

Das Vorzeichenproblem im Projektor-Quanten-Monte-Carlo- Verfahren an Hand des Hubbard-Modells



Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)
der Naturwissenschaftlichen Fakultät II - Physik
der Universität Regensburg

vorgelegt von

Wolfgang Feil

aus
Regensburg
2005

Promotionsgesuch eingereicht am: 19. Juli 2005

Die Arbeit wurde angeleitet von: Prof. Dr. Ingo Morgenstern

Prüfungsausschuß:

Vorsitzender: Prof. Dr. Christoph Strunk

1. Gutachter Prof. Dr. Ingo Morgenstern

2. Gutachter Prof. Dr. Uwe Krey

Weiterer Prüfer: Prof. Dr. Andreas Schäfer

Termin des Promotionskolloquiums: 07. Dezember 2005

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Hubbard-Modelle	3
1.1 Der ursprüngliche Modellhamiltonian	3
1.2 Hubbard-Modelle für die HTSC	3
1.2.1 Emery-Modell	3
1.2.2 t-t'-Hubbard-Modell	4
1.3 Einteilchenoperator und ebene Wellen	5
1.4 Supraleitung im Hubbard-Modell	6
2 Quanten-Monte-Carlo-Verfahren	7
2.1 Übersicht über die QMC-Verfahren	7
2.2 Das Projector-Quantum-Monte-Carlo	7
2.3 Trotter-Suzuki-Zerlegung	8
2.4 Hubbard-Stratonovich-Zerlegung	9
2.5 Behandlung des Hopping-Termes	10
2.5.1 Matrixdarstellung des Hopping-Operators	10
2.5.2 Die Randbedingungen für das Gitter	11
2.6 Propagierende Slaterdeterminanten	11
2.7 Erwartungswerte im PQMC	12
2.7.1 Einteilchen-Greensfunktionen	12
2.7.2 Off-Diagonal Long-Range Order (ODLRO)	13
3 Simulationen mit dem PQMC	15
3.1 Die MC-Simulation	15
3.1.1 Monte-Carlo-Moves	15

3.1.2	Single-Spin-Flip	15
3.1.3	Cluster-Move-Algorithmus	16
3.1.4	Numerische Stabilisierung	16
3.2	Das Vorzeichenproblem im PQMC	17
3.2.1	Erklärungen für das Vorzeichenproblem	17
3.2.2	Simulationen ohne Vorzeichenproblem	18
3.2.3	Dichteschätzung	20
3.2.4	Numerische Stabilität und Vorzeichenproblem	21
3.3	Verbesserung der Monte-Carlo-Statistik	29
3.3.1	Unitäre Transformationen	30
3.3.2	Erhaltung der globalen $SU(2)$ -Symmetrie	30
3.3.3	Trotter-Suzuki-Zerlegungen höherer Ordnung	31
3.3.4	Verallgemeinerte HS-Transformationen	32
4	Erwartungswertverteilung und MC-Vorzeichen	35
4.1	Erwartungswerte der Energie	35
4.2	Erwartungswerte für ODLRO	42
4.3	Numerische Beobachtungen	51
4.3.1	Orthogonalität der Slaterdeterminanten	51
4.3.2	Singular Value Decomposition	53
4.4	Erwartungswerte weiterer Operatoren	56
5	Abstandsverhalten der Paarkorrelationen	63
5.1	Abstandsabhängige Vertex-Korrelation	63
5.1.1	Verteilungen über die Vertