08	0.00	-0.00	0.12	0.05	-0.01	0.12
5	1/4	4	↓↓	-0.39	0.00	-0.00	0.16	0.07	-0.02	0.15
6	1/4	4	↓↓	-0.52	0.01	-0.01	0.19	0.07	-0.02	0.18
7	1/4	4	↓↓	-0.36	0.00	-0.00	0.15	0.07	-0.02	0.13
8	1/4	4	↓↓	-0.15	0.00	-0.00	0.13	0.05	-0.01	0.10
9	1/4	4	↓↓	-0.00	0.00	-0.00	0.13	0.05	-0.01	0.10

Tabelle 5.7: Grundzustände in Abhängigkeit von U für d= 1/4

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
4	1/5	5	↓↓	-0.82	0.00	-0.00	0.19	0.06	-0.04	0.21
5	1/5	5	↓↓	-1.96	0.02	-0.01	0.30	0.09	-0.05	0.37
6	1/5	5	↓↓	-2.85	0.02	-0.02	0.37	0.10	-0.10	0.47
7	1/5	5	↓↓	-3.03	0.02	-0.02	0.41	0.11	-0.15	0.54
8	1/5	5	↓↓	-2.48	0.02	-0.01	0.38	0.11	-0.11	0.41
9	1/5	5	↓↓	-1.68	0.01	-0.01	0.37	0.09	-0.12	0.37
10	1/5	5	↓↓	-1.05	0.01	-0.01	0.30	0.09	-0.05	0.26

Tabelle 5.8: Grundzustände in Abhängigkeit von U für d= 1/5

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
8	1/6	6	↓↓	-7.27	0.06	-0.05	0.77	0.15	-0.88	1.88
10	1/6	6	↓↓	-6.38	0.07	-0.06	0.83	0.14	-1.41	2.47
15	1/6	6	↓↓	-1.92	0.07	-0.06	0.89	0.12	-3.63	5.00
18	1/6	6	↓↓	-0.69	0.07	-0.06	0.90	0.12	-5.46	7.00

Tabelle 5.9: Grundzustände in Abhängigkeit von U für d= 1/6

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
8	1/7	7	↓↓	-17.79	0.08	-0.06	0.85	0.14	-1.40	2.47
10	1/7	7	↓↑	-17.35	0.09	-0.07	0.90	0.13	-2.01	3.33
15	1/7	7	↓↓	-5.70	0.07	-0.05	0.88	0.10	-1.46	3.17

Tabelle 5.10: Grundzustände in Abhängigkeit von U für d= 1/7

5.1.4 Übergang zur halben Bandfüllung

Bei der Untersuchung kleiner Dotierungen $d < 1/12$ nahe der halben Bandfüllung stellt sich natürlicherweise das Problem steigenden Speicherbedarfs bei den Rechnungen, da die Streifenbreiten der Grundzustände immer weiter anwachsen. Wir haben daher unsere Untersuchungen auf Systeme mit ungeradzahligem Anzahl von Atomen in der Elementarzelle beschränkt.

Im Grenzfall der Dotierung Null ist der Grundzustand bekanntermaßen gegeben durch eine antiferromagnetische Ordnung aus äquivalenten Besetzungen (Néel-Zustand). Dieser Block verbreitert sich nun bei Annäherung an die halbe Bandfüllung zusehends, während der paramagnetische Übergangsbereich im wesentlichen unverändert bleibt.

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
8	1/12	12	↓↓	-58.03	0.09	-0.12	0.92	0.13	-1.18	3.36
10	1/12	12	↓↓	-59.40	0.08	-0.13	0.96	0.13	-2.38	4.45
15	1/12	12	↓↓	-36.1	0.08	-0.13	0.98	0.14	-2.41	7.00
20	1/12	12	↓↓	-21.93	0.08	-0.12	0.99	0.09	-2.58	3.00
25	1/12	12	↓↓	-10.30	0.08	-0.13	1.00	0.05	-2.52	4.00
30	1/12	12	↓↓	-8.75	0.08	-0.09	1.00	0.00	-2.49	3.00

Tabelle 5.11: Vergleich der KSZ für $U=10\text{eV}$ und $d=1/12$

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
10	1/25	23	↓↓	-114.32	0.04	-0.17	0.96	0.13	-2.67	4.40
10	1/25	25	↓↓	-114.99	0.04	-0.18	0.95	0.13	-2.65	4.34
10	1/25	27	↓↓	-114.42	0.04	-0.16	0.96	0.11	-2.27	4.38

Tabelle 5.12: Vergleich der KSZ für $U=10\text{eV}$ und $d=1/25$

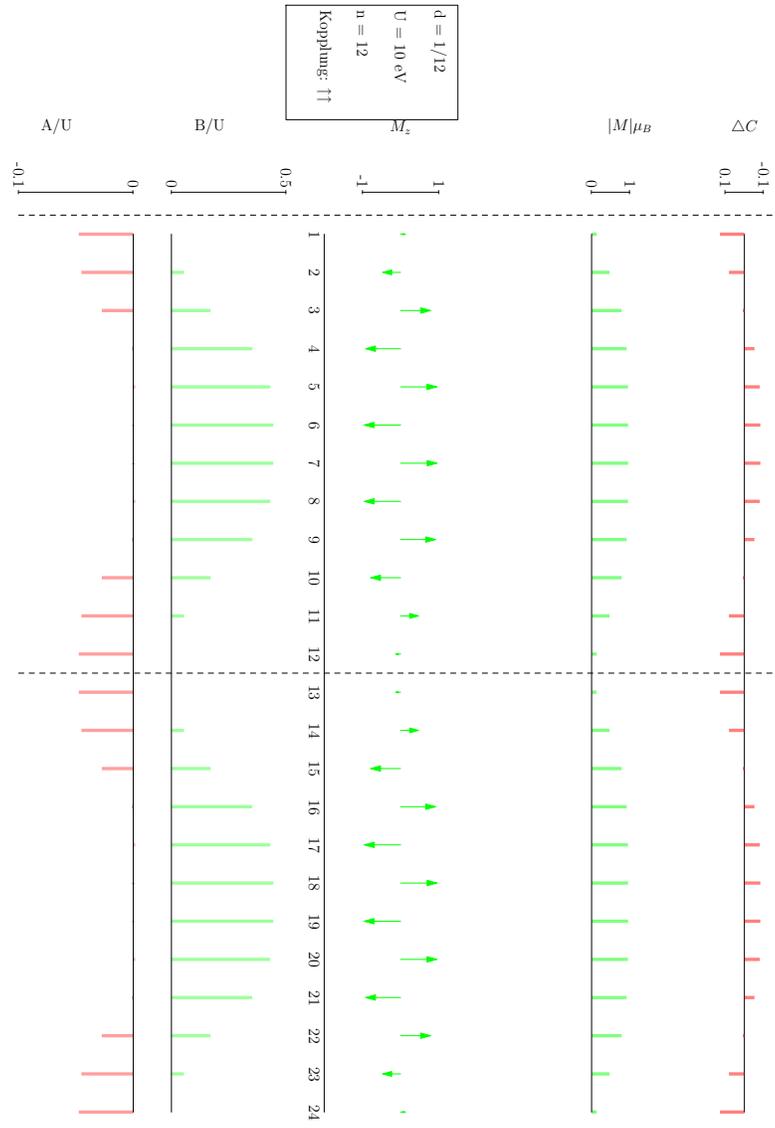


Abbildung 5.5: $U=10\text{eV}$, $d=1/12$

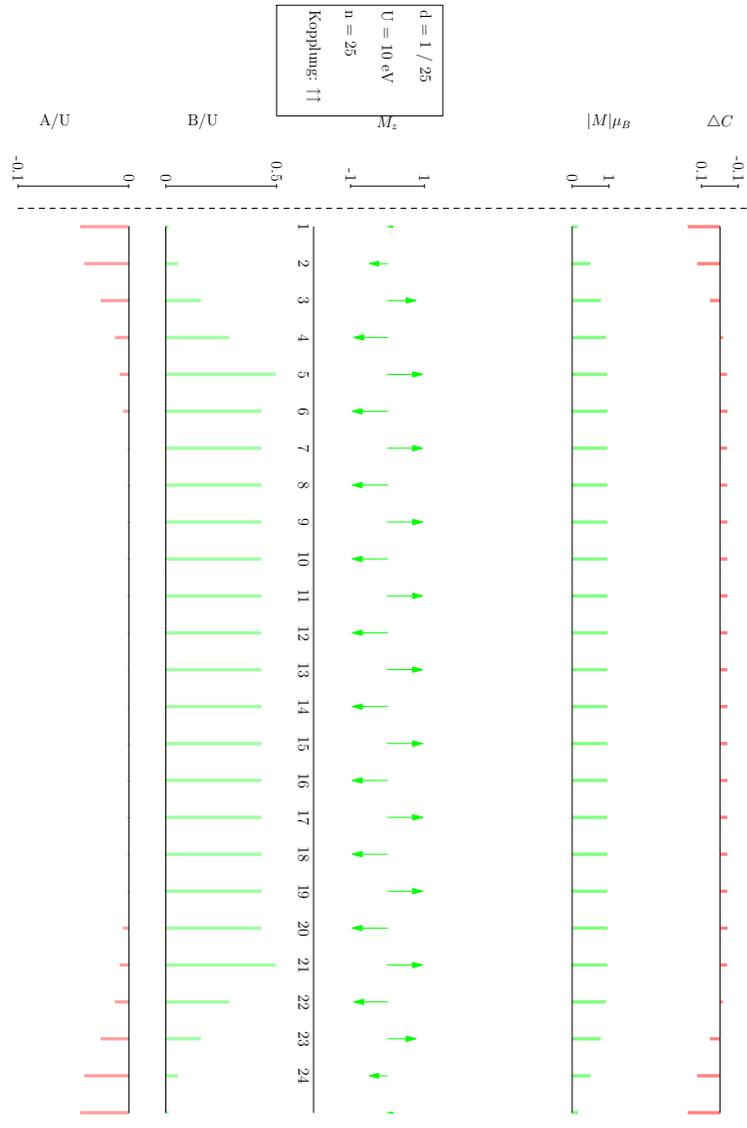


Abbildung 5.6: $U=10\text{eV}$, $d=1/25$

5.1.5 Übergangsstrukturen

Bisher wurden lediglich Superzellen aus Streifen gleicher Länge betrachtet. Dabei wurde ein Zusammenhang zwischen Kettenlänge und Dotierung beobachtet, so daß jeder Dotierung vom Typ $\frac{1}{n}$ auf natürliche Weise eine optimale Kettenlänge zugeordnet werden konnte. Für Dotierungen abweichend von diesen Werten werden neben den bisher betrachteten Strukturen zusätzlich Superzellen betrachtet, die aus Streifen unterschiedlicher Länge zusammengesetzt sind. Dabei beschränken wir uns aus Gründen der numerischen Handhabbarkeit auf Superzellen aus zwei verschiedenen Streifenlängen nach dem Muster ABAB mit einer ferromagnetischen Kopplung. Die praktische Berechnung wurde auf zwei verschiedenen Wegen durchgeführt: Zum einen ausgehend von Streifen der Länge A und B mit jeweils gleicher Dotierung, zum anderen mit gewichteter Dotierung. Dabei wurden die Variationsfelder jeweils bis zur zweiten Ordnung nach den Ausgangsfeldern berechnet und anschließend nachrelaxiert.

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
08	7/48	6/8	↓↓	-15.21	0.07	-0.06	0.80	0.02	-0.86	1.85
08	7/48	6	↓↓	-7.83	0.06	-0.05	0.75	0.14	-0.75	1.54
08	7/48	6	↓○↑	-15.19	0.07	-0.07	0.82	0.00	-1.25	2.17
08	7/48	7	↓↓	-15.20	0.09	-0.07	0.85	0.13	-1.32	2.52
08	7/48	7	↓○↑	-9.20	0.09	-0.05	0.81	0.00	-0.92	1.88
08	7/48	8	↓↓	-9.54	0.07	-0.05	0.80	0.10	-1.03	1.92
08	7/48	8	↓○↑	-3.91	0.11	-0.07	0.86	0.00	-0.92	2.47

Tabelle 5.13: Vergleich der KSZ für $d=7/48$ und $U=8eV$

5.2 Systeme mit Übernächstem-Nachbar-Hopping

Wir erweitern den Parameterbereich unserer Untersuchung, in dem wir für den Tight-Binding-Parameter t' des Übernächster-Nachbar-Hoppings endlich Werte $t' < 0$ hinzuziehen. Neben den bisher (für $t' = 0$) betrachteten kollinearen Streifenstrukturen treten nun Spiralen-Superzellen (SSZ, vgl. 4.2.3), die durch eine Streifenlänge n und einen mittleren Ausrichtungswinkel $\bar{\vartheta}$ gekennzeichnet sind, als konkurrierende Ordnungsphänomene hinzu.

Für alle folgenden Untersuchungen wurden als Stützwerte für die Dotierung $d = 1/6$, $d = 1/8$ und $d = 1/10$ ausgewählt, für die Wechselwirkungen $U = 8eV$, $U = 10eV$ und $U = 15eV$. Der Parameterbereich für t' wurde auf $-0.750eV < t' < 0$ beschränkt. Die Wahl des Vorzeichens von t' entspricht dabei üblichen Annahmen für die Kuprate. Vergleichsrechnungen mit positiven t' wurden im Rahmen der Arbeit ebenfalls durchgeführt, lieferten aber keine wesentlich neuen Erkenntnisse und werden in der Darstellung nicht berücksichtigt.

Analog zur Vorgehensweise für $t' = 0$ wurden für jeden Parametersatz (U, d, t') die variationellen Grundzustandsenergien für unterschiedliche SSZ miteinander verglichen und ggf. auch KSZ hinzugezogen. Bei der Untersuchung von SSZ stellt sich das Problem, daß n und $\bar{\vartheta}$ unterschiedliche Anforderungen an die Superzellen hinsichtlich ihrer räumlichen Periodizität stellen: Um periodische Randbedingungen mit einer Periodizität N zu gewährleisten, müssen stets die Gleichungen $\bar{\vartheta} = \frac{2k}{N}\pi$ und $n = \frac{N}{l}$ mit ganzzahligen k und l erfüllt sein. Da die Anforderungen hinsichtlich des Speicherbedarfs mit zunehmender Systemlänge N anwachsen und nach oben beschränkt sind, können nur ausgewählte Werte für n und $\bar{\vartheta}$ betrachtet werden.

Zu vorgegebenen Werten für U und d teilt sich der Parameterbereich in zwei Regime: Unterhalb eines kritischen Wertes $|t'|$ mit $t'_c(U, d)$ bilden sich weiterhin kollineare Streifen-Superzellen aus, oberhalb davon Spiralen-Streifen-Superzellen. Dementsprechend teilen wir die Darstellung der Ergebnisse auf in einen Bereich kleiner $|t'|$ sowie den Grenzbereich großer $|t'|$.

5.2.1 Grundzustandsbestimmung in Abhängigkeit von t' , d und U

Grenzbereich kleiner $|t'| < t'_c$

Für Werte von $|t'| < t'_c$ finden wir weiterhin kollineare Grundzustände. Der kritische Wert t'_c hängt dabei von den vorgegebenen Werten U und d ab. In den Tabellen 5.14, 5.15 und 5.16 listen wir die Ergebnisse im Fall $d = 1/10$ für die Wechselwirkungen $U = 8eV$, $U = 10eV$ und $U = 15eV$ jeweils für $t' = 0$, $t' = -0.300eV$, $t' = -0.500eV$ sowie den kleinsten Wert von $|t'| < t'_c$ auf.

Die KSZ weisen für gleiche Parameter U und d die gleichen strukturellen Eigenschaften wie im Fall $t' = 0$ auf, also den Zusammenhang $n = 1/d$ für die Streifenlänge, ferromagnetische Kopplung zwischen den Streifen sowie einen Néel-artigen Block in der Streifenmitte. Während sich die Ladungsinhomogenität bei steigendem $|t'|$ nur geringfügig ändert, wachsen die Magnetisierungen im Randbereich der Streifen bei Annäherung von $|t'|$ an t'_c deutlich an und erreichen dabei Werte von bis zu $0.21\mu_B$.

d	t'	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
1/8	-0.000	10	$\uparrow\downarrow$	-44.20	0.09	-0.10	0.92	0.12	-1.93	3.27
1/8	-0.300	10	$\uparrow\downarrow$	-47.78	0.09	-0.11	0.90	0.14	-1.79	2.92
1/8	-0.500	10	$\uparrow\downarrow$	-53.97	0.08	-0.11	0.90	0.17	-1.80	3.01
1/8	-0.550	10	$\uparrow\downarrow$	-56.44	0.09	-0.12	0.90	0.21	-1.63	3.06

Tabelle 5.14: Grundzustände für $|t'| < t'_c, U = 8eV$ und $d = 1/10$

d	t'	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
1/10	-0.000	10	$\uparrow\downarrow$	-44.79	0.09	-0.10	0.95	0.13	-3.09	4.38
1/10	-0.300	10	$\uparrow\downarrow$	-50.63	0.09	-0.11	0.95	0.14	-2.94	4.33
1/10	-0.500	10	$\uparrow\downarrow$	-58.21	0.09	-0.12	0.94	0.16	-2.57	4.23
1/10	-0.550	10	$\uparrow\downarrow$	-60.87	0.09	-0.12	0.94	0.17	-2.51	4.38

Tabelle 5.15: $|t'| < t'_c, U = 10eV, d = 1/10$

d	t'	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
1/10	-0.000	10	$\uparrow\downarrow$	-26.54	0.10	-0.12	0.98	0.13	-6.59	7.45
1/10	-0.300	10	$\uparrow\downarrow$	-33.20	0.10	-0.13	0.98	0.14	-5.67	7.22
1/10	-0.500	10	$\uparrow\downarrow$	-41.64	0.09	-0.13	0.97	0.13	-5.35	6.90
1/10	-0.625	10	$\uparrow\downarrow$	-50.97	0.09	-0.14	0.97	0.20	-5.73	7.21

Tabelle 5.16: $|t'| < t'_c, U = 15eV, d = 1/10$

Übergangsbereich

Überschreitet $|t'|$ den kritischen Wert t'_c , so geht das System in einen spiralartigen Grundzustand (SSZ) über. Im Grenzbereich ($|t'| \approx t'_c$) bleiben die zuvor bei gleichen Werten für U, d und $t' = 0$ gefundenen Streifenbreiten n der Inhomogenitäten erhalten und gehen in die SSZ wiederum als Streifenbreiten ein. Dabei kann es insbesondere bei schwach ausgeprägten Inhomogenitäten auch zu einem Abweichen von diesem Verhalten kommen.

d	t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
1/6	-0.650	6	0.750	-22.51	0.03	-0.02	0.61	0.43	0.00	1.09
1/8	-0.625	8	0.750	-43.89	0.03	-0.03	0.72	0.57	-0.38	1.47
1/10	-0.575	10	0.800	-57.66	0.06	-0.07	0.86	0.44	-1.30	2.47

Tabelle 5.17: t'_c für $U = 8eV$

d	t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
1/6	-0.725	8	0.750	-30.68	0.01	-0.01	0.59	0.53	-0.13	1.02
1/8	-0.675	8	0.750	-51.61	0.06	-0.07	0.85	0.48	-1.28	2.63
1/10	-0.575	10	0.800	-63.02	0.07	-0.09	0.91	0.44	-2.13	3.46

Tabelle 5.18: t'_c für $U = 10eV$

d	t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
1/6	-0.725	6	0.750	-17.58	0.03	-0.03	0.62	0.38	-0.34	0.81
1/8	-0.700	8	0.750	-35.90	0.07	-0.07	0.90	0.43	-2.15	3.78
1/10	-0.650	10	0.800	-50.59	0.09	-0.13	0.97	0.19	-5.09	6.63

Tabelle 5.19: t'_c für $U = 15eV$

Die mittleren Winkel $\bar{\vartheta}$ der Momente nehmen mit wachsendem $|t'|$ zu. Charakteristisch für den Übergangsbereich ist darüber hinaus eine ausgeprägte Abweichung der Werte ϑ_i für die Winkel der einzelnen Momente vom mittleren Winkel $\bar{\vartheta}$.

Die Abbildungen 5.7 bis 5.15 zeigen die Ladungen und magnetischen Momente sowie die äußeren Variationsparameter für die einzelnen Gitterplätze als Ergebnisse der Variationsrechnungen jeweils für $|t'| = t'_c$ bei $U = 8eV$, $U = 10eV$ und $U = 15eV$ sowie $d = 1/6$, $d = 1/8$ und $d = 1/10$

Zur Legende der Abbildungen 5.7 bis 5.15 und 5.16 bis 5.24:

ΔC	Abweichung von der mittleren Ladung	
$ M_i $	Betrag des magnetischen Moments	
ϑ_i	Winkel der Momente	graue Kreissegmente:
		Vollkreis: $\vartheta_i = \pi$
		Leerkreis: $\vartheta_i = 0$
\vec{M}_i	Vektoriellles Moment	
B/U	Betrag des Austauschfeldes in Relation zur WW	
A/U	Betrag der Orbitalverschiebung in Relation zur WW	

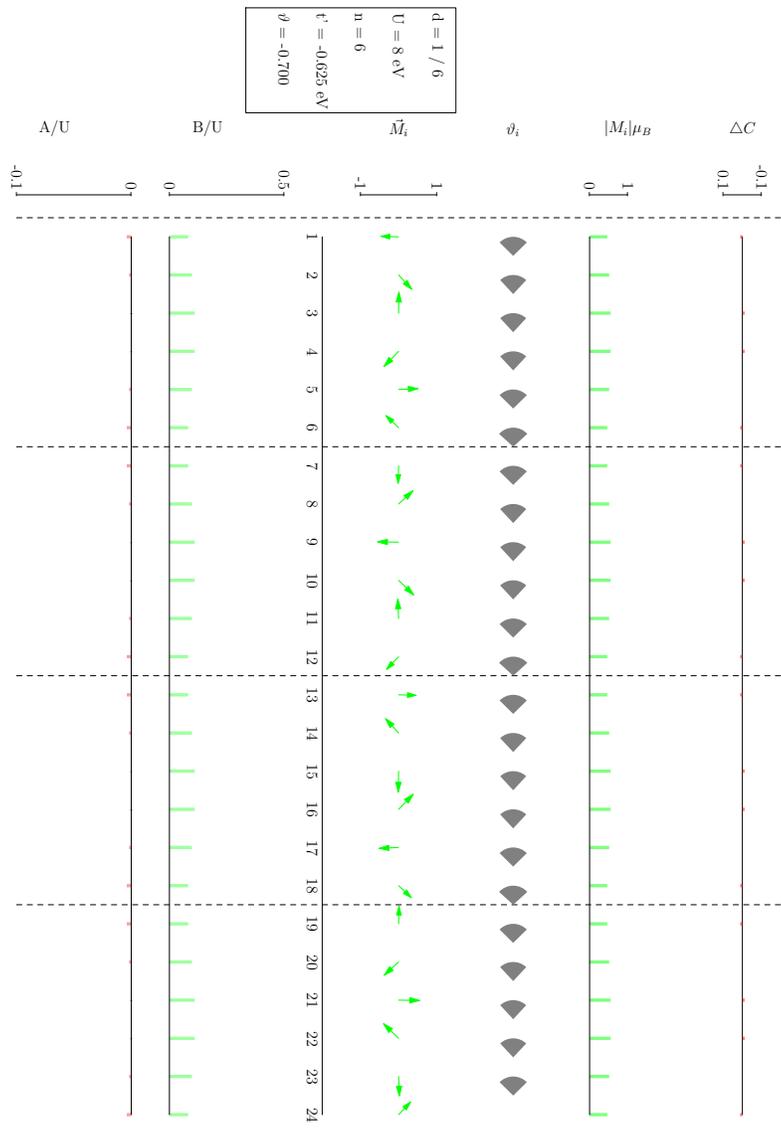


Abbildung 5.7: $d=1/6, t'=-0.625 \text{ eV}, U=8 \text{ eV}$

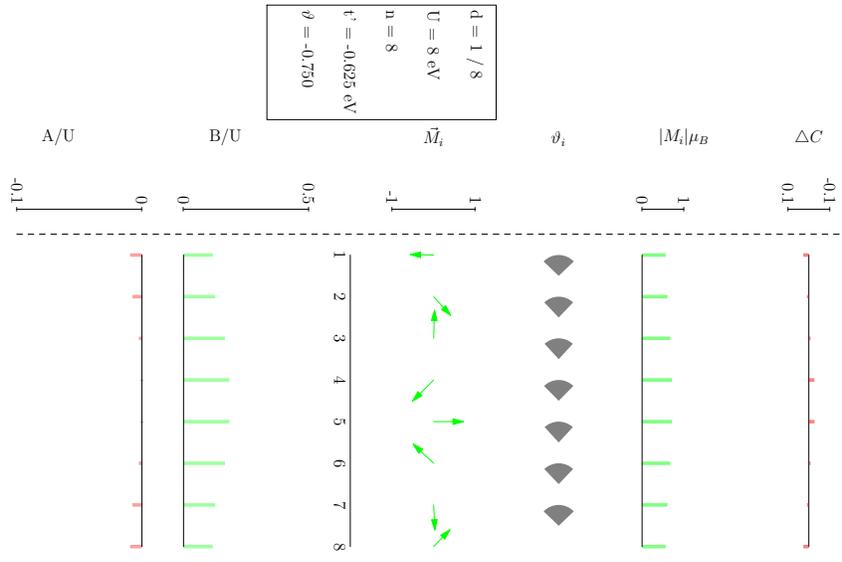


Abbildung 5.8: $d=1/8, t^t=-0.625\text{eV}, U=8\text{eV}$

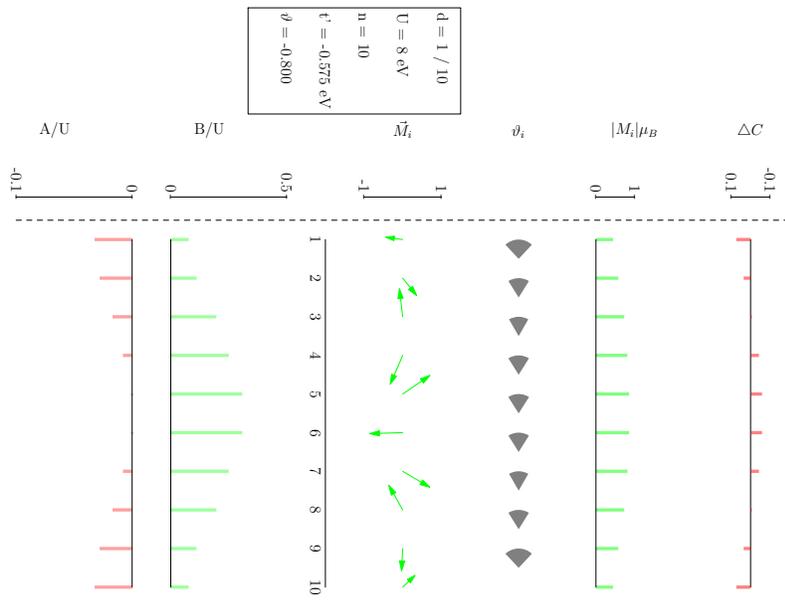


Abbildung 5.9: $d=1/10, t^t=-0.575\text{eV}, U=8\text{eV}$

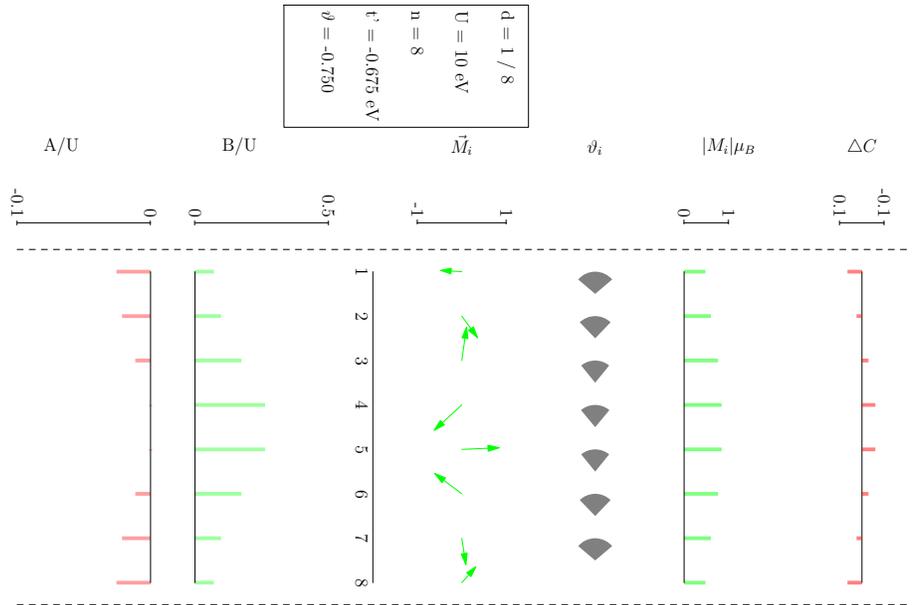
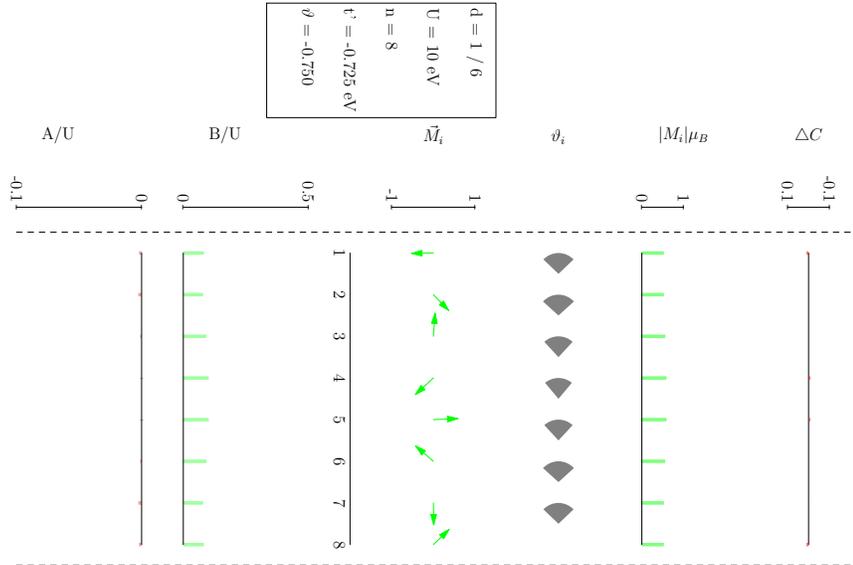


Abbildung 5.10: $d=1/6, t^*=-0.725\text{eV}, U=10\text{eV}$

Abbildung 5.11: $d=1/8, t^*=-0.675\text{eV}, U=10\text{eV}$

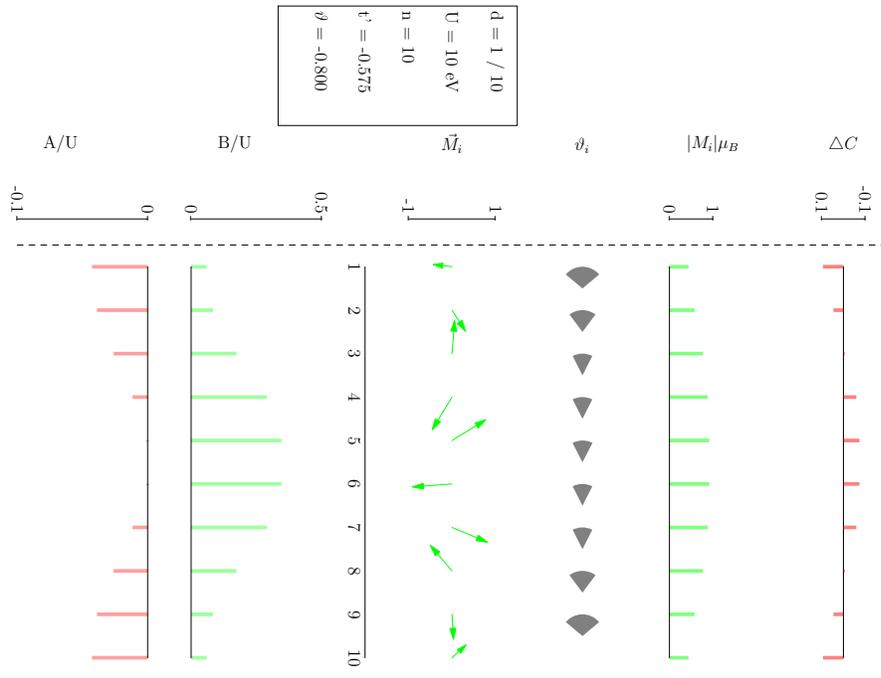


Abbildung 5.12: $d=1/10, t^x=-0.575 \text{ eV}, U=10 \text{ eV}$

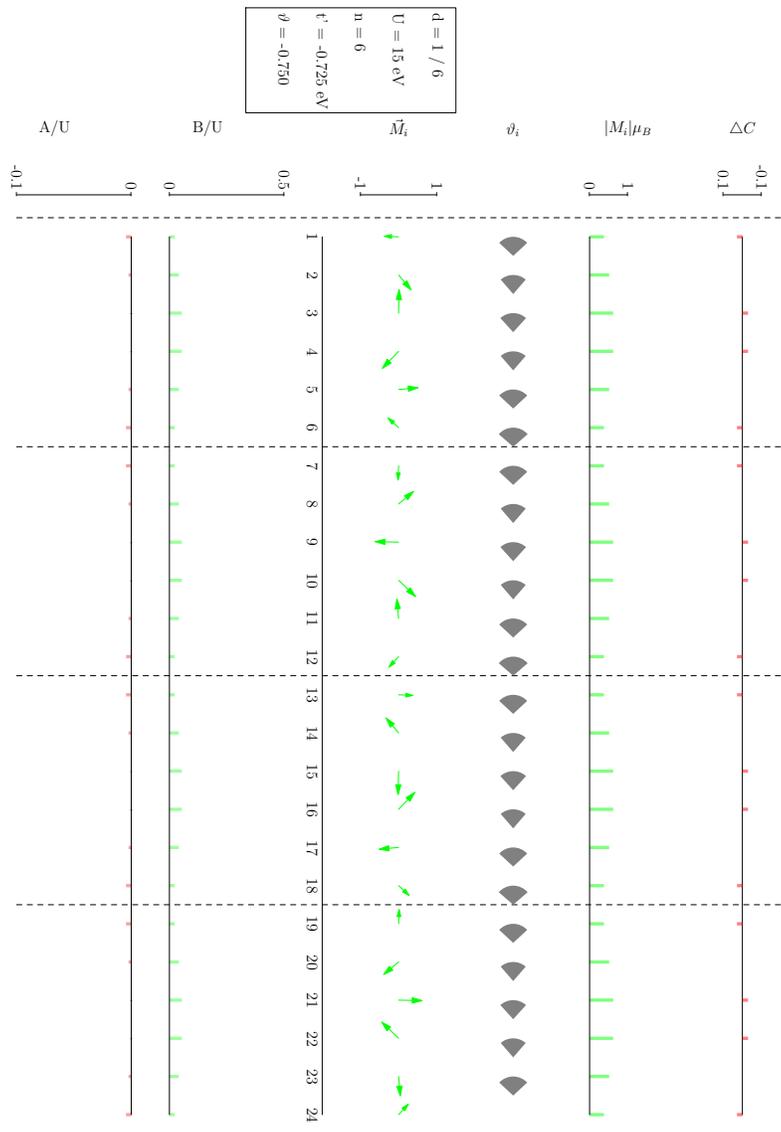


Abbildung 5.13: $d=1/6, t^x=-0.725 \text{ eV}, U=15 \text{ eV}$

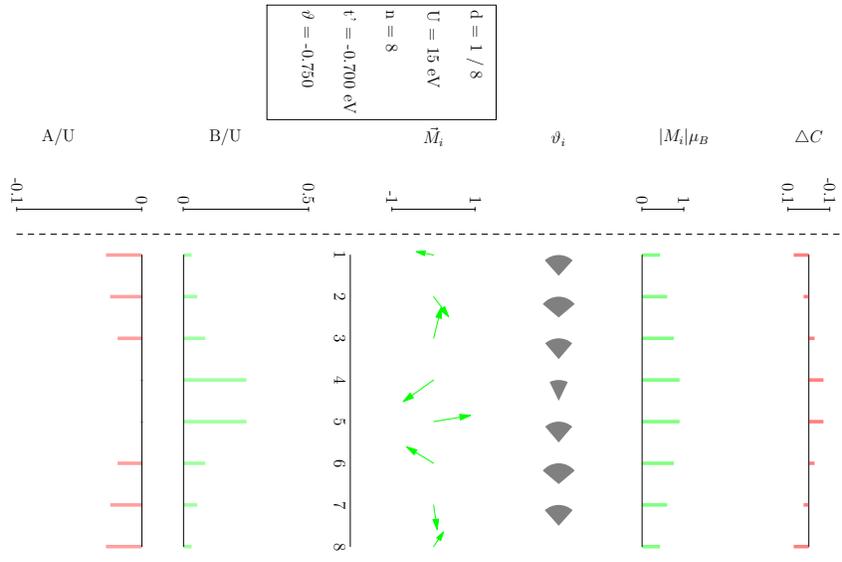


Abbildung 5.14: $d=1/8, t^i=-0.700\text{eV}, U=15\text{eV}$

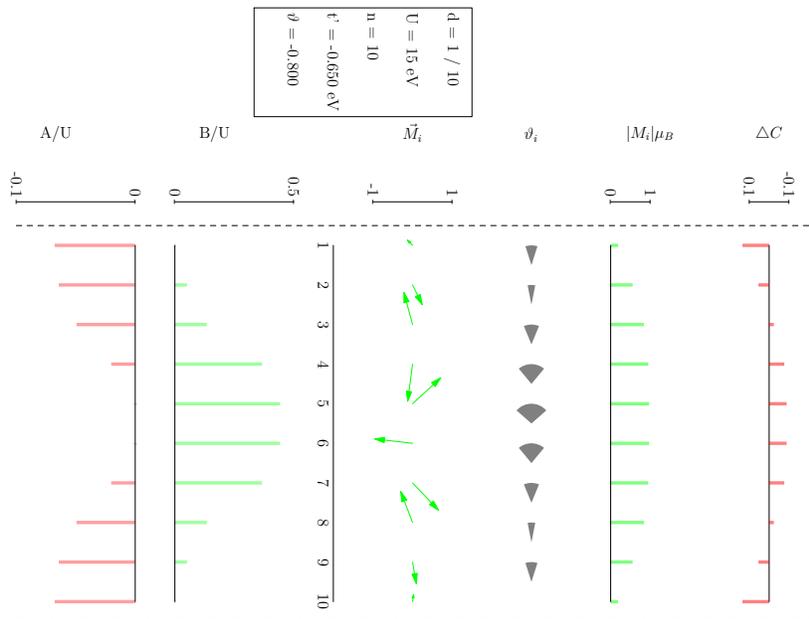


Abbildung 5.15: $d=1/10, t^i=-0.650\text{eV}, U=15\text{eV}$

Grenzfall großer $|t'|$

Als Grenzfall für große Werte von $|t'|$ betrachten wir hier $|t'| = 0.750$. Bei diesem Wert sind die Grundzustände jeweils durch spiralsche Streifen-Superzellen charakterisiert. Auf der anderen Seite haben wir größere Werte für $|t'|$ nicht mehr in Betracht gezogen, da wir sie als unphysikalisch erachtet haben. Die Tabellen 5.20, 5.21 und 5.22 fassen die Rechnungen bei den standardisierten Werten für U und d zusammen; in den Abbildungen 5.16 bis 5.24 sind die entsprechenden Spin- und Ladungsverteilung sowie die Werte für die äußeren VP aufgetragen.

Die Ausprägung der Ladungs- sowie der Spinhomogenität nimmt dabei mit wachsender Dotierung einerseits sowie bei kleineren Werten für U deutlich ab. So bildet sich für $d = 1/6$ ein Zustand mit weitgehend homogener Ladungsverteilung und Magnetisierung heraus (vgl. Legende Seite 61).

d	t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
1/6	-0.750	6	0.750	-31.21	0.00	-0.00	0.54	0.53	-0.01	0.91
1/8	-0.750	10	0.750	-53.00	0.01	-0.01	0.68	0.65	-0.12	1.43
1/10	-0.750	10	0.700	-67.78	0.04	-0.05	0.81	0.58	-0.97	2.28

Tabelle 5.20: $t' = -0.750, U = 8eV$

d	t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
1/6	-0.750	6	0.750	-32.20	0.01	-0.01	0.61	0.52	0.00	1.08
1/8	-0.750	10	0.700	-57.15	0.03	-0.03	0.76	0.61	-0.52	1.89
1/10	-0.750	10	0.700	-76.41	0.05	-0.07	0.89	0.57	-1.65	3.32

Tabelle 5.21: $t' = -0.750eV, U = 10eV$

d	t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
1/6	-0.750	6	0.750	-18.76	0.02	-0.02	0.58	0.45	-0.19	0.77
1/8	-0.750	10	0.700	-55.10	0.04	-0.05	0.82	0.54	-1.07	2.51
1/10	-0.750	10	0.700	-57.18	0.08	-0.12	0.96	0.39	-4.36	5.98

Tabelle 5.22: $t' = -0.750eV, U = 15eV$

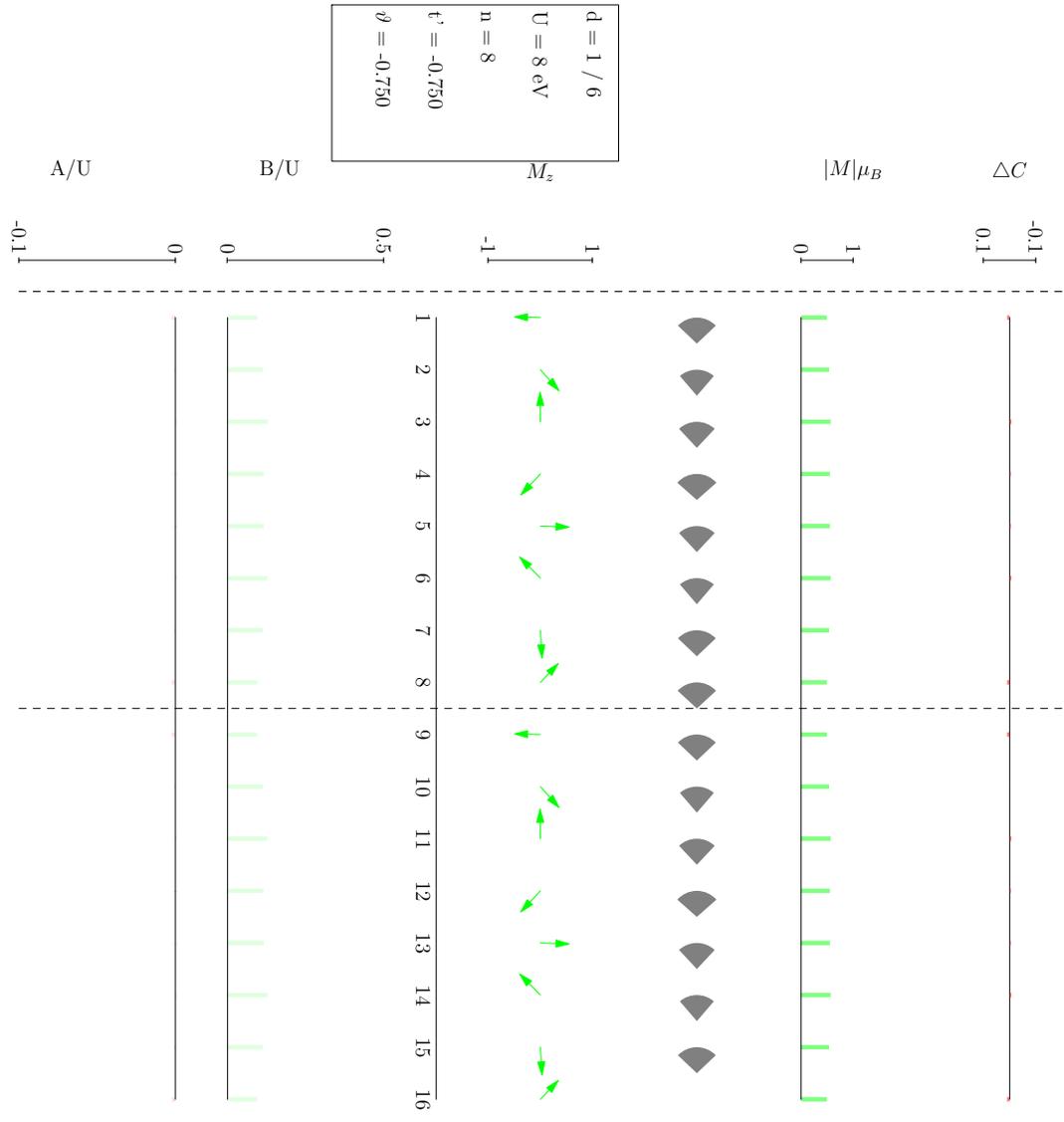


Abbildung 5.16: $d=1/6, t'=-0.750\text{eV}, U=8\text{eV}$

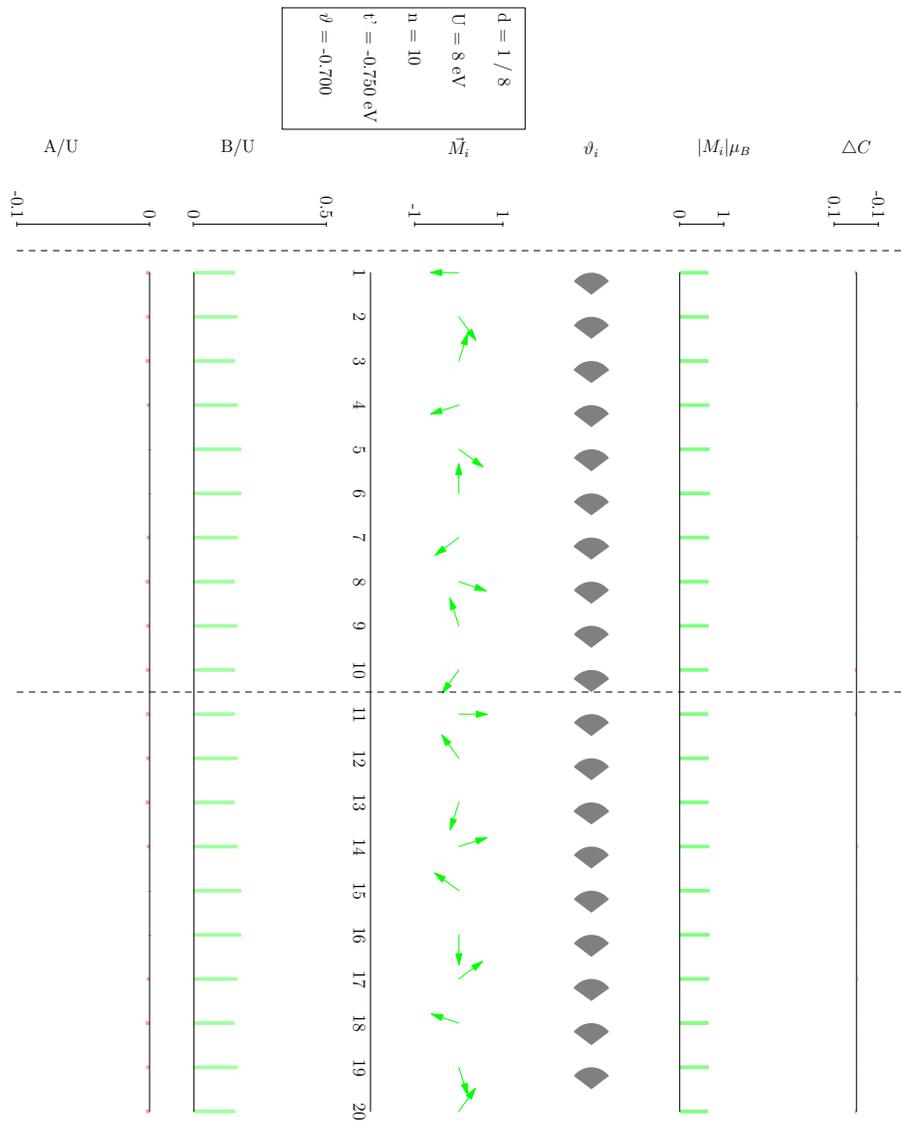


Abbildung 5.17: $d=1/8, t^x=-0.750, U=8 \text{ eV}$

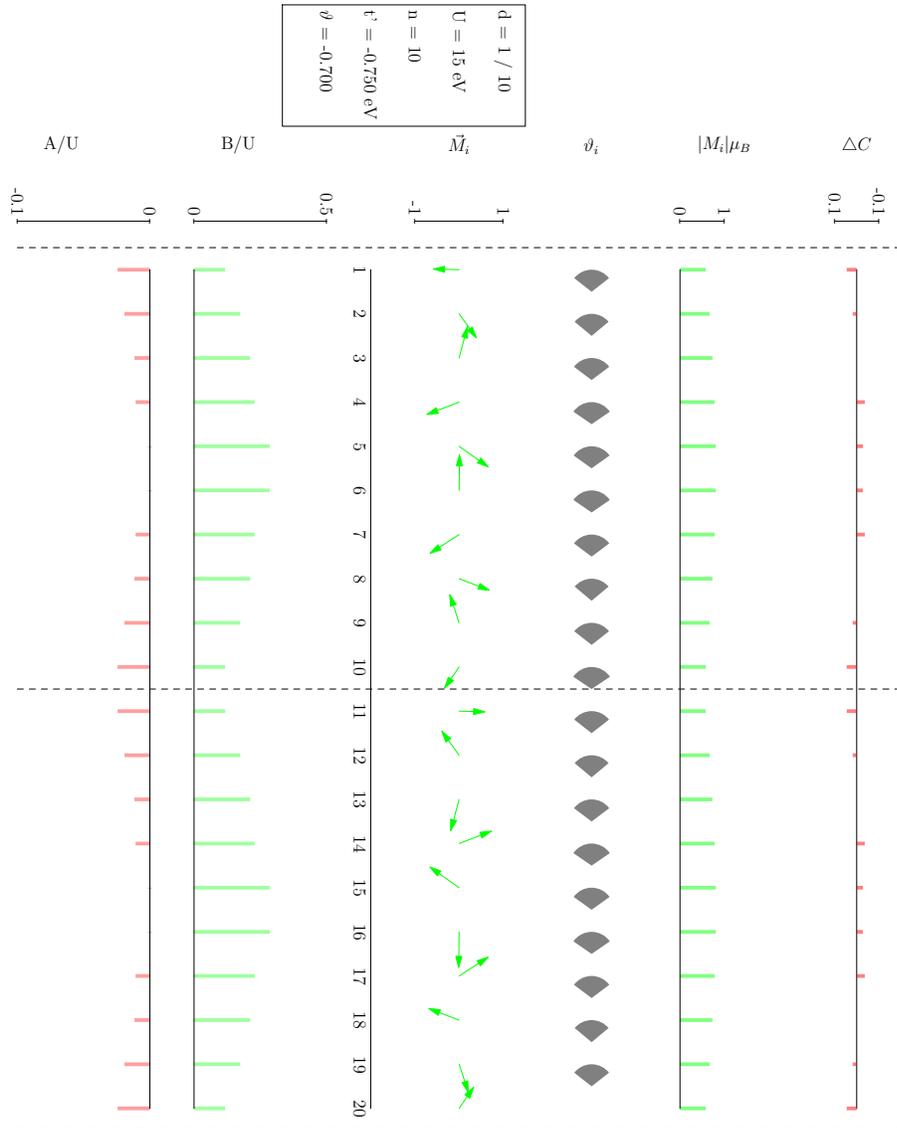


Abbildung 5.18: $d=1/10, t^x=-0.750 \text{ eV}, U=8 \text{ eV}$

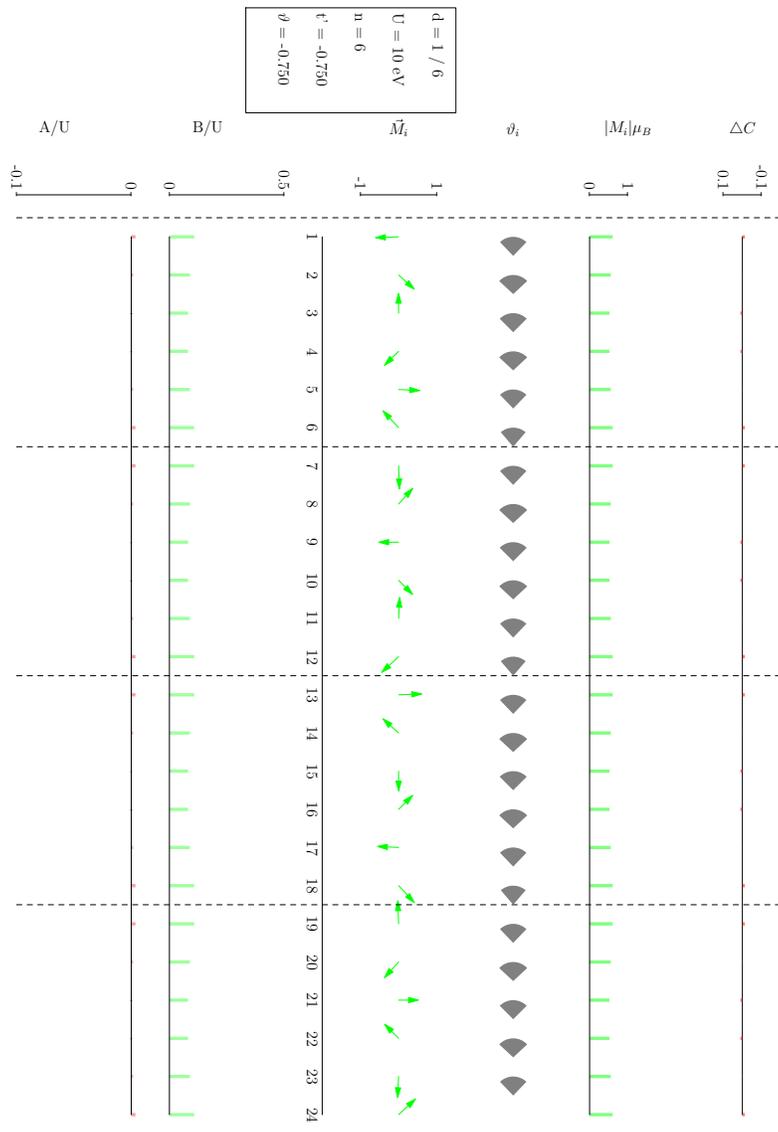


Abbildung 5.19: $d=1/6, t'=-0.750 \text{ eV}, U=10 \text{ eV}$

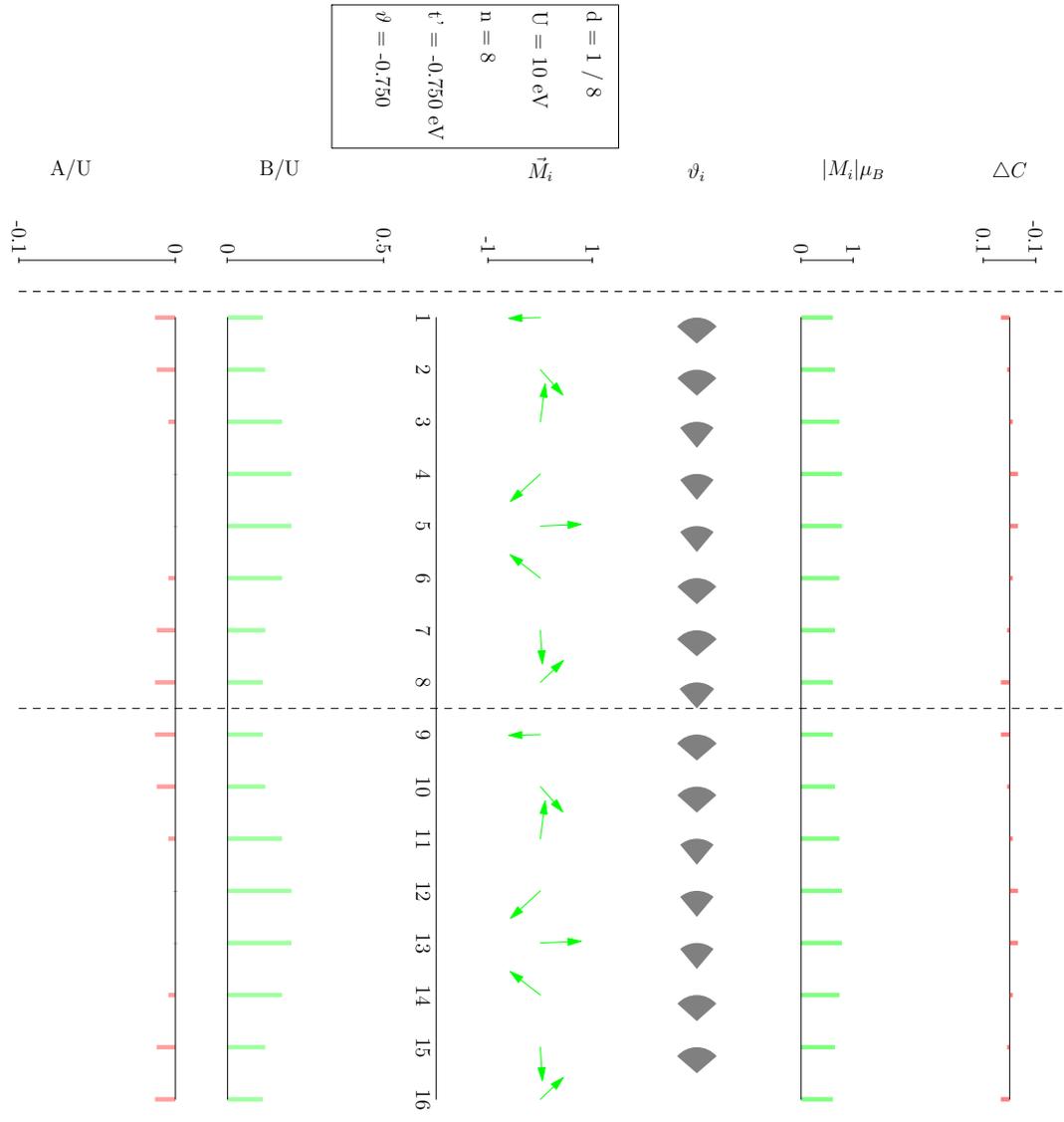


Abbildung 5.20: $d=1/8, t'=-0.750 \text{ eV}, U=10 \text{ eV}$

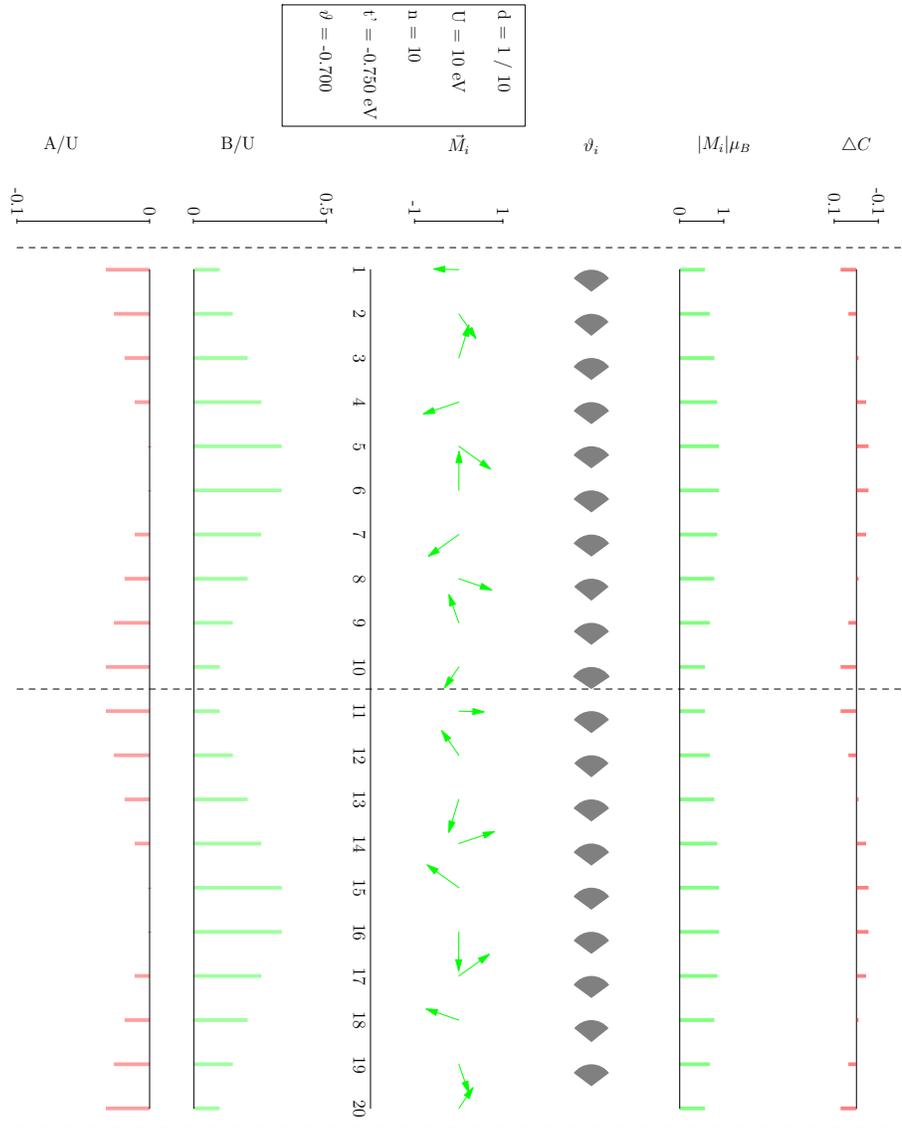


Abbildung 5.21 : $d=1/10, t^x=-0.750\text{eV}, U=10\text{eV}$

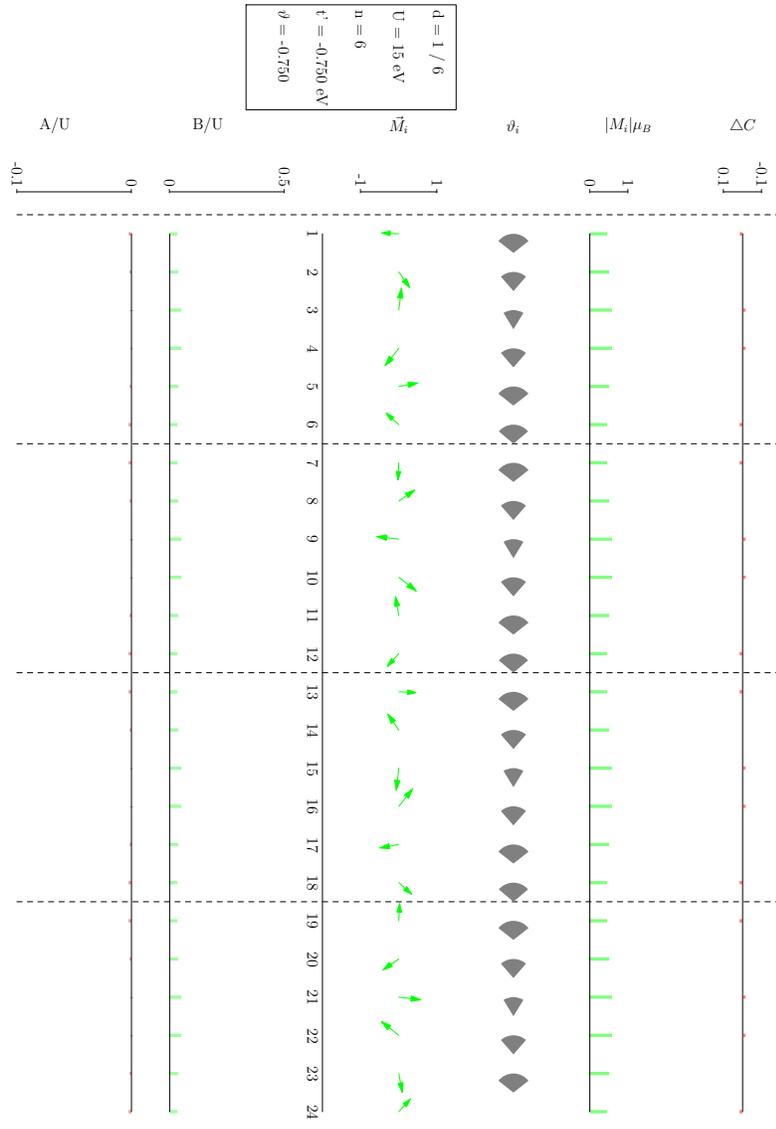
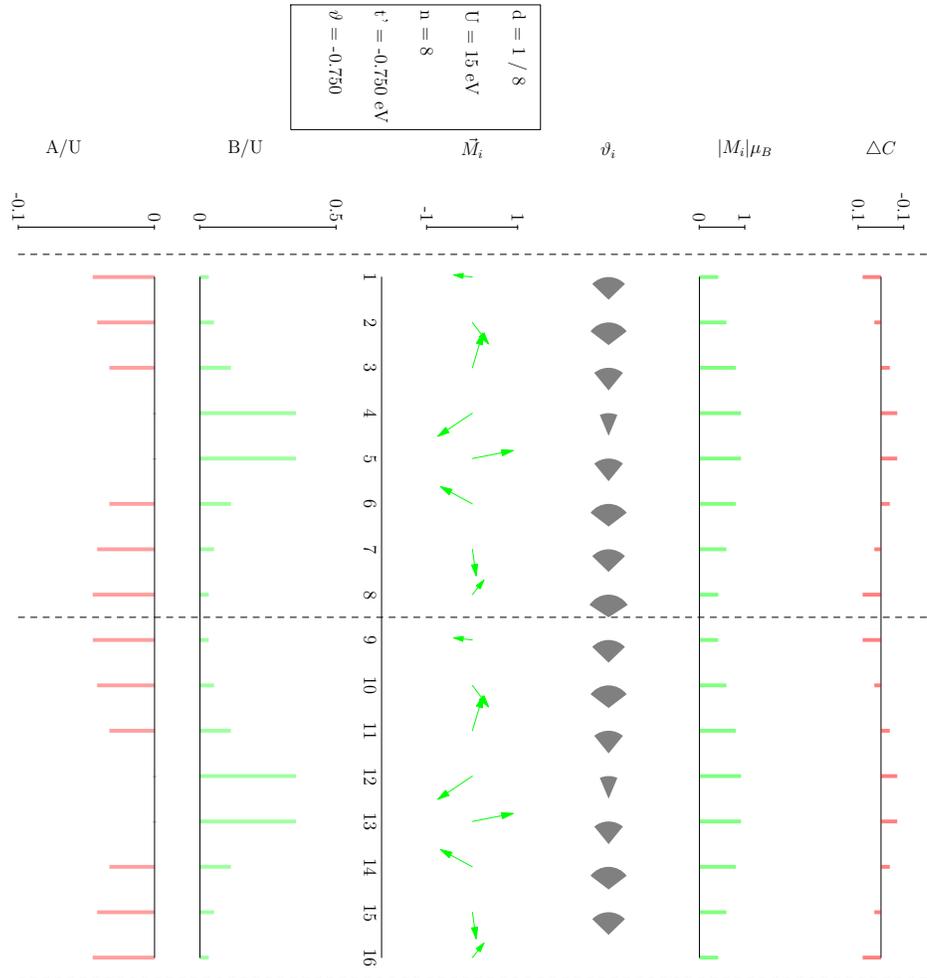
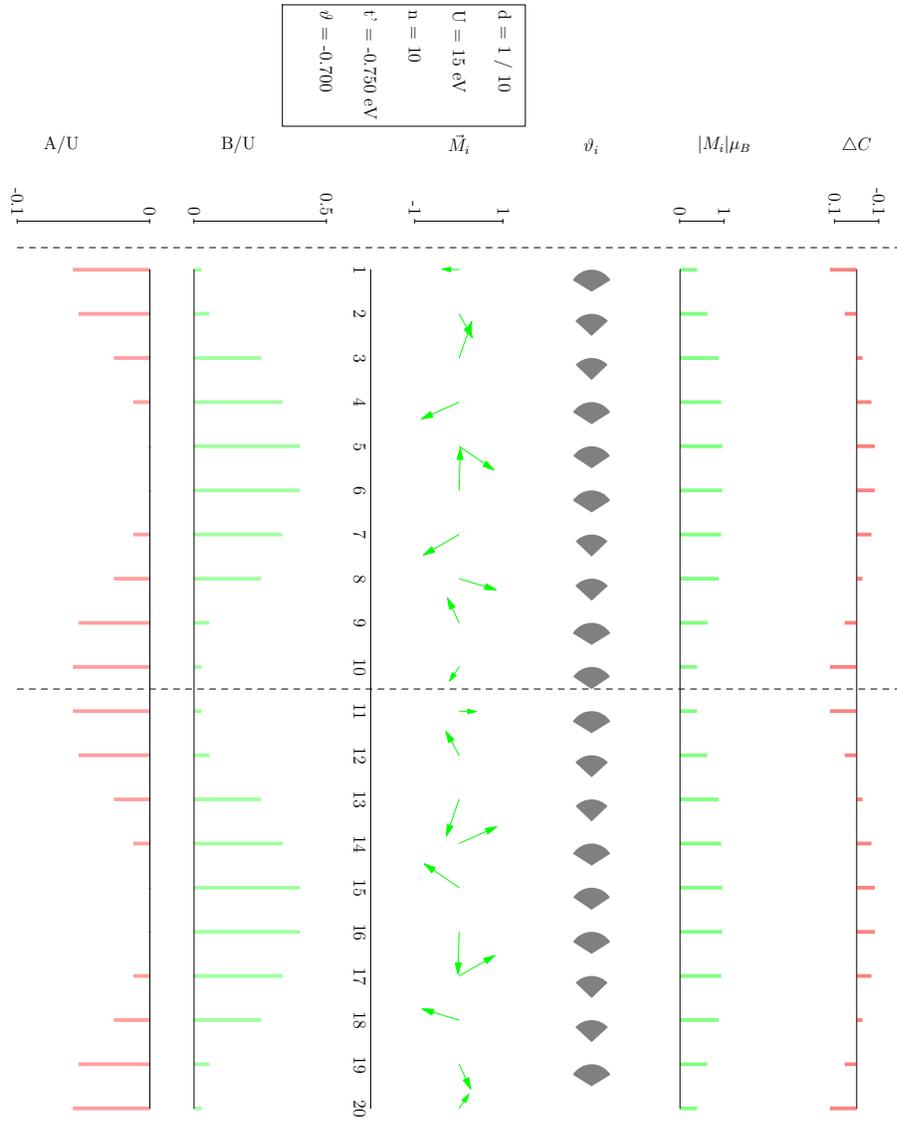


Abbildung 5.22: $d=1/6, t'=-0.750 \text{ eV}, U=15 \text{ eV}$

Abbildung 5.23: $d=1/8, t'=-0.750\text{eV}, U=15\text{eV}$

Abbildung 5.24: $d=1/10, t^x=-0.750 \text{ eV}, U=15 \text{ eV}$

Kapitel 6

Zusammenfassung

Zielsetzung

Ausgangspunkt unserer Untersuchungen war die Beobachtung eines inhomogenen Zustandes in den dotierten CuO_2 -Ebenen von Kuprat-Supraleitern, der vorher bereits von der Theorie postuliert wurde. Dieser äußert sich in eindimensionalen Spin- und Ladungsinhomogenitäten und tritt schon im dotierten Einband-Hubbard-Modell auf. In unserer Arbeit wurde das dotierte eindimensionale Einband-Hubbard-Modell in Abhängigkeit der Modellparameter Wechselwirkung, Dotierung und Übernächstem-Nachbar-Hopping mittels eines erweiterten Gutzwiller-Ansatzes einer umfassenden quantitativen Analyse unterzogen. Um den sehr hohen Rechenaufwand einer 2D-Rechnung zu vermeiden benutzten wir ein 1D-Modell in einer Superzellen-Geometrie.

Methodik

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Verfahren entwickelt, um mittels Ein-Band-Gutzwiller-Wellenfunktionen inhomogene Ladungs- und Spinverteilungen als variationelle Lösungen zum Hubbard-Modell zu berechnen. Dabei wurde der ursprüngliche Ein-Band-Gutzwiller-Ansatz - mit den jeweiligen atomaren Doppelbesetzungen m_i als einzigen inneren Variations-Parametern - um zwei äußere Variationsparameter pro Gitterplatz erweitert: Zum einen um ein vektorielles Austauschfeld \vec{B}_i , das über eine Aufspaltung der beiden Spin-Niveaus die Ausprägung eines magnetischen Momentes an Gitterplatz i bewirkt. Zum anderen um eine skalare Orbitalverschiebung A_i , mit der die lokalen Ladungsdichten n_i optimiert werden können. Äußere und innere VP wurden im Programmablauf separat variiert. Dies bedeutet zwar einen erheblichen numerischen Mehraufwand im Vergleich zu bisherigen Verfahren mit simultaner Minimierung, erlaubt dafür eine verbesserte Kontrolle über die VP und erhöht die Rechengenauigkeit. Die Energielandschaft läßt es nicht zu, die Variationsparameter für jeden einzelnen Gitterplatz unabhängig voneinander zu variieren. Diesem Problem konnte Abhilfe geschaffen werden, indem wir durch Einführung von Streifen-Superzellen die Anzahl der äußeren VP und somit den Suchraum sinnvoll eingeschränkt haben. Für die Rechnungen untersuchten wir periodische Superzellen mit bis zu 50 Atomen, wobei jedes Atom

bis zu 3 unabhängige VP enthielt (bzw. 4 bei Modellen mit übernächstem Nachbar Hopping). Gleichzeitig haben wir damit die Möglichkeit geschaffen, die gefundenen Grundzustände nach Streifen-Superzellen zu klassifizieren und der Energie nach zu ordnen.

Resultate

Zunächst wurden Parametersätze ohne Übernächste-Nachbar-Hoppings ($t' = 0$) untersucht. Dabei wurden zu jedem Satz aus Wechselwirkung U und Dotierung d jeweils Rechnungen mit unterschiedlichen zugrundeliegenden Streifen-Superzellen durchgeführt. Als Werte für die Wechselwirkung wurden zunächst $U = 8eV$ und $U = 10eV$ angenommen, was gängigen Annahmen über die Stärke der WW entspricht. Daneben wurden die gleichen Rechnungen mit $U = 15eV$ durchgeführt, um auch den Fall starker Kopplung zu studieren. Wir konnten die Existenz von Spin- und Ladungsinhomogenitäten für Dotierungen bis hin zu $d = 1/4$ nachweisen und darüber hinaus deren Struktur näher bestimmen: Die magnetischen Momente \vec{M}_i sind grundsätzlich kollinear (also parallel bzw. antiparallel) ausgerichtet. Sowohl die lokalen Ladungsdichten als auch die Beträge der lokalen Momente lassen sich durch gerade Funktionen auf Streifen beschreiben, die ihr Maximum jeweils in der Streifenmitte annehmen und zum Streifenrand hin abklingen. Die Streifenbreite hängt dabei antiproportional von der Dotierung ab („gefüllte Streifen“: Für eine vorgegebene Dotierung d ist die Streifenbreite n gegeben durch den Zusammenhang

$$n = 1/d.$$

Hier ergibt sich eine Abweichung zum Experiment, wo „halb gefüllte Streifen“ mit der Breite $n = 1/2d$ beobachtet wurden. Durch eine sinnvolle Abschätzung konnten wir diese Verschiebung als Einfluss der langreichweitigen Coulomb-Wechselwirkung identifizieren.

Innerhalb der Streifen-Superzellen sind die einzelnen Streifen jeweils *ferromagnetisch* gekoppelt, d.h. die Randatome sind parallel angeordnet. Im Inneren der Streifen liegt eine antiferromagnetische Ordnung vor. Abhängig von der Dotierung und damit der Streifenbreite bildete sich dabei ein Néel-artiger Block mit fast vollständig polarisierter Spin-Struktur und fast halber Bandfüllung in der Mitte der Streifen und einem Ladungsverarmten Übergangsbereich am Rand heraus. Für ungerade Werte von d treten in den Grundzuständen Streifen mit einer ungeraden Anzahl inäquivalenter Atome auf, woraus ggf. eine -unphysikalische- endliche Magnetisierung auf einem Streifen resultiert. Die entsprechende Grundzustandsenergie kann sich dadurch erhöhen; gleichwohl bleibt der Zusammenhang zwischen Streifenbreite und Dotierung erhalten.

Neben den genannten Werten für die Dotierung wurden auch Grenzfälle betrachtet, bei denen d gerade den Mittelwert zwischen $1/6$ und $1/8$ bzw. $1/8$ und $1/10$ bildet. In diesem Fall zeigte sich, daß sich die SSZ der Grundzustände aus je einem Streifen der Breite 6 und 8 bzw. 8 und 10 zusammensetzt. Dabei beobachten wir eine Ladungsver-schiebung, so daß der Zusammenhang zwischen Streifenbreite und Dotierung für die einzelnen Streifen erfüllt bleibt. Allerdings stieß das Verfahren hier an Genauigkeitsgrenzen, die gefundenen Grundzustände waren z.T. von konkurrierenden Ordnungen

energetisch nicht mehr zu unterscheiden.

Außerdem wurden diverse Grenzfälle untersucht. Zunächst wurden sehr kleine Dotierung am Beispiel $d = 1/25$ behandelt. Dabei zeigte sich erneut der Zusammenhang zwischen Dotierung und Streifenbreite. Der Unterschied zu größeren Dotierungen vollzieht sich über einen verbreiterten Néel-artigen Block, während der Übergangsbereich im wesentlichen unverändert blieb.

Ferner wurde der Grenzfall großer WW (bis zu $U = 30eV$) betrachtet, was im mikroskopischen Modell dem Übergang zum $t - J$ Modell entspricht. Für große Dotierung ($d > 1/6$) waren die Grundzustände oberhalb einer kritischen WW energetisch nicht mehr von paramagnetischen Lösungen zu unterscheiden. Jedoch blieb die Ausprägung der Inhomogenitäten im wesentlichen erhalten.

Abschließend wurde noch eine Studie zur Wirkungsweise der äußeren VP durchgeführt: Zu einem auskonvergierten Grundzustand wurden Vergleichsrechnungen ohne Orbitalverschiebung angestellt. Dabei blieb die magnetische Ordnung im wesentlichen unverändert, während sich die Ladungsinhomogenität deutlich stärker ausgeprägte. Die Rolle der Orbitalverschiebung besteht offensichtlich darin, diese unphysikalischen Effekte zu kompensieren.

Im zweiten Teil der Studie wurden Übernächste-Nachbar-Hoppings in die Rechnungen einbezogen. Im Hinblick auf die Physik der Kuprate ist diese Näherung nur für hinreichend kleine Verhältnisse $|t'|/t|$ sinnvoll, da ansonsten Interstripe-Wechselwirkungen dominieren und echt zweidimensionale Strukturen an die Stelle der Streifen treten. Ferner unterscheiden sich 1-D und 2-D Modelle hinsichtlich der Position der übernächsten Nachbarn.

Im Unterschied zu den bisherigen Resultaten sind die magnetischen Momente nun nicht mehr für alle Parametersätze kollinear ausgerichtet, sondern können auch spiralförmig geordnet sein. Die Form der Spiralen wird charakterisiert durch einen mittleren Winkel ϑ zwischen benachbarten magnetischen Momenten. In der Durchführung der Rechnungen ergab sich hieraus eine Einschränkung: da die Ladungs- und Spinwellen einerseits und die Spiralstruktur andererseits unterschiedliche Periodizitäten implizieren, lassen sich kommensurable Strukturen i. A. nur um den Preis schnell anwachsender Systemgrößen und damit anwachsendem Speicherbedarfs konstruieren.

Abhängig vom Parameter $|t'|$ des Übernächste-Nachbar-Hopping können wir drei Phasen unterscheiden. Unterhalb eines von Wechselwirkung U und Dotierung d abhängigen Grenzwertes t'_c bildet sich eine kollineare Phase heraus, deren Struktur der für $t' = 0'$ entspricht. Oberhalb dieses Wertes bildet sich eine Phase heraus, die sowohl Spin als auch Ladungswellen aufweist und dabei spiralförmig geordnet ist.

Die gefundenen t'_c liegen mit Werten von $-0.575eV$ bis $-0.750eV$ deutlich über den Parametern, die in 2D Rechnungen ein Aufbrechen der antiferromagnetischen Grundordnung bewirken. Hierbei handelt es sich vermutlich um ein Artefakt der Reduktion auf den eindimensionalen Fall, da der Abstand zum übernächsten Nachbarn in 2 Dimensionen um den Faktor $\sqrt{2}$ kleiner ist. Ferner wurde für hinreichend große $|t'|$ eine Unterdrückung der Ladungswelle beobachtet.

Insgesamt konnten wir mit dieser Studie dazu beitragen, die Physik der Streifenstrukturen in Kupraten und- allgemeiner des 1D- Hubbard-Modells systematischer als bisher zu erfassen und sie gleichzeitig auf ein relativ einfach zu handhabendes mikroskopisches System zurückzuführen.

Ausblick

Eine sinnvolle Fortführung dieses Projekts wäre die Erweiterung auf das 2D-Hubbard-Modell. Zu diesem Zweck müsste ein neuer Algorithmus zur k -Raum-Summiation in 2 Dimensionen in den Bandstruktur-Teil des Programms implementiert werden.

Im Rahmen der äußeren Variation ließe sich auch eine Einbindung der langreichweitiger Coulomb-WW denken. Hierzu bedürfte es einer hinreichend genauen Formulierung der LRC als Störung der Gutzwiller-Wellenfunktionen.

Anhang A

Daten für $t' = 0$

A.1 $d = 1/n$

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
4	1/4	4	↓↓	-0.08	0.00	-0.00	0.12	0.05	-0.01	0.12
5	1/4	4	↓↓	-0.39	0.00	-0.00	0.16	0.07	-0.02	0.15
6	1/4	4	↓↓	-0.52	0.01	-0.01	0.19	0.07	-0.02	0.18
7	1/4	4	↓↓	-0.36	0.00	-0.00	0.15	0.07	-0.02	0.13
8	1/4	4	↓↓	-0.15	0.00	-0.00	0.13	0.05	-0.01	0.10
9	1/4	4	↓↓	-0.00	0.00	-0.00	0.13	0.05	-0.01	0.10

Tabelle A.1: d= 1/4

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
3	1/5	4	↓○↑	-0.82	0.00	-0.00	0.17	0.00	-0.03	0.17
4	1/5	4	↓○↑	-0.82	0.00	-0.00	0.17	0.00	-0.03	0.17
4	1/5	5	↓↓	-0.82	0.00	-0.00	0.19	0.06	-0.04	0.21
5	1/5	4	↓○↑	-1.98	0.01	-0.02	0.28	0.00	-0.06	0.30
5	1/5	5	↓↓	-1.96	0.02	-0.01	0.30	0.09	-0.05	0.37
6	1/5	4	↓○↑	-2.78	0.01	-0.01	0.32	0.00	-0.12	0.34
6	1/5	5	↓↓	-2.85	0.02	-0.02	0.37	0.10	-0.10	0.47
7	1/5	4	↓○↑	-3.01	0.02	-0.02	0.39	0.00	-0.15	0.43
7	1/5	5	↓↓	-3.03	0.02	-0.02	0.41	0.11	-0.15	0.54
8	1/5	4	↓○↑	-3.01	0.02	-0.02	0.39	0.00	-0.15	0.43
8	1/5	5	↓↓	-2.48	0.02	-0.01	0.38	0.11	-0.11	0.41
9	1/5	4	↓○↑	-1.69	0.02	-0.01	0.37	0.00	-0.11	0.34
9	1/5	5	↓↓	-1.68	0.01	-0.01	0.37	0.09	-0.12	0.37
10	1/5	4	↓○↑	-1.04	0.01	-0.01	0.29	0.00	-0.07	0.23
10	1/5	5	↓↓	-1.05	0.01	-0.01	0.30	0.09	-0.05	0.26

Tabelle A.2: d= 1/5

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
8	1/6	4	↓○↑	-0.40	0.01	-0.01	0.34	0.00	-0.00	0.34
8	1/6	6	↓↓	-7.27	0.06	-0.05	0.77	0.15	-0.88	1.88
8	1/6	6	↓○↑	-2.59	0.03	-0.03	0.58	0.00	-0.44	0.79
10	1/6	6	↓○↑	-1.46	0.02	-0.02	0.44	0.00	0.00	0.41
10	1/6	6	↓↓	-6.38	0.07	-0.06	0.83	0.14	-1.41	2.47
15	1/6	6	↓↓	-1.92	0.07	-0.06	0.89	0.12	-3.63	5.00
18	1/6	6	↓↓	-0.69	0.07	-0.06	0.90	0.12	-5.46	7.00

Tabelle A.3: d= 1/6

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
8	1/7	6	↓↓	-7.95	0.06	-0.05	0.78	0.13	-0.82	1.78
8	1/7	6	↓○↓	-15.59	0.06	-0.06	0.72	0.00	0.00	1.25
8	1/7	7	↓↓	-17.79	0.08	-0.06	0.85	0.14	-1.40	2.47
8	1/7	7	↓○↓	-10.31	0.11	-0.06	0.88	0.00	-1.09	3.00
10	1/7	6	↓↓	-8.29	0.07	-0.06	0.86	0.13	-1.57	2.84
10	1/7	6	↓○↓	-16.79	0.08	-0.06	0.87	0.00	-0.00	2.62
10	1/7	7	↓↑	-17.35	0.09	-0.07	0.90	0.13	-2.01	3.33
10	1/7	7	↓○↓	-7.19	0.12	-0.07	0.90	0.00	-0.91	3.20
15	1/7	6	↓↓	-5.27	0.07	-0.05	0.91	0.12	-4.89	6.46
15	1/7	6	↓○↑	-4.79	0.08	-0.06	0.88	0.00	-1.50	2.57
15	1/7	7	↓↓	-5.70	0.07	-0.05	0.88	0.10	-1.46	3.17

Tabelle A.4: d= 1/7

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
8	1/8	6	↓↓	-9.44	0.06	-0.05	0.83	0.32	-0.98	2.28
8	1/8	7	↓↓	-19.94	0.08	-0.06	0.87	0.20	-1.36	2.56
8	1/8	8	↓↓	-27.23	0.08	-0.08	0.87	0.13	-1.38	2.54
8	1/8	9	↓↓	-21.79	0.10	-0.07	0.90	0.13	-1.95	2.93
8	1/8	8	↓↓	-18.38	0.09	-0.07	0.89	0.12	-1.78	2.89
8	1/8	11	↓↓	-16.00	0.10	-0.07	0.88	0.13	-1.43	2.66
8	1/8	12	↓↓	-15.02	0.11	-0.07	0.92	0.05	-1.42	3.48
8	1/8	6	↓○↑	-19.34	0.07	-0.07	0.86	0.00	-1.21	2.47
8	1/8	7	↓○↑	-26.63	0.10	-0.08	0.94	0.00	-2.36	4.55
8	1/8	8	↓○↑	-20.25	0.08	-0.06	0.84	0.00	-1.43	2.11
8	1/8	9	↓○↑	-17.01	0.10	-0.06	0.86	0.00	-1.00	2.52
8	1/8	10	↓○↑	-14.66	0.12	-0.07	0.92	0.00	-1.36	3.56
8	1/8	10	↓↑	-7.40	0.08	-0.05	0.87	0.04	-1.29	2.76
8	1/8	12	↓↑	-12.51	0.11	-0.06	0.88	0.04	-0.88	2.58

Tabelle A.5: d= 1/8, U= 8eV

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
10	1/8	6	↓↓	-12.40	0.06	-0.06	0.88	0.13	-1.90	3.31
10	1/8	7	↓↓	-20.47	0.11	-0.08	0.93	0.12	-1.94	4.02
10	1/8	8	↓↓	-27.27	0.09	-0.08	0.91	0.12	-2.18	3.51
10	1/8	9	↓↓	-22.79	0.11	-0.07	0.94	0.12	-2.73	4.47
10	1/8	8	↓↓	-17.13	0.11	-0.07	0.93	0.10	-1.47	3.82
10	1/8	11	↓↓	-15.94	0.11	-0.08	0.93	0.00	-1.71	3.76
10	1/8	12	↓↓	-10.90	0.10	-0.17	0.91	0.26	-1.99	2.73
10	1/8	6	↓○↑	-19.59	0.08	-0.07	0.89	0.00	-2.08	3.08
10	1/8	7	↓○↑	-20.97	0.13	-0.11	0.96	0.00	-0.09	6.45
10	1/8	8	↓○↑	-19.88	0.09	-0.07	0.88	0.00	-1.30	2.67
10	1/8	9	↓○↑	-17.23	0.11	-0.10	0.93	0.05	-1.75	3.88
10	1/8	8	↓○↑	-13.01	0.11	-0.10	0.93	0.00	-1.13	3.56
10	1/8	11	↓○↑	-12.33	0.13	-0.15	0.95	0.00	-0.05	5.16
10	1/8	10	↓↑	-10.68	0.10	-0.06	0.93	0.07	-1.85	3.90
10	1/8	12	↓↑	-11.78	0.12	-0.08	0.95	0.02	-1.34	4.24

Tabelle A.6: $d= 1/8, U = 10eV$

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
15	1/8	7	↓↓	-12.34	0.12	-0.07	0.97	0.20	-5.75	6.74
15	1/8	8	↓↓	-17.89	0.08	-0.06	0.93	0.09	-3.69	4.94
15	1/8	9	↓↓	-12.16	0.08	-0.05	0.93	0.05	-2.72	4.44
15	1/8	10	↓↓	-2.58	0.11	-0.10	0.96	0.13	-2.49	5.10
15	1/8	11	↓↓	-1.41	0.11	-0.06	0.94	0.05	-1.14	3.55
15	1/8	6	↓○↑	-14.21	0.08	-0.05	0.94	0.00	-3.97	6.14
15	1/8	7	↓○↑	-11.98	0.10	-0.07	0.93	0.00	-1.71	3.74
15	1/8	8	↓○↑	-2.77	0.12	-0.09	0.97	0.00	-0.02	5.96
15	1/8	10	↓↑	-3.11	0.10	-0.05	0.95	0.12	-2.83	4.48
15	1/8	12	↓↑	-2.24	0.12	-0.09	0.97	0.00	-1.93	5.69

Tabelle A.7: $d= 1/8, U= 15eV$

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
20	1/8	8	↓↓	-14.50	0.07	-0.05	0.93	0.11	-5.37	7.02
25	1/8	8	↓↓	-12.85	0.07	-0.05	0.94	0.07	-7.98	9.81
30	1/8	8	↓↓	-11.39	0.07	-0.05	0.94	0.04	-10.36	12.26

Tabelle A.8: $d= 1/8$

A.1.1 $d=1/10$

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
8	1/10	6	↓↓	-18.50	0.05	-0.04	0.86	0.46	-1.29	2.43
8	1/10	7	↓↓	-28.14	0.07	-0.08	0.89	0.12	-1.64	2.80
8	1/10	8	↓↓	-34.46	0.07	-0.07	0.90	0.27	-1.67	2.87
8	1/10	9	↓↓	-40.13	0.08	-0.09	0.91	0.19	-1.94	3.35
8	1/10	10	↓↓	-44.20	0.09	-0.10	0.92	0.12	-1.93	3.27
8	1/10	11	↓↓	-40.14	0.09	-0.09	0.93	0.07	-2.08	3.88
8	1/10	12	↓↓	-37.52	0.09	-0.08	0.92	0.03	-1.94	3.24
8	1/10	6	↓○↑	-25.47	0.07	-0.06	0.87	0.00	-1.43	2.51
8	1/10	7	↓○↑	-10.46	0.08	-0.07	0.90	0.00	-1.99	2.92
8	1/10	8	↓○↑	-39.31	0.09	-0.10	0.90	0.00	-1.70	2.86
8	1/10	9	↓○↑	-40.39	0.09	-0.11	0.92	0.00	-1.73	3.19
8	1/10	10	↓○↑	-39.49	0.10	-0.09	0.92	0.00	-1.45	3.35
8	1/10	11	↓○↑	-32.73	0.10	-0.11	0.92	0.03	-1.12	3.08
8	1/10	12	↓○↑	-32.71	0.10	-0.09	0.92	0.00	-1.15	3.40
8	1/10	8	↓↑	-19.88	0.06	-0.05	0.88	0.25	-1.39	2.86
8	1/10	10	↓↑	-25.01	0.08	-0.07	0.91	0.14	-1.70	3.11
8	1/10	12	↓↑	-27.36	0.09	-0.07	0.91	0.15	-1.50	2.93

Tabelle A.9: $d= 1/10$, $U = 8\text{eV}$

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
10	1/10	6	↓↓	-18.38	0.05	-0.04	0.90	0.39	-2.06	3.61
10	1/10	7	↓↓	-30.69	0.07	-0.07	0.94	0.10	-2.91	4.46
10	1/10	8	↓↓	-36.41	0.09	-0.09	0.94	0.12	-2.15	4.30
10	1/10	9	↓↓	-40.56	0.09	-0.09	0.95	0.18	-2.51	5.04
10	1/10	10	↓↓	-44.79	0.09	-0.10	0.95	0.13	-3.09	4.38
10	1/10	11	↓↓	-39.66	0.10	-0.11	0.96	0.10	-2.33	5.83
10	1/10	12	↓↓	-36.41	0.10	-0.10	0.95	0.08	-1.70	4.70
10	1/10	6	↓○↑	-28.51	0.07	-0.07	0.92	0.00	-2.37	3.99
10	1/10	7	↓○↑	-15.10	0.09	-0.06	0.94	0.00	-2.24	3.77
10	1/10	8	↓○↑	-40.09	0.09	-0.11	0.95	0.03	-2.49	4.51
10	1/10	9	↓○↑	-38.85	0.10	-0.12	0.95	0.00	-2.37	4.76
10	1/10	10	↓○↑	-39.69	0.09	-0.10	0.94	0.00	-1.99	4.11
10	1/10	11	↓○↑	-33.50	0.10	-0.12	0.95	0.00	-1.42	4.67
10	1/10	12	↓○↑	-32.66	0.10	-0.10	0.96	0.00	-0.88	5.04
10	1/10	8	↓↑	-23.46	0.08	-0.06	0.93	0.26	-1.82	3.59
10	1/10	10	↓↑	-28.13	0.09	-0.08	0.94	0.15	-2.55	4.00
10	1/10	12	↓↑	-29.19	0.10	-0.08	0.96	0.01	-2.15	5.31

Tabelle A.10: d= 1/10, U=10eV

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
15	1/10	6	↓↓	-16.17	0.04	-0.04	0.93	0.40	-4.30	6.16
15	1/10	7	↓↓	-18.81	0.06	-0.04	0.94	0.30	-4.39	5.61
15	1/10	8	↓↓	-22.71	0.08	-0.07	0.96	0.10	-2.90	5.50
15	1/10	9	↓↓	-24.41	0.10	-0.11	0.99	0.11	-1.79	10.62
15	1/10	10	↓↓	-26.54	0.10	-0.12	0.98	0.13	-6.59	7.45
15	1/10	11	↓↓	-26.02	0.10	-0.09	0.98	0.07	-1.96	7.84
15	1/10	12	↓↓	-17.00	0.10	-0.11	0.97	0.11	-1.36	1.99
15	1/10	6	↓○↑	-18.83	0.05	-0.05	0.93	0.00	-2.92	4.42
15	1/10	7	↓○↑	-18.50	0.10	-0.11	0.98	0.05	-3.44	6.51
15	1/10	8	↓○↑	-23.09	0.10	-0.11	0.99	0.00	-3.26	10.03
15	1/10	9	↓○↑	-22.00	0.10	-0.09	0.98	0.00	-1.22	8.84
15	1/10	10	↓○↑	-19.35	0.09	-0.08	0.97	0.00	-1.91	5.89
15	1/10	11	↓○↑	-16.27	0.10	-0.14	0.97	0.00	-1.23	1.92
15	1/10	12	↓○↑	-17.51	0.10	-0.14	0.98	0.00	-3.34	7.96
15	1/10	8	↓↑	-11.88	0.07	-0.05	0.92	0.32	-1.88	3.45
15	1/10	10	↓↑	-11.76	0.08	-0.05	0.93	0.16	-1.28	3.40
15	1/10	12	↓↑	-16.12	0.10	-0.10	0.98	0.09	-2.00	7.52

Tabelle A.11: d= 1/10, U=15eV

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
20	1/10	10	↓↓	-14.17	0.10	-0.11	0.98	0.06	-3.45	6.00
25	1/10	10	↓↓	-11.80	0.10	-0.09	0.99	0.10	-2.97	4.00
30	1/10	10	↓↓	-5.80	0.08	-0.06	0.97	0.03	-0.26	0.94

Tabelle A.12: d= 1/10

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
8	1/12	10	↓↓	-52.77	0.08	-0.10	0.92	0.24	-1.87	3.32
8	1/12	12	↓↓	-58.03	0.09	-0.12	0.92	0.13	-1.18	3.36
10	1/12	10	↓↓	-54.15	0.08	-0.09	0.95	0.22	-2.94	4.40
10	1/12	12	↓↓	-59.40	0.08	-0.13	0.96	0.13	-2.38	4.45
15	1/12	12	↓↓	-36.1	0.08	-0.13	0.98	0.14	-2.41	7.00
20	1/12	12	↓↓	-21.93	0.08	-0.12	0.99	0.09	-2.58	3.00
25	1/12	12	↓↓	-10.30	0.08	-0.13	1.00	0.05	-2.52	4.00
30	1/12	12	↓↓	-8.75	0.08	-0.09	1.00	0.00	-2.49	3.00

Tabelle A.13: d= 1/12

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
10	1/25	23	↓↓	-114.32	0.04	-0.17	0.96	0.13	-2.67	4.40
10	1/25	25	↓↓	-114.99	0.04	-0.18	0.95	0.13	-2.65	4.34
10	1/25	27	↓↓	-114.42	0.04	-0.16	0.96	0.11	-2.27	4.38

Tabelle A.14: d= 1/25

A.2 Übergangsstrukturen

A.2.1 d=7/48

U	d	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
08	7/48	6/8	↓↓	-15.21	0.07	-0.06	0.80	0.02	-0.86	1.85
08	7/48	6	↓↓	-7.83	0.06	-0.05	0.75	0.14	-0.75	1.54
08	7/48	6	↓○↑	-15.19	0.07	-0.07	0.82	0.00	-1.25	2.17
08	7/48	7	↓↓	-15.20	0.09	-0.07	0.85	0.13	-1.32	2.52
08	7/48	7	↓○↑	-9.20	0.09	-0.05	0.81	0.00	-0.92	1.88
08	7/48	8	↓↓	-9.54	0.07	-0.05	0.80	0.10	-1.03	1.92
08	7/48	8	↓○↑	-3.91	0.11	-0.07	0.86	0.00	-0.92	2.47

Tabelle A.15: d= 7/48, U= 8eV

U	Dot	NA	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
10	7/48	6/8	↓↓	-14.63	0.10	-0.08	0.90	0.05	-1.31	3.51
10	7/48	6	↓↓	-7.36	0.06	-0.05	0.85	0.23	-1.55	2.72
10	7/48	6	↓○↑	-14.07	0.09	-0.08	0.88	0.00	-1.88	3.00
10	7/48	7	↓↓	-13.80	0.10	-0.07	0.91	0.14	-1.59	3.72
10	7/48	7	↓○↑	-8.70	0.10	-0.07	0.85	0.00	-1.22	2.37
10	7/48	8	↓↓	-9.12	0.08	-0.06	0.87	0.12	-1.85	2.72
10	7/48	8	↓○↑	-5.07	0.07	-0.04	0.79	0.00	-0.93	1.57

Tabelle A.16: $d = 7/48$, $U = 10eV$

U	Dot	NA	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
15	7/48	6/8	↓↓	-8.48	0.09	-0.06	0.92	0.00	-3.39	5.52
15	7/48	6	↓↓	-4.60	0.07	-0.06	0.90	0.11	-4.03	5.48
15	7/48	6	↓○↑	-3.84	0.10	-0.09	0.94	0.00	-4.09	6.34
15	7/48	7	↓↓	-6.69	0.09	-0.06	0.92	0.10	-3.78	4.88
15	7/48	7	↓○↑	2.60	0.09	-0.05	0.86	0.00	-1.12	1.95
15	7/48	8	↓↓	-1.96	0.09	-0.05	0.90	0.10	-2.33	3.45
15	7/48	8	↓○↑	4.15	0.12	-0.07	0.93	0.00	-1.58	4.02

Tabelle A.17: $d = 7/48$, $U = 15eV$

A.2.2 $d=9/80$

U	Dot	NA	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
8	9/80	8/10	↓↓	-34.11	0.09	-0.09	0.90	0.02	-1.81	3.15
8	9/80	8	↓↓	-28.67	0.09	-0.11	0.90	0.16	-1.75	2.95
8	9/80	8	↓○↑	-34.28	0.10	-0.09	0.90	0.00	-1.73	2.80
8	9/80	9	↓↓	-34.26	0.10	-0.08	0.90	0.13	-1.62	2.85
8	9/80	9	↓○↑	-29.21	0.10	-0.09	0.92	0.00	-1.54	3.91
8	9/80	10	↓↓	-30.04	0.09	-0.08	0.90	0.13	-1.74	2.92
8	9/80	10	↓○↑	-32.63	0.11	-0.08	0.91	0.00	-0.98	3.31

Tabelle A.18: $d = 9/80$, $U = 10eV$

U	Dot	NA	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
10	9/80	8/10	↓↓	-34.68	0.10	-0.09	0.95	0.10	-2.29	4.13
10	9/80	8	↓↓	-27.10	0.09	-0.12	0.93	0.18	-2.38	3.92
10	9/80	8	↓○↑	-32.85	0.10	-0.09	0.93	0.00	-1.80	3.76
10	9/80	9	↓↓	-34.72	0.10	-0.09	0.94	0.12	-2.88	3.97
10	9/80	9	↓○↑	-28.11	0.11	-0.09	0.96	0.00	-1.55	5.21
10	9/80	10	↓↓	-30.07	0.10	-0.09	0.95	0.08	-1.92	4.61
10	9/80	10	↓○↑	-30.28	0.11	-0.09	0.96	0.00	-1.58	5.08

Tabelle A.19: d= 9/80, U= 10eV

U	Dot	NA	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
15	9/80	8/10	↓↓	-20.91	0.11	-0.08	0.98	0.06	-3.70	6.73
15	9/80	8	↓↓	-18.88	0.11	-0.09	0.98	0.14	-4.69	7.66
15	9/80	8	↓○↑	-14.65	0.10	-0.09	0.96	0.00	-1.36	4.72
15	9/80	9	↓↓	-20.89	0.11	-0.08	0.97	0.07	-2.53	7.07
15	9/80	9	↓○↑	-14.02	0.08	-0.06	0.95	0.00	-2.01	5.07
15	9/80	10	↓↓	-19.58	0.10	-0.09	0.98	0.09	-5.82	7.83
15	9/80	10	↓○↑	-20.13	0.11	-0.07	0.97	0.00	-1.84	6.01

Tabelle A.20: d= 9/80, U= 10eV

Anhang B

Daten für $t' \neq 0$

B.1 $U= 8\text{eV}$

B.1.1 $d= 1/10$

t'	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.300	8	↓↓	-38.39	0.07	-0.07	0.88	0.30	-1.53	2.60
-0.300	8	↓○↓	-42.10	0.08	-0.10	0.88	0.00	-1.27	2.53
-0.300	10	↓↓	-47.78	0.09	-0.11	0.90	0.14	-1.79	2.92
-0.300	10	↓○↓	-43.83	0.09	-0.10	0.91	0.00	-1.64	3.07
-0.300	12	↓↓	-41.13	0.08	-0.10	0.89	0.14	-1.68	2.69

Tabelle B.1: $U= 8\text{eV}$, $d= 1/10$, $t'= -0.300\text{eV}$

t'	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.500	8	↓↓	-46.69	0.07	-0.08	0.87	0.34	-1.42	2.56
-0.500	8	↓○↓	-49.65	0.08	-0.10	0.88	0.00	-1.49	2.54
-0.500	10	↓↓	-53.97	0.08	-0.11	0.90	0.17	-1.80	3.01
-0.500	10	↓○↓	-49.17	0.09	-0.12	0.90	0.00	-1.46	2.88
-0.500	12	↓↓	-47.54	0.07	-0.11	0.87	0.16	-1.54	2.52

Tabelle B.2: $U= 8\text{eV}$, $d= 1/10$, $t'= -0.500\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.550	10	↑↑	-56.44	0.09	-0.12	0.90	0.21	-1.63	3.06
-0.550	10	0.600	-21.27	0.07	-0.08	0.90	0.51	-1.56	2.92
-0.550	10	0.700	-46.36	0.06	-0.06	0.87	0.53	-1.43	2.86
-0.550	10	0.800	-54.92	0.06	-0.08	0.86	0.43	-1.37	2.61
-0.550	10	0.900	-54.83	0.08	-0.10	0.89	0.24	-1.58	2.85
-0.550	8	0.625	-29.36	0.00	-0.01	0.74	0.72	-0.08	1.55
-0.550	8	0.750	-51.42	0.02	-0.02	0.78	0.66	-0.44	1.96
-0.550	8	0.875	-51.44	0.05	-0.06	0.84	0.45	-1.11	2.25
-0.550	6	0.667	-40.14	0.04	-0.06	0.83	0.56	-0.98	2.20
-0.550	6	0.833	-53.28	0.05	-0.08	0.81	0.38	-1.02	2.01

Tabelle B.3: $U= 8\text{eV}$, $d= 1/10$, $t' = -0.550\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.575	10	↑↑	-56.85	0.08	-0.11	0.89	0.20	-1.76	2.87
-0.575	10	0.600	-27.21	0.05	-0.07	0.87	0.55	-1.27	2.54
-0.575	10	0.700	-51.06	0.05	-0.07	0.86	0.55	-1.16	2.53
-0.575	10	0.800	-57.66	0.06	-0.07	0.86	0.44	-1.30	2.47
-0.575	10	0.900	-56.73	0.08	-0.10	0.89	0.22	-1.76	2.81
-0.575	8	0.625	-34.96	0.00	-0.00	0.74	0.73	0.00	1.51
-0.575	8	0.750	-55.40	0.02	-0.02	0.77	0.65	-0.39	1.77
-0.575	8	0.875	-27.79	0.07	-0.07	0.88	0.55	-2.00	5.81
-0.575	6	0.667	-45.20	0.03	-0.05	0.81	0.58	-0.79	2.03
-0.575	6	0.833	-55.49	0.05	-0.08	0.85	0.37	-1.32	2.44

Tabelle B.4: $U= 8\text{eV}$, $d= 1/10$, $t' = -0.575\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.750	10	$\uparrow\uparrow$	-46.09	0.08	-0.12	0.88	0.21	-1.37	2.68
-0.750	10	0.600	-55.71	0.05	-0.05	0.83	0.59	-0.91	2.22
-0.750	10	0.700	-67.78	0.04	-0.05	0.81	0.58	-0.97	2.28
-0.750	10	0.800	-58.96	0.04	-0.05	0.82	0.55	-0.88	2.25
-0.750	10	0.900	-53.84	0.08	-0.07	0.87	0.47	-1.33	2.59
-0.750	8	0.625	-61.57	0.01	-0.01	0.74	0.71	-0.13	1.65
-0.750	8	0.750	-66.29	0.01	-0.00	0.72	0.71	0.00	1.58
-0.750	8	0.875	-50.28	0.06	-0.07	0.84	0.50	-1.00	2.23
-0.750	6	0.667	-67.38	0.01	-0.01	0.75	0.70	-0.28	1.88
-0.750	6	0.750	-65.75	0.01	-0.02	0.74	0.63	-0.35	1.74
-0.750	6	0.833	-52.81	0.02	-0.04	0.77	0.56	-0.61	1.85

Tabelle B.5: $U=8\text{eV}$, $d=1/10$, $t'=-0.750\text{eV}$ **B.1.2 $d=1/8$**

t'	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.300	6	$\downarrow\downarrow$	-13.21	0.04	-0.04	0.76	0.35	-0.77	1.58
-0.300	6	$\downarrow\downarrow$	-21.59	0.06	-0.08	0.81	0.00	-1.08	2.01
-0.300	8	$\downarrow\downarrow$	-29.83	0.08	-0.08	0.85	0.15	-1.29	2.32
-0.300	8	$\downarrow\downarrow$	-22.49	0.08	-0.08	0.85	0.00	-1.39	2.49
-0.300	10	$\downarrow\downarrow$	-21.63	0.07	-0.08	0.83	0.11	-1.26	2.15
-0.300	10	$\downarrow\downarrow$	-17.68	0.08	-0.08	0.83	0.00	-1.17	1.98

Tabelle B.6: $U=8\text{eV}$, $d=1/8$, $t'=-0.300\text{eV}$

t'	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.500	6	$\downarrow\downarrow$	-22.53	0.05	-0.05	0.76	0.37	-0.71	1.63
-0.500	6	$\downarrow\downarrow$	-28.31	0.06	-0.07	0.80	0.00	-1.09	1.95
-0.500	8	$\downarrow\downarrow$	-35.76	0.08	-0.09	0.84	0.17	-1.34	2.32
-0.500	8	$\downarrow\downarrow$	-30.31	0.07	-0.09	0.79	0.00	-0.99	1.74
-0.500	10	$\downarrow\downarrow$	-27.17	0.07	-0.08	0.83	0.13	-1.26	2.19
-0.500	10	$\downarrow\downarrow$	-22.15	0.08	-0.08	0.82	0.00	-1.08	1.90

Tabelle B.7: $U=8\text{eV}$, $d=1/8$, $t'=-0.500\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.600	8	$\uparrow\uparrow$	-41.27	0.08	-0.09	0.84	0.19	-1.28	2.30
-0.600	10	0.600	-9.59	0.05	-0.07	0.81	0.52	-0.84	2.06
-0.600	10	0.700	-35.36	0.02	-0.03	0.72	0.56	-0.47	1.55
-0.600	10	0.800	-39.73	0.03	-0.03	0.72	0.50	-0.48	1.52
-0.600	10	0.900	-31.25	0.08	-0.08	0.83	0.17	-1.17	2.14
-0.600	8	0.600	-19.03	0.02	-0.03	0.74	0.60	-0.40	1.54
-0.600	8	0.750	-39.59	0.03	-0.03	0.74	0.56	-0.46	1.63
-0.600	8	0.875	-38.75	0.07	-0.08	0.83	0.24	-1.22	2.26
-0.600	6	0.667	-29.93	0.00	-0.01	0.67	0.66	-0.01	1.28
-0.600	6	0.750	-40.18	0.00	-0.00	0.65	0.63	-0.05	1.19
-0.600	6	0.833	-38.06	0.01	-0.01	0.64	0.59	-0.09	1.13

Tabelle B.8: $U= 8\text{eV}$, $d= 1/8$, $t'=-0.600\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.625	8	$\uparrow\uparrow$	-42.69	0.08	-0.10	0.85	0.19	-1.36	2.38
-0.625	10	0.600	-15.50	0.04	-0.05	0.80	0.53	-0.89	2.10
-0.625	10	0.700	-40.14	0.01	-0.02	0.69	0.60	-0.21	1.41
-0.625	10	0.800	-42.21	0.04	-0.05	0.74	0.44	-0.59	1.57
-0.625	10	0.900	-31.36	0.05	-0.04	0.75	0.40	-0.64	1.59
-0.625	8	0.625	-24.75	0.02	-0.02	0.72	0.63	0.00	1.45
-0.625	8	0.750	-43.89	0.03	-0.03	0.72	0.57	-0.38	1.47
-0.625	8	0.875	-39.19	0.07	-0.07	0.82	0.29	-1.09	2.17
-0.625	6	0.667	-35.05	0.01	-0.01	0.68	0.64	0.00	1.34
-0.625	6	0.750	-43.80	0.00	-0.00	0.65	0.64	0.00	1.20
-0.625	6	0.833	-40.18	0.00	-0.00	0.62	0.61	0.00	1.05

Tabelle B.9: $U= 8\text{eV}$, $d= 1/8$, $t'=-0.625\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.750	10	$\uparrow\uparrow$	-35.37	0.08	-0.10	0.84	0.21	-1.36	2.43
-0.750	10	0.600	-36.81	0.01	-0.01	0.69	0.65	-0.14	1.45
-0.750	10	0.700	-53.00	0.01	-0.01	0.68	0.65	-0.12	1.43
-0.750	10	0.800	-43.68	0.02	-0.02	0.70	0.57	-0.32	1.53
-0.750	10	0.900	-34.98	0.09	-0.06	0.84	0.38	-1.26	2.32
-0.750	8	0.625	-44.14	0.01	-0.01	0.68	0.65	0.00	1.36
-0.750	8	0.750	-50.40	0.03	-0.03	0.73	0.56	-0.46	1.63
-0.750	8	0.875	-38.03	0.07	-0.08	0.81	0.36	-1.03	2.00
-0.750	6	0.667	-50.99	0.00	-0.00	0.67	0.66	-0.01	1.34
-0.750	6	0.750	-50.92	0.00	-0.00	0.66	0.66	0.00	1.32
-0.750	6	0.833	-38.16	0.00	-0.00	0.64	0.62	0.00	1.21

Tabelle B.10: $U=8\text{eV}$, $d=1/8$, $t'=-0.750\text{eV}$ **B.1.3 $d=1/6$**

t'	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.300	6	$\downarrow\downarrow$	-10.46	0.04	-0.04	0.62	0.14	-0.49	1.00
-0.300	6	$\downarrow\circ\downarrow$	-5.50	0.03	-0.03	0.53	0.00	-0.35	0.70
-0.300	8	$\downarrow\downarrow$	-1.21	0.03	-0.03	0.51	0.10	-0.29	0.67
-0.300	8	$\downarrow\circ\downarrow$	-2.04	0.03	-0.02	0.45	0.00	-0.16	0.54

Tabelle B.11: $U=8\text{eV}$, $d=1/6$, $t'=-0.300\text{eV}$

t'	n	K	$\Delta E/\text{Site}$	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.500	6	$\downarrow\downarrow$	-15.02	0.05	-0.05	0.65	0.15	-0.56	1.18
-0.500	6	$\downarrow\circ\downarrow$	-9.44	0.04	-0.05	0.60	0.00	-0.45	0.95
-0.500	8	$\downarrow\downarrow$	-3.83	0.04	-0.04	0.57	0.09	-0.41	0.87
-0.500	8	$\downarrow\circ\downarrow$	-2.46	0.03	-0.04	0.56	0.00	-0.40	0.93

Tabelle B.12: $U=8\text{eV}$, $d=1/6$, $t'=-0.500\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.625	6	$\uparrow\uparrow$	-20.02	0.06	-0.06	0.69	0.18	-0.64	1.37
-0.625	8	0.625	-8.71	0.01	-0.01	0.44	0.35	-0.09	0.60
-0.625	8	0.750	-19.52	0.01	-0.01	0.54	0.47	-0.12	0.85
-0.625	8	0.875	-9.75	0.01	-0.01	0.48	0.38	-0.00	0.70
-0.625	6	0.667	-9.37	0.01	-0.01	0.58	0.51	-0.13	0.98
-0.625	6	0.750	-19.92	0.01	-0.01	0.55	0.46	-0.16	0.88
-0.625	6	0.833	-18.69	0.05	-0.05	0.65	0.22	-0.52	1.17

Tabelle B.13: $U= 8\text{eV}$, $d= 1/6$, $t'=-0.625\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.650	6	$\uparrow\uparrow$	-20.89	0.06	-0.06	0.70	0.17	-0.71	1.51
-0.650	8	0.625	-2.59	0.00	-0.00	0.57	0.56	-0.03	0.94
-0.650	8	0.750	-22.13	0.01	-0.01	0.56	0.52	-0.03	1.01
-0.650	8	0.875	-10.02	0.05	-0.04	0.63	0.22	-0.44	1.07
-0.650	6	0.667	-13.65	0.01	-0.00	0.57	0.54	0.00	0.98
-0.650	6	0.750	-22.51	0.03	-0.02	0.61	0.43	0.00	1.09
-0.650	6	0.833	-18.67	0.03	-0.04	0.60	0.30	-0.35	1.02

Tabelle B.14: $U= 8\text{eV}$, $d= 1/6$, $t' = -0.650\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.675	8	$\uparrow\uparrow$	-21.11	0.06	-0.07	0.74	0.18	-0.97	1.79
-0.675	8	0.675	-7.84	0.01	-0.00	0.57	0.56	-0.01	0.92
-0.675	8	0.750	-24.78	0.01	-0.01	0.56	0.48	-0.06	1.08
-0.675	8	0.875	-11.11	0.03	-0.02	0.56	0.33	-0.23	0.92
-0.675	6	0.667	-18.22	0.01	-0.01	0.61	0.53	0.00	1.13
-0.675	6	0.750	-25.63	0.01	-0.01	0.57	0.49	-0.16	0.99
-0.675	6	0.833	-20.51	0.04	-0.04	0.63	0.30	-0.39	1.11

Tabelle B.15: $U= 8\text{eV}$, $d= 1/6$, $t' = -0.675\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.750	6	-	-22.68	0.06	-0.06	0.70	0.20	-0.67	1.43
-0.750	8	0.625	-20.91	0.00	-0.00	0.57	0.56	0.00	1.01
-0.750	8	0.75	-31.05	0.01	-0.01	0.57	0.50	-0.09	1.02
-0.750	8	0.875	-11.63	0.03	-0.04	0.56	0.26	-0.32	0.89
-0.750	6	0.667	-29.35	0.01	-0.01	0.58	0.53	-0.10	1.02
-0.750	6	0.750	-31.21	0.00	-0.00	0.54	0.53	-0.01	0.91
-0.750	6	0.833	-19.80	0.03	-0.03	0.60	0.35	0.00	1.02

Tabelle B.16: $U= 8\text{eV}$, $d= 1/6$, $t' = -0.750\text{eV}$

B.2 $U = 10\text{eV}$

B.2.1 $d= 1/10$

t'	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.300	8	$\downarrow\downarrow$	-41.86	0.08	-0.08	0.92	0.31	-2.35	3.75
-0.300	8	$\downarrow\circ\downarrow$	-44.91	0.09	-0.11	0.93	0.00	-2.13	3.60
-0.300	10	$\downarrow\downarrow$	-50.63	0.09	-0.11	0.95	0.14	-2.94	4.33
-0.300	10	$\downarrow\circ\downarrow$	-43.83	0.09	-0.10	0.94	0.00	-2.02	3.99
-0.300	12	$\downarrow\downarrow$	-43.08	0.10	-0.10	0.95	0.09	-1.95	4.69
-0.300	12	$\downarrow\circ\downarrow$	-39.91	0.10	-0.11	0.95	0.00	-1.52	3.94

Tabelle B.17: $U=10\text{eV}$, $d=1/10$, $t'=-0.300\text{eV}$

t'	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.500	8	$\downarrow\downarrow$	-51.12	0.07	-0.08	0.92	0.34	-2.33	3.86
-0.500	8	$\downarrow\circ\downarrow$	-54.18	0.09	-0.12	0.93	0.00	-2.18	3.67
-0.500	10	$\downarrow\downarrow$	-58.21	0.09	-0.12	0.94	0.16	-2.57	4.23
-0.500	10	$\downarrow\circ\downarrow$	-52.04	0.10	-0.15	0.95	0.00	-1.83	4.13
-0.500	12	$\downarrow\downarrow$	-51.60	0.09	-0.13	0.93	0.13	-2.44	3.81
-0.500	12	$\downarrow\circ\downarrow$	-44.93	0.10	-0.14	0.94	0.00	-1.64	4.04

Tabelle B.18: $U=10\text{eV}$, $d=1/10$, $t'=-0.500\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.550	10	$\uparrow\uparrow$	-60.87	0.09	-0.12	0.94	0.17	-2.51	4.38
-0.550	10	0.600	-82.43	0.06	-0.09	0.89	0.50	-1.63	2.91
-0.550	10	0.700	-52.66	0.07	-0.11	0.92	0.41	-2.24	3.60
-0.550	10	0.800	-59.43	0.08	-0.11	0.93	0.35	-2.46	4.12
-0.550	10	0.900	-60.81	0.09	-0.12	0.94	0.19	-2.80	4.29
-0.550	8	0.625	-36.44	0.05	-0.06	0.88	0.60	-1.43	2.95
-0.550	8	0.750	-55.01	0.04	-0.05	0.86	0.60	-1.27	2.81
-0.550	8	0.875	-55.22	0.06	-0.08	0.90	0.42	-2.14	3.59
-0.550	6	0.667	-46.65	0.06	-0.09	0.91	0.47	-2.05	3.39
-0.550	6	0.750	-56.01	0.06	-0.09	0.90	0.43	-2.02	3.44
-0.550	6	0.833	-55.84	0.06	-0.07	0.87	0.49	-1.49	2.72

Tabelle B.19: $U=10\text{eV}$, $d=1/10$, $t' = -0.550\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.575	10	$\uparrow\uparrow$	-62.18	0.09	-0.13	0.93	0.19	-2.59	3.84
-0.575	10	0.600	-37.44	0.08	-0.11	0.94	0.47	-2.45	4.04
-0.575	10	0.700	-56.38	0.06	-0.07	0.89	0.55	-1.64	3.18
-0.575	10	0.800	-63.02	0.07	-0.09	0.91	0.44	-2.13	3.46
-0.575	10	0.900	-62.14	0.09	-0.12	0.94	0.16	-2.53	4.06
-0.575	8	0.625	-41.60	0.04	-0.05	0.88	0.62	-1.33	2.92
-0.575	8	0.750	-58.53	0.05	-0.05	0.87	0.56	-1.42	2.91
-0.575	8	0.875	-57.49	0.07	-0.08	0.91	0.40	-2.10	3.49
-0.575	6	0.667	-51.28	0.06	-0.08	0.90	0.51	-1.88	3.27
-0.575	6	0.750	-59.40	0.06	-0.09	0.89	0.48	-1.80	3.23
-0.575	6	0.833	-58.92	0.06	-0.10	0.90	0.37	-2.00	3.24

Tabelle B.20: $U=10\text{eV}$, $d=1/10$, $t' = -0.575\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.750	10	$\uparrow\uparrow$	-57.33	0.09	-0.13	0.94	0.24	-2.32	4.11
-0.750	10	0.600	-66.33	0.07	-0.09	0.91	0.53	-1.93	3.53
-0.750	10	0.700	-76.41	0.05	-0.07	0.89	0.57	-1.65	3.32
-0.750	10	0.800	-67.78	0.06	-0.07	0.89	0.54	-1.71	3.28
-0.750	10	0.900	-58.23	0.08	-0.12	0.93	0.33	-2.43	3.89
-0.750	8	0.625	-70.05	0.00	-0.00	0.76	0.75	-0.08	1.87
-0.750	8	0.750	-73.09	0.02	-0.02	0.81	0.67	-0.66	2.29
-0.750	8	0.875	-60.05	0.07	-0.07	0.90	0.53	-1.80	3.42
-0.750	6	0.667	-75.17	0.04	-0.06	0.85	0.61	-1.17	2.72
-0.750	6	0.750	-73.03	0.04	-0.06	0.85	0.56	-1.29	2.81
-0.750	6	0.833	-61.21	0.05	-0.09	0.87	0.43	-1.71	3.02

Tabelle B.21: $U=10\text{eV}$, $d=1/10$, $t' = -0.750\text{eV}$ **B.2.2 $d = 1/8$**

t'	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.300	6	$\downarrow\downarrow$	-15.57	0.06	-0.05	0.85	0.35	-1.39	2.57
-0.300	6	$\downarrow\downarrow$	-22.71	0.09	-0.09	0.90	0.00	-1.96	3.52
-0.300	8	$\downarrow\downarrow$	-31.28	0.09	-0.09	0.90	0.16	-1.98	3.15
-0.300	8	$\downarrow\downarrow$	-25.32	0.09	-0.11	0.90	0.00	-2.33	3.31
-0.300	10	$\downarrow\downarrow$	-23.21	0.09	-0.08	0.89	0.11	-1.75	2.84
-0.300	10	$\downarrow\downarrow$	-18.60	0.11	-0.07	0.91	0.00	-1.33	3.31

Tabelle B.22: $U = 10\text{eV}$, $d = 1/8$, $t' = -0.300\text{eV}$

t'	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.500	6	$\downarrow\downarrow$	-25.20	0.06	-0.06	0.87	0.40	-1.67	3.12
-0.500	6	$\downarrow\downarrow$	-31.44	0.08	-0.09	0.88	0.00	-1.77	3.06
-0.500	8	$\downarrow\downarrow$	-38.53	0.09	-0.10	0.90	0.17	-1.96	3.13
-0.500	8	$\downarrow\downarrow$	-33.31	0.08	-0.10	0.89	0.00	-2.20	3.26
-0.500	10	$\downarrow\downarrow$	-29.81	0.09	-0.09	0.89	0.12	-1.81	3.01
-0.500	10	$\downarrow\downarrow$	-25.34	0.10	-0.11	0.91	0.00	-1.93	3.50

Tabelle B.23: $U = 10\text{eV}$, $d = 1/8$, $t' = -0.500\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.650	10	$\uparrow\uparrow$	-49.00	0.08	-0.11	0.89	0.23	-2.02	3.10
-0.650	10	0.600	-27.97	0.06	-0.06	0.86	0.53	-1.34	2.79
-0.650	10	0.700	-46.24	0.05	-0.06	0.84	0.50	-1.42	2.76
-0.650	10	0.800	-45.94	0.05	-0.06	0.84	0.45	-1.33	2.64
-0.650	10	0.900	-33.92	0.09	-0.09	0.90	0.03	-1.76	3.12
-0.650	8	0.625	-35.73	0.06	-0.07	0.85	0.51	-1.34	2.63
-0.650	8	0.750	-48.97	0.06	-0.06	0.84	0.49	-1.29	2.61
-0.650	8	0.875	-45.57	0.09	-0.11	0.90	0.21	-2.20	3.59
-0.650	6	0.667	-42.85	0.01	-0.01	0.72	0.67	-0.16	1.50
-0.650	6	0.650	-48.30	0.00	-0.00	0.68	0.68	-0.01	1.33
-0.650	6	0.833	-42.34	0.01	-0.00	0.67	0.63	-0.10	1.23

Tabelle B.24: $U = 10\text{eV}$, $d = 1/8$, $t' = -0.650\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.675	10	$\uparrow\uparrow$	-49.53	0.09	-0.11	0.89	0.22	-2.09	3.22
-0.675	10	0.600	-32.40	0.06	-0.07	0.87	0.49	-1.61	2.99
-0.675	10	0.700	-49.49	0.05	-0.05	0.84	0.53	-1.37	2.83
-0.675	10	0.800	-47.07	0.06	-0.08	0.85	0.38	-1.43	2.71
-0.675	10	0.900	-39.75	0.10	-0.09	0.91	0.30	-2.09	3.39
-0.675	8	0.625	-40.09	0.06	-0.07	0.85	0.51	-1.31	2.63
-0.675	8	0.750	-51.61	0.06	-0.07	0.85	0.48	-1.28	2.63
-0.675	8	0.875	-46.37	0.09	-0.10	0.89	0.22	-1.91	3.27
-0.675	6	0.667	-46.39	0.01	-0.01	0.70	0.69	0.00	1.40
-0.675	6	0.750	-50.82	0.00	-0.00	0.68	0.68	-0.02	1.35
-0.675	6	0.833	-43.32	0.00	-0.00	0.66	0.64	0.00	1.16

Tabelle B.25: $U = 10\text{eV}$, $d = 1/8$, $t' = -0.675\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.750	10	$\uparrow\uparrow$	-46.62	0.08	-0.11	0.89	0.26	-2.11	3.39
-0.750	10	0.600	-43.24	0.06	-0.06	0.86	0.52	-1.34	2.80
-0.750	10	0.700	-57.15	0.03	-0.03	0.76	0.61	-0.52	1.89
-0.750	10	0.800	-47.98	0.04	-0.05	0.82	0.53	-1.07	2.50
-0.750	10	0.900	-36.23	0.10	-0.08	0.90	0.24	-1.89	3.31
-0.750	8	0.625	-50.35	0.05	-0.05	0.82	0.55	-1.02	2.36
-0.750	8	0.750	-55.10	0.04	-0.05	0.82	0.54	-1.07	2.51
-0.750	8	0.875	-45.26	0.08	-0.09	0.88	0.33	-1.82	3.06

Tabelle B.26: $U = 10\text{eV}$, $d = 1/8$, $t' = -0.750\text{eV}$

B.2.3 $d = 1/6$

t'	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.300	6	↓↓	-7.85	0.07	-0.06	0.77	0.14	-1.03	1.80
-0.300	6	↓○↓	-2.09	0.07	-0.07	0.77	0.00	-1.00	1.87
-0.300	8	↓↓	-0.79	0.03	-0.03	0.50	0.08	-0.29	0.58
-0.300	8	↓○↓	-1.21	0.02	-0.02	0.40	0.00	-0.19	0.48

Tabelle B.27: $U = 10\text{eV}$, $d = 1/6$, $t' = -0.300\text{eV}$

t'	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.500	6	↓↓	-14.87	0.06	-0.06	0.72	0.16	-0.77	1.42
-0.500	6	↓○↓	-7.75	0.06	-0.07	0.77	0.00	-1.10	1.89
-0.500	8	↓↓	-4.47	0.05	-0.05	0.68	0.07	-0.67	1.22
-0.500	8	↓○↓	-1.82	0.03	-0.06	0.67	0.00	-0.76	1.26

Tabelle B.28: $U = 10\text{eV}$, $d = 1/6$, $t' = -0.500\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.700	6	↑↑	-29.24	0.07	-0.07	0.77	0.22	-1.08	1.91
-0.700	6	0.667	-24.54	0.01	-0.01	0.60	0.54	-0.12	1.01
-0.700	6	0.700	-28.75	0.03	-0.02	0.64	0.47	0.00	1.17
-0.700	6	0.833	-24.85	0.06	-0.07	0.74	0.22	-0.84	1.61
-0.700	8	0.625	-15.89	0.01	-0.01	0.61	0.56	-0.01	1.05
-0.700	8	0.750	-28.10	0.01	-0.01	0.61	0.51	-0.22	1.14
-0.700	8	0.875	-13.17	0.06	-0.06	0.71	0.15	-0.75	1.42

Tabelle B.29: $U = 10\text{eV}$, $d = 1/6$, $t' = -0.700\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.725	6	↑↑	-29.75	0.06	-0.07	0.76	0.24	-1.04	1.81
-0.725	6	0.667	-28.00	0.01	-0.02	0.63	0.53	-0.25	1.18
-0.725	6	0.725	-30.66	0.02	-0.02	0.63	0.47	-0.28	1.12
-0.725	6	0.833	-23.78	0.06	-0.06	0.71	0.25	-0.67	1.46
-0.725	8	0.625	-20.04	0.01	-0.00	0.61	0.58	-0.03	1.12
-0.725	8	0.750	-30.68	0.01	-0.01	0.59	0.53	-0.13	1.02
-0.725	8	0.875	-271.36	0.62	-0.43	0.55	0.02	-0.41	0.54

Tabelle B.30: $U = 10\text{eV}$, $d = 1/6$, $t' = -0.700\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.750	6	$\uparrow\uparrow$	-29.63	0.07	-0.07	0.77	0.23	-0.97	1.87
-0.750	6	0.667	-31.13	0.02	-0.02	0.64	0.50	-0.29	1.18
-0.750	6	0.750	-32.20	0.01	-0.01	0.61	0.52	0.00	1.08
-0.750	6	0.833	-21.05	0.04	-0.04	0.65	0.35	-0.45	1.17
-0.750	8	0.625	-23.79	0.00	-0.00	0.60	0.57	-0.04	1.10
-0.750	8	0.750	-31.21	0.02	-0.01	0.66	0.50	-0.37	1.40
-0.750	8	0.875	-12.89	0.05	-0.05	0.67	0.18	-0.55	1.17

Tabelle B.31: $U=10\text{eV}$, $d=1/6$, $t'=-0.750\text{eV}$

B.3 $U = 15\text{eV}$

B.3.1 $d=1/10$

t'	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.300	8	$\downarrow\downarrow$	-29.10	0.09	-0.10	0.97	0.11	-4.76	7.02
-0.300	8	$\downarrow\circ\downarrow$	-21.12	0.09	-0.08	0.96	0.00	-0.80	4.74
-0.300	10	$\downarrow\downarrow$	-33.20	0.10	-0.13	0.98	0.14	-5.67	7.22
-0.300	10	$\downarrow\circ\downarrow$	-27.04	0.10	-0.13	0.98	0.00	-3.08	6.85
-0.300	12	$\downarrow\downarrow$	-29.46	0.10	-0.12	0.98	0.10	-3.14	7.45
-0.300	12	$\downarrow\circ\downarrow$	-22.39	0.10	-0.13	0.98	0.00	-1.59	8.26

Tabelle B.32: $U=15\text{eV}$, $d=1/10$, $t'=-0.300\text{eV}$

t'	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.500	8	$\downarrow\downarrow$	-36.42	0.09	-0.10	0.97	0.12	-4.92	6.64
-0.500	8	$\downarrow\circ\downarrow$	-36.37	0.09	-0.13	0.95	0.00	-3.09	4.93
-0.500	10	$\downarrow\downarrow$	-41.64	0.09	-0.13	0.97	0.13	-5.35	6.90
-0.500	10	$\downarrow\circ\downarrow$	-34.64	0.10	-0.16	0.98	0.00	-2.49	7.12
-0.500	12	$\downarrow\downarrow$	-26.69	0.08	-0.11	0.91	0.14	-1.59	2.43
-0.500	12	$\downarrow\circ\downarrow$	-30.91	0.10	-0.15	0.98	0.00	-2.50	6.79

Tabelle B.33: $U=15\text{eV}$, $d=1/10$, $t'=-0.500\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.625	10	$\uparrow\uparrow$	-50.97	0.09	-0.14	0.97	0.20	-5.73	7.21
-0.625	10	0.600	-34.31	0.10	-0.15	0.98	0.31	-3.14	7.08
-0.625	10	0.700	-42.64	0.07	-0.09	0.93	0.42	-2.26	3.59
-0.625	10	0.800	-48.39	0.09	-0.11	0.97	0.27	-4.56	7.01
-0.625	10	0.900	-48.01	0.09	-0.14	0.97	0.15	-4.70	7.01
-0.625	8	0.625	-36.08	0.06	-0.08	0.94	0.48	-4.18	6.22
-0.625	8	0.750	-45.81	0.07	-0.08	0.95	0.46	-4.22	5.98
-0.625	8	0.875	-43.32	0.08	-0.09	0.96	0.36	-5.16	6.72
-0.625	6	0.667	-42.97	0.08	-0.12	0.96	0.31	-5.36	7.09
-0.625	6	0.750	-46.36	0.07	-0.11	0.95	0.37	-4.15	5.64
-0.625	6	0.833	-41.61	0.08	-0.08	0.96	0.42	-4.58	6.45

Tabelle B.34: $U = 15\text{eV}$, $d = 1/10$, $t' = -0.625\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.650	10	$\uparrow\uparrow$	-48.53	0.10	-0.14	0.97	0.16	-4.42	7.06
-0.650	10	0.600	-40.05	0.09	-0.13	0.97	0.30	-4.61	6.85
-0.650	10	0.700	-50.24	0.09	-0.12	0.97	0.33	-4.55	6.46
-0.650	10	0.800	-50.59	0.09	-0.13	0.97	0.19	-5.09	6.63
-0.650	10	0.900	-48.95	0.09	-0.13	0.97	0.17	-5.05	6.61
-0.650	8	0.625	-40.04	0.07	-0.09	0.95	0.50	-4.47	6.38
-0.650	8	0.750	-47.65	0.07	-0.08	0.94	0.47	-3.92	5.84
-0.650	8	0.875	-43.80	0.08	-0.09	0.95	0.36	-3.82	5.41
-0.650	6	0.667	-46.21	0.08	-0.13	0.96	0.31	-4.98	6.67
-0.650	6	0.650	-47.34	0.07	-0.10	0.95	0.41	-3.97	5.87
-0.650	6	0.833	-41.10	0.10	-0.12	0.98	0.27	-2.48	7.80

Tabelle B.35: $U = 15\text{eV}$, $d = 1/10$, $t' = -0.650\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.750	10	$\uparrow\uparrow$	-46.67	0.09	-0.14	0.97	0.17	-4.99	6.51
-0.750	10	0.600	-51.46	0.08	-0.12	0.96	0.41	-4.25	5.89
-0.750	10	0.700	-57.18	0.08	-0.12	0.96	0.39	-4.36	5.98
-0.750	10	0.800	-51.61	0.09	-0.14	0.96	0.21	-4.44	6.28
-0.750	10	0.900	-51.40	0.09	-0.12	0.97	0.34	-4.59	6.44
-0.750	8	0.625	-51.34	0.06	-0.07	0.93	0.57	-3.76	5.79
-0.750	8	0.750	-51.81	0.06	-0.07	0.93	0.53	-2.95	4.87
-0.750	8	0.875	-46.34	0.08	-0.08	0.95	0.48	-4.24	6.53
-0.750	6	0.667	-55.49	0.08	-0.12	0.96	0.39	-4.43	6.25
-0.750	6	0.750	-53.59	0.07	-0.11	0.95	0.38	-4.19	5.86
-0.750	6	0.833	-45.33	0.07	-0.11	0.95	0.38	-4.06	5.85

Tabelle B.36: $U = 15\text{eV}$, $d = 1/10$, $t' = 0.750\text{eV}$ **B.3.2 $d=1/8$**

t'	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.300	6	$\downarrow\downarrow$	-3.35	0.05	-0.05	0.84	0.10	-1.01	1.89
-0.300	6	$\downarrow\downarrow$	-14.22	0.08	-0.08	0.93	0.00	-3.82	5.12
-0.300	8	$\downarrow\downarrow$	-18.96	0.11	-0.09	0.96	0.13	-3.54	5.78
-0.300	8	$\downarrow\downarrow$	-8.39	0.11	-0.11	0.95	0.00	-2.47	4.67
-0.300	10	$\downarrow\downarrow$	-11.20	0.10	-0.07	0.93	0.12	-1.60	3.54
-0.300	10	$\downarrow\downarrow$	-5.41	0.11	-0.08	0.93	0.00	-0.89	2.95

Tabelle B.37: $U = 8\text{eV}$, $d = 1/8$, $t' = -0.300\text{eV}$

t'	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.500	6	$\downarrow\downarrow$	-14.23	0.05	-0.05	0.88	0.35	-2.20	3.50
-0.500	6	$\downarrow\downarrow$	-16.31	0.07	-0.07	0.85	0.00	-1.23	1.96
-0.500	8	$\downarrow\downarrow$	-26.66	0.09	-0.10	0.94	0.11	-3.37	5.00
-0.500	8	$\downarrow\downarrow$	-20.16	0.10	-0.11	0.94	0.00	-2.39	4.15
-0.500	10	$\downarrow\downarrow$	-19.30	0.09	-0.08	0.93	0.07	-2.63	4.10
-0.500	10	$\downarrow\downarrow$	-12.55	0.08	-0.10	0.88	0.00	-1.50	2.23

Tabelle B.38: $U = 8\text{eV}$, $d = 1/8$, $t' = -0.500\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.675	10	$\uparrow\uparrow$	-38.25	0.09	-0.11	0.93	0.25	-3.46	4.66
-0.675	10	0.600	-19.33	0.08	-0.08	0.90	0.48	-1.93	3.37
-0.675	10	0.700	-32.79	0.08	-0.10	0.93	0.33	-3.20	4.75
-0.675	10	0.800	-31.52	0.08	-0.07	0.91	0.37	-2.45	3.99
-0.675	10	0.900	-27.32	0.10	-0.11	0.95	0.10	-3.91	5.60
-0.675	8	0.625	-28.77	0.08	-0.10	0.94	0.38	-3.93	5.89
-0.675	8	0.750	-35.41	0.08	-0.09	0.92	0.34	-2.71	4.30
-0.675	8	0.875	-32.78	0.10	-0.11	0.93	0.16	-2.76	4.12
-0.675	6	0.667	-26.66	0.05	-0.05	0.88	0.52	-2.28	3.92
-0.675	6	0.675	-29.00	0.06	-0.06	0.90	0.41	-2.70	4.50
-0.675	6	0.833	-30.25	0.04	-0.05	0.86	0.51	-1.72	3.25

Tabelle B.39: $U=15\text{eV}$, $d=1/8$, $t' = -0.675\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.700	10	$\uparrow\uparrow$	-29.54	0.10	-0.12	0.93	0.21	-2.90	4.04
-0.700	10	0.600	-24.08	0.08	-0.10	0.93	0.39	-2.90	4.54
-0.700	10	0.700	-34.54	0.07	-0.09	0.91	0.38	-2.99	4.53
-0.700	10	0.800	-30.94	0.07	-0.09	0.90	0.27	-2.17	3.53
-0.700	10	0.900	-26.84	0.11	-0.09	0.95	0.24	-3.33	5.42
-0.700	8	0.625	-31.87	0.08	-0.10	0.94	0.37	-4.19	6.05
-0.700	8	0.750	-35.90	0.07	-0.07	0.90	0.43	-2.15	3.78
-0.700	8	0.875	-34.01	0.10	-0.12	0.95	0.17	-3.98	5.59
-0.700	6	0.667	-30.85	0.05	-0.05	0.90	0.54	-3.56	5.58
-0.700	6	0.675	-26.76	0.04	-0.05	0.84	0.47	-1.32	2.62
-0.700	6	0.833	-33.05	0.05	-0.05	0.89	0.52	-2.80	4.79

Tabelle B.40: $U=15\text{eV}$, $d=1/8$, $t' = -0.700\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.750	10	$\uparrow\uparrow$	-37.04	0.09	-0.13	0.93	0.29	-3.29	4.37
-0.750	10	0.600	-30.68	0.08	-0.09	0.93	0.40	-3.49	5.10
-0.750	10	0.700	-37.55	0.06	-0.07	0.89	0.48	-2.07	3.40
-0.750	10	0.800	-31.35	0.08	-0.10	0.90	0.28	-2.15	3.53
-0.750	10	0.900	-25.34	0.09	-0.09	0.92	0.21	-2.82	4.31
-0.750	8	0.625	-36.96	0.08	-0.10	0.93	0.39	-3.73	5.49
-0.750	8	0.750	-39.84	0.07	-0.08	0.92	0.41	-3.40	5.28
-0.750	8	0.875	-33.52	0.09	-0.11	0.94	0.27	-3.48	5.49
-0.750	6	0.667	-35.47	0.04	-0.04	0.89	0.57	-2.90	4.97
-0.750	6	0.750	-35.29	0.04	-0.05	0.89	0.53	-3.22	5.22
-0.750	6	0.833	-25.03	0.00	-0.00	0.63	0.62	0.00	0.83

Tabelle B.41: $U=15\text{eV}$, $d=1/8$, $t'=-0.750\text{eV}$ **B.3.3 $d=1/6$**

t'	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.300	6	$\downarrow\downarrow$	0.71	0.08	-0.07	0.89	0.14	-3.55	4.99
-0.300	6	$\downarrow\circ\downarrow$	-1.15	0.01	-0.01	0.34	0.00	-0.12	0.24
-0.300	8	$\downarrow\downarrow$	4.36	0.02	-0.03	0.60	0.05	-0.43	0.75
-0.300	8	$\downarrow\circ\downarrow$	0.16	0.01	-0.01	0.15	0.00	-0.03	0.09

Tabelle B.42: $U=15\text{eV}$, $d=1/6$, $t'=-0.300\text{eV}$

t'	n	K	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.500	6	$\downarrow\downarrow$	-6.19	0.04	-0.03	0.60	0.14	-0.35	0.71
-0.500	6	$\downarrow\circ\downarrow$	-4.13	0.02	-0.02	0.47	0.00	-0.25	0.40
-0.500	8	$\downarrow\downarrow$	3.09	0.07	-0.05	0.80	0.08	-1.09	1.84
-0.500	8	$\downarrow\circ\downarrow$	8.31	0.07	-0.06	0.83	0.00	-1.61	2.41

Tabelle B.43: $U=15\text{eV}$, $d=1/6$, $t'=-0.500\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.700	6	$\uparrow\uparrow$	-14.05	0.05	-0.06	0.70	0.18	-0.69	1.10
-0.700	8	0.625	-4.63	0.02	-0.01	0.64	0.50	-0.05	0.94
-0.700	8	0.750	-15.78	0.01	-0.01	0.55	0.42	-0.20	0.66
-0.700	8	0.875	-6.98	0.04	-0.04	0.61	0.25	-0.38	0.70
-0.700	6	0.667	-11.17	0.03	-0.03	0.65	0.41	-0.40	0.98
-0.700	6	0.750	-16.13	0.03	-0.03	0.62	0.35	-0.38	0.83
-0.700	6	0.833	-12.35	0.01	-0.01	0.49	0.39	-0.12	0.53

Tabelle B.44: $U= 15\text{eV}, d=1/6, t' = -0.700\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.725	6	$\uparrow\uparrow$	-14.29	0.08	-0.09	0.87	0.18	-2.76	4.13
-0.725	8	0.625	-8.80	0.00	-0.00	0.55	0.52	0.00	0.69
-0.725	8	0.750	-15.22	0.05	-0.05	0.75	0.35	-0.79	1.65
-0.725	8	0.875	-6.51	0.06	-0.04	0.68	0.21	-0.52	0.88
-0.725	6	0.667	-14.75	0.03	-0.02	0.64	0.44	0.00	0.93
-0.725	6	0.750	-17.58	0.03	-0.03	0.62	0.38	-0.34	0.81
-0.725	6	0.833	-13.44	0.04	-0.04	0.64	0.26	-0.46	0.88

Tabelle B.45: $U= 15\text{eV}, d=1/6, t' = -0.725\text{eV}$

t'	n	ϑ	E/Site	C_{max}	C_{min}	M_{max}	M_{min}	A_{max}	B_{max}
-0.750	6	$\uparrow\uparrow$	-14.65	0.09	-0.09	0.88	0.19	-2.67	4.15
-0.750	8	0.625	-11.40	0.02	-0.02	0.60	0.48	-0.20	0.81
-0.750	8	0.750	-18.36	0.01	-0.01	0.55	0.42	-0.18	0.72
-0.750	8	0.875	-7.03	0.05	-0.03	0.67	0.20	-0.56	0.96
-0.750	6	0.667	-17.40	0.01	-0.02	0.61	0.50	-0.22	0.88
-0.750	6	0.750	-18.76	0.02	-0.02	0.58	0.45	-0.19	0.77
-0.750	6	0.833	-12.78	0.03	-0.03	0.57	0.32	-0.28	0.65

Tabelle B.46: $U= 15\text{eV}, d=1/6, t' = -0.750\text{eV}$

Abbildungsverzeichnis

1.1	Orbitale der CuO ₂ -Ebenen	8
1.2	Yamada-Plot	9
2.1	Übernächstes-Nachbar-Hopping in 1D und 2D	16
3.1	Flußdiagramm der Minimierung	31
4.1	Platzzentriert-Spiegelsymmetrischer Streifen	36
4.2	Mittenzentriert-Inversionssymmetrischer Streifen	36
4.3	Mittenzentriert-Spiegelsymmetrischer Streifen	37
4.4	Platzzentriert-Inversionssymmetrischer Streifen	37
4.5	Ferromagnetische Kopplung	37
4.6	Antiferromagnetische Kopplung	38
4.7	Paramagnetische Kopplung	38
5.1	U=10eV, d= 1/8	47
5.2	U=10eV, d= 1/10	48
5.3	Vergleichsrechnungen mit A=0 für d=1/10 und U=10eV	51
5.4	Magnetisierung und Ladung in Abh. von U für d=1/10	53
5.5	U=10eV, d= 1/12	56
5.6	U=10eV, d= 1/25	57
5.7	d=1/6, t'=-0.625eV, U=8eV	62
5.8	d=1/8, t'=-0.625eV, U=8eV	63
5.9	d=1/10, t'=-0.575eV, U=8eV	63
5.10	d=1/6, t'=-0.725eV, U=10eV	64
5.11	d=1/8, t'=-0.675eV, U=10eV	64
5.12	d=1/10, t'=-0.575eV, U=10eV	65
5.13	d=1/6, t'=-0.725eV, U=15eV	66
5.14	d=1/8, t'=-0.700eV, U=15eV	67
5.15	d=1/10, t'=-0.650eV, U=15eV	67
5.16	d=1/6, t'=-0.750eV, U=8eV	69
5.17	d=1/8, t'=-0.750, U=8eV	70
5.18	d=1/10, t'=-0.750eV, U=8eV	71
5.19	d=1/6, t'=-0.750eV, U=10eV	72

5.20	$d=1/8, t'=-0.750\text{eV}, U=10\text{eV}$	73
5.21	$d=1/10, t'=-0.750\text{eV}, U=10\text{eV}$	74
5.22	$d=1/6, t'=-0.750\text{eV}, U=15\text{eV}$	75
5.23	$d=1/8, t'=-0.750\text{eV}, U=15\text{eV}$	76
5.24	$d=1/10, t'=-0.750\text{eV}, U=15\text{eV}$	77

Tabellenverzeichnis

5.1	Vergleich der KSZ für $d= 1/8, U= 10eV$	45
5.2	Vergleich der KSZ $d= 1/8, U= 10eV$	46
5.3	Vergleich der Kopplungen ferromagnetisch und antiferromagnetisch	49
5.4	Vergleichsrechnungen $A=0$ für $d= 1/10$ und $U = 10eV$	50
5.5	Grenzfall großer U für $d= 1/8$	52
5.6	Grenzfall großer U für $d= 1/10$	52
5.7	Grundzustände in Abhängigkeit von U für $d= 1/4$	54
5.8	Grundzustände in Abhängigkeit von U für $d= 1/5$	54
5.9	Grundzustände in Abhängigkeit von U für $d= 1/6$	54
5.10	Grundzustände in Abhängigkeit von U für $d= 1/7$	54
5.11	Vergleich der KSZ für $U=10eV$ und $d=1/12$	55
5.12	Vergleich der KSZ für $U=10eV$ und $d= 1/25$	55
5.13	Vergleich der KSZ für $d= 7/48$ und $U= 8eV$	58
5.14	Grundzustände für $ t' < t'_c, U = 8eV$ und $d = 1/10$	60
5.15	$ t' < t'_c, U = 10eV, d = 1/10$	60
5.16	$ t' < t'_c, U = 15eV, d = 1/10$	60
5.17	t'_c für $U = 8eV$	61
5.18	t'_c für $U = 10eV$	61
5.19	t'_c für $U = 15eV$	61
5.20	$t' = -0.750, U = 8eV$	68
5.21	$t' = -0.750eV, U = 10eV$	68
5.22	$t' = -0.750eV, U = 15eV$	68
A.1	$d= 1/4$	83
A.2	$d= 1/5$	84
A.3	$d= 1/6$	84
A.4	$d= 1/7$	85
A.5	$d= 1/8, U= 8eV$	85
A.6	$d= 1/8, U = 10eV$	86
A.7	$d= 1/8, U= 15eV$	86
A.8	$d= 1/8$	86
A.9	$d= 1/10, U = 8eV$	87
A.10	$d= 1/10, U=10eV$	88
A.11	$d= 1/10, U=15eV$	88

A.12	d= 1/10	89
A.13	d= 1/12	89
A.14	d= 1/25	89
A.15	d= 7/48, U= 8eV	89
A.16	d= 7/48, U= 10eV	90
A.17	d= 7/48, U= 15eV	90
A.18	d= 9/80, U= 10eV	90
A.19	d= 9/80, U= 10eV	91
A.20	d= 9/80, U= 10eV	91
B.1	U= 8eV, d= 1/10, t' = -0.300eV	93
B.2	U= 8eV, d= 1/10, t' = -0.500eV	93
B.3	U= 8eV, d= 1/10, t' = -0.550eV	94
B.4	U= 8eV, d= 1/10, t' = -0.575eV	94
B.5	U= 8eV, d= 1/10, t' = -0.750eV	95
B.6	U= 8eV, d= 1/8, t' = -0.300eV	95
B.7	U= 8eV, d= 1/8, t' = -0.500eV	95
B.8	U= 8eV, d= 1/8, t' = -0.600eV	96
B.9	U= 8eV, d= 1/8, t' = -0.625eV	96
B.10	U= 8eV, d= 1/8, t' = -0.750eV	97
B.11	U= 8eV, d= 1/6, t' = -0.300eV	97
B.12	U= 8 eV, d= 1/6, t' = -0.500eV	97
B.13	U= 8eV, d= 1/6, t' = -0.625eV	98
B.14	U= 8eV, d= 1/6, t' = -0.650eV	98
B.15	U= 8eV, d= 1/6, t' = -0.675eV	98
B.16	U= 8eV, d= 1/6, t' = -0.750eV	99
B.17	U=10eV, d=1/10, t' = -0.300eV	99
B.18	U=10eV, d=1/10, t' = -0.500eV	99
B.19	U=10eV, d=1/10, t' = -0.550eV	100
B.20	U=10eV, d=1/10, t' = -0.575eV	100
B.21	U=10eV, d=1/10, t' = -0.750eV	101
B.22	U =10eV, d= 1/8, t' = -0.300eV	101
B.23	U =10eV, d= 1/8, t' = -0.500eV	101
B.24	U =10eV, d= 1/8, t' = -0.650eV	102
B.25	U =10eV, d= 1/8, t' = -0.675eV	102
B.26	U =10eV, d= 1/8, t' = -0.750eV	102
B.27	U =10eV, d= 1/6, t' = -0.300eV	103
B.28	U =10eV, d= 1/6, t' = -0.500eV	103
B.29	U =10eV, d= 1/6, t' = -0.700eV	103
B.30	U =10eV, d= 1/6, t' = -0.700eV	103
B.31	U =10eV, d= 1/6, t' = -0.750eV	104
B.32	U =15eV, d= 1/10, t' = -0.300eV	104
B.33	U =15eV, d= 1/10, t' = -0.500eV	104
B.34	U =15eV, d= 1/10, t' = -0.625eV	105
B.35	U =15eV, d= 1/10, t' = -0.650eV	105
B.36	U =15eV, d= 1/10, t' = 0.750eV	106

B.37 $U = 8\text{eV}$, $d = 1/8$, $t' = -0.300\text{eV}$	106
B.38 $U = 8\text{eV}$, $d = 1/8$, $t' = -0.500\text{eV}$	106
B.39 $U = 15\text{eV}$, $d = 1/8$, $t' = -0.675\text{eV}$	107
B.40 $U = 15\text{eV}$, $d = 1/8$, $t' = -0.700\text{eV}$	107
B.41 $U = 15\text{eV}$, $d = 1/8$, $t' = -0.750\text{eV}$	108
B.42 $U = 15\text{eV}$, $d = 1/6$, $t' = -0.300\text{eV}$	108
B.43 $U = 15\text{ eV}$, $d = 1/6$, $t' = -0.500\text{eV}$	108
B.44 $U = 15\text{eV}$, $d = 1/6$, $t' = -0.700\text{eV}$	109
B.45 $U = 15\text{eV}$, $d = 1/6$, $t' = -0.725\text{eV}$	109
B.46 $U = 15\text{eV}$, $d = 1/6$, $t' = -0.750\text{eV}$	109

Literaturverzeichnis

- [AAS⁺05] P. Abbamonte, A.Rusydi, S. Smadici, G.D. Gu, G.A. Sawatzki, and D.L. Feng. Spatially modulated 'mottness' in $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$. *Nature Physics*, 1:155–158, 2005.
- [And63] P.W. Andersen. Theory of magnetic exchange interactions: exchange in insulators and semiconductors. *Solid State Physics*, 14:99–214, 1963.
- [BM86] J. G. Bednorz and K. A. Müller. Possible high T_c superconductivity in the BaLaCuO system. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 64:189–193, 1986.
- [Bün98] J. Bünemann. *Verallgemeinerte Gutzwiller Wellenfunktionen*. PhD thesis, Universität Dortmund, 1998.
- [DMHD01] Pengcheng Dai, H. A. Mook, R. D. Hunt, and F. Dogan. Evolution of the resonance and incommensurate spin fluctuations in superconducting $\text{Yb}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$. *Phys. Rev. B*, 63(5):054525, Jan 2001.
- [Eme87] V. J. Emery. Theory of high- T_c superconductivity in oxides. *Phys. Rev. Lett.*, 58(26):2794–2797, Jun 1987.
- [FGY⁺04] M. Fujita, H. Goka, K. Yamada, J. M. Tranquada, and L. P. Regnault. Stripe order, depinning, and fluctuations in $\text{La}_{1.875}\text{Ba}_{0.125}\text{CuO}_4$ and $\text{La}_{1.875}\text{Ba}_{0.075}\text{Sr}_{0.050}\text{CuO}_4$. *Phys. Rev. B*, 70(10):104517, Sep 2004.
- [FKMA⁺07] Øystein Fischer, Martin Kugler, Ivan Maggio-Aprile, Christophe Bertod, and Christoph Renner. Scanning tunneling spectroscopy of high-temperature superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, 79(1):353–419, Mar 2007.
- [FSW⁺09] Jörg Fink, Enrico Schierle, Eugen Weschke, Jochen Geck, David Hawthorn, Viktor Soltwisch, Hiroki Wadati, Hsueh-Hung Wu, Hermann A. Dürr, Nadja Wizen, Bernd Büchner, and George A. Sawatzky. Charge ordering in $\text{La}_{1.8-x}\text{Eu}_{0.2}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ studied by resonant soft x-ray diffraction. *Phys. Rev. B*, 79(10):100502, Mar 2009.
- [Geb90] Florian Gebhard. Gutzwiller correlated wave functions in finite dimensions d: A systematic expansion in $1/d$. *Phys. Rev. B*, 41(13):9452–9473, May 1990.

- [Gut63] Martin C. Gutzwiller. Effect of correlation on the ferromagnetism of transition metals. *Phys. Rev. Lett.*, 10(5):159–162, Mar 1963.
- [Gut64] Martin C. Gutzwiller. Effect of correlation on the ferromagnetism of transition metals. *Phys. Rev. A*, 134(4A):923–941, May 1964.
- [Gut65] Martin C. Gutzwiller. Correlation of electrons in a narrow s band. *Phys. Rev.*, 137(6A):A1726–A1735, Mar 1965.
- [HHF⁺08] V. Hinkov, D. Haug, B. Fauque, P. Bourges, Y. Sidis, A. Ivanov, C. Bernhard, C. T. Lin, and B. Keimer. Electronic liquid crystal state in the high-temperature superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.45}$. *Science*, 319:597, 2008.
- [Hub63] John Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands. *Proceedings of the Royal Society A*, 276:238–257, 1963.
- [Hub64a] John Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands. ii. the degenerate band case. *Proceedings of the Royal Society A*, 277:237–259, 1964.
- [Hub64b] John Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands. iii. an improved solution. *Proceedings of the Royal Society A*, 281:401–419, 1964.
- [Hüc07] M. Hücker. Coupling of stripes to lattice distortions in cuprates and nickelates. *Physica C*, 460:170, 2007.
- [Kan63] Junjiro Kanamori. Electron correlation and ferromagnetism of transition metals. *Progress of Theoretical Physics*, 30(3):275–289, 1963.
- [KR86] Gabriel Kotliar and Andrei E. Ruckenstein. New functional integral approach to strongly correlated fermi systems: The gutzwiller approximation as a saddle point. *Phys. Rev. Lett.*, 57(11):1362–1365, Sep 1986.
- [LBK⁺99] Y. S. Lee, R. J. Birgeneau, M. A. Kastner, Y. Endoh, S. Wakimoto, K. Yamada, R. W. Erwin, S.-H. Lee, and G. Shirane. Neutron-scattering study of spin-density wave order in the superconducting state of excess-oxygen-doped $\text{La}_2\text{CuO}_{4+y}$. *Phys. Rev. B*, 60(5):3643–3654, Aug 1999.
- [LEFK94] U. Löw, V. J. Emery, K. Fabricius, and S. A. Kivelson. Study of an ising model with competing long- and short-range interactions. *Phys. Rev. Lett.*, 72(12):1918–1921, Mar 1994.
- [Mac89] Kazushige Machida. Magnetism in La_2CuO_4 based compounds. *Physica C: Superconductivity*, 158(1-2):192–196, 1989.
- [Mat81] Daniel C. Mattis. *The Theory of Magnetism I: Statics and Dynamics (Springer Series in Solid-State Sciences)*. Springer, 1 edition, 9 1981.
- [MDDH00] H. A. Mook, Pengcheng Dai¹, F. Dogan, and R. D. Hunt¹. One-dimensional nature of the magnetic fluctuations in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.6}$. *Nature*, 430:650, 2000.

- [MFY⁺00] M. Matsuda, M. Fujita, K. Yamada, R. J. Birgeneau, M. A. Kastner, H. Hiraka, Y. Endoh, S. Wakimoto, and G. Shirane. Static and dynamic spin correlations in the spin-glass phase of slightly doped $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. *Phys. Rev. B*, 62(13):9148–9154, Oct 2000.
- [MFY⁺02] M. Matsuda, M. Fujita, K. Yamada, R. J. Birgeneau, Y. Endoh, and G. Shirane. Electronic phase separation in lightly doped $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. *Phys. Rev. B*, 65(13):134515, Mar 2002.
- [MLG⁺00] M. Matsuda, Y. S. Lee, M. Greven, M. A. Kastner, R. J. Birgeneau, K. Yamada, Y. Endoh, P. Böni, S.-H. Lee, S. Wakimoto, and G. Shirane. Freezing of anisotropic spin clusters in $\text{La}_{1.98}\text{Sr}_{0.02}\text{CuO}_4$. *Phys. Rev. B*, 61(6):4326–4333, Feb 2000.
- [Mot90] Nevill Mott. *Metal-Insulator Transitions: Second Edition*. CRC, 1 edition, 8 1990.
- [PTVF07] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery. *Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 3 edition, 9 2007.
- [SBRL04] G. Seibold, F. Becca, P. Rubin, and J. Lorenzana. Time-dependent Gutzwiller theory of magnetic excitations in the Hubbard model. *Phys. Rev. B*, 69(15):155113, Apr 2004.
- [SCDCG98] G. Seibold, C. Castellani, C. Di Castro, and M. Grilli. Striped phases in the two-dimensional Hubbard model with long-range Coulomb interaction. *Phys. Rev. B*, 58(20):13506–13509, Nov 1998.
- [Sch89] H.J. Schulz. Domain walls in a doped antiferromagnet. *J. Phys. France*, 50:2833–2849, 1989.
- [SL07] G. Seibold and J. Lorenzana. Checkerboard and stripe inhomogeneities in cuprate. *Phys. Rev. B*, 75:100505, 2007.
- [SO77] J. Spatek and A. M. Oles. Ferromagnetism in narrow s-band with inclusion of intersite correlations. *Physica B+C*, 86-88(Part 1):375 – 377, 1977.
- [Spa07] J. Spatek. t-J Model Then and Now: a Personal Perspective from the Pioneering Times. *Acta Physica Polonica A*, 111:409–+, April 2007.
- [TIKU99] J. M. Tranquada, N. Ichikawa, K. Kakurai, and S. Uchida. Charge segregation and antiferromagnetism in high- T_c superconductors. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 60(8-9):1019 – 1023, 1999.
- [T.O06] T.Ohm. *DFT-Gutzwiller-Rechnungen zu ferromagnetischem bcc-Nickel unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung*. PhD thesis, Universität Dortmund, 2006.

- [Tra97] J.M. Tranquada. Modulated spin and charge densities in cuprate superconductors. *Physica B*, 241-243:745–750, 1997.
- [TSJ+95] J.M. Tranquada, B.J. Sternlieb, J.D.Axe, Y. Nakamura, and S. Uchida. Evidence for stripe correlations of spins and holes in copper oxide superconductors. *Nature*, 375:561–563, 1995.
- [USG04] G. S. Uhrig, K. P. Schmidt, and M. Grüninger. Unifying magnons and triplons in stripe-ordered cuprate superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 93:267003, 2004.
- [USG05] G. S. Uhrig, K. P. Schmidt, and M. Grüninger. Magnetic excitations in bilayer high-temperature superconductors with stripe correlations. *Journal of the Physical Society of Japan*, 74(Suppl.):86, 2005.
- [vD91] P. G. J. van Dongen. Thermodynamics of the extended hubbard model in high dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 67(6):757–760, Aug 1991.
- [Vis74] P. B. Visscher. Phase separation instability in the hubbard model. *Phys. Rev. B*, 10(3):943–945, Aug 1974.
- [Voj09] Matthias Vojta. Lattice symmetry breaking in cuprate superconductors: Stripes, nematics, and superconductivity. *Advances in Physics*, 58, 2009. arXiv:0901.3145.
- [VSM⁺87] D. Vaknin, S. K. Sinha, D. E. Moncton, D. C. Johnston, J. M. Newsam, C. R. Safinya, and H. E. King. Antiferromagnetism in $\text{La}_2\text{CuO}_{4-y}$. *Phys. Rev. Lett.*, 58(26):2802–2805, Jun 1987.
- [WBK⁺00] S. Wakimoto, R. J. Birgeneau, M. A. Kastner, Y. S. Lee, R. Erwin, P. M. Gehring, S. H. Lee, M. Fujita, K. Yamada, Y. Endoh, K. Hirota, and G. Shirane. Direct observation of a one-dimensional static spin modulation in insulating $\text{La}_{1.95}\text{Sr}_{0.05}\text{CuO}_4$. *Phys. Rev. B*, 61(5):3699–3706, Feb 2000.
- [WLK⁺97] B. O. Wells, Y. S. Lee, M. A. Kastner, R. J. Christianson, R. J. Birgeneau, K. Yamada, Y. Endoh, and G. Shirane. Incommensurate Spin Fluctuations in High-Transition Temperature Superconductors. *Science*, 277(5329):1067–1071, 1997.
- [WS98] Steven R. White and D. J. Scalapino. Density matrix renormalization group study of the striped phase in the 2d $t - j$ model. *Phys. Rev. Lett.*, 80(6):1272–1275, Feb 1998.
- [WS99] Steven R. White and D. J. Scalapino. Competition between stripes and pairing in a $t - t' - j$ model. *Phys. Rev. B*, 60(2):R753–R756, Jul 1999.
- [WS00] Steven R. White and D. J. Scalapino. Phase separation and stripe formation in the two-dimensional $t - j$ model: A comparison of numerical results. *Phys. Rev. B*, 61(9):6320–6326, Mar 2000.

- [WSE⁺99] S. Wakimoto, G. Shirane, Y. Endoh, K. Hirota, S. Ueki, K. Yamada, R. J. Birgeneau, M. A. Kastner, Y. S. Lee, P. M. Gehring, and S. H. Lee. Observation of incommensurate magnetic correlations at the lower critical concentration for superconductivity in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ($x=0.05$). *Phys. Rev. B*, 60(2):R769–R772, Jul 1999.
- [YLK⁺98] K. Yamada, C. H. Lee, K. Kurahashi, J. Wada, S. Wakimoto, S. Ueki, H. Kimura, Y. Endoh, S. Hosoya, G. Shirane, R. J. Birgeneau, M. Greven, M. A. Kastner, and Y. J. Kim. Doping dependence of the spatially modulated dynamical spin correlations and the superconducting-transition temperature in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. *Phys. Rev. B*, 57(10):6165–6172, Mar 1998.
- [ZG89] Jan Zaanen and Olle Gunnarsson. Charged magnetic domain lines and the magnetism of high- t_c oxides. *Phys. Rev. B*, 40(10):7391–7394, Oct 1989.

Erklärung

Hiermit erkläre ich, Rolf Wöste, an Eides statt, daß ich die vorliegende Dissertation selbst verfasst und angefertigt und dabei keine anderen Hilfsmittel als die angegebenen verwendet habe sowie daß keine Teile der Dissertation zuvor veröffentlicht wurden.

ROLF WÖSTE

Danksagung

An erster Stelle möchte ich Prof. W. Weber für die Überlassung der Aufgabenstellung und die tatkräftige Unterstützung während aller Phasen des Projekts danken.

Allen ehemaligen und aktuellen Mitarbeitern der Lehrstühle T1 und T2 danke ich für die wunderbare Arbeitsatmosphäre und zahllose Gespräche über Physik und vieles mehr. Ich danke auch allen, die zum dauerhaften Erfolg der SpoKu-Kollaboration beigetragen haben.

Herausheben möchte ich Dr. Torsten Ohm, der gerade zu Beginn meiner Tätigkeiten eine große Hilfe war.

Für die bereitwillige Übernahme des Lektorats danke ich Dipl.Phys. Fabian Güttge, Dipl.Phys. Stefan Bienas und Dr. Patrick Grete.

PD. Dr. Jörg Bünemann (Marburg) danke ich für das stete Interesse am Fortgang der Arbeit und viele fruchtbare Diskussionen über den Gutzwiller-Formalismus.

Nicht zuletzt möchte ich mich bei meiner Familie und meinen Freunden für den großen Rückhalt in den letzten Jahren bedanken.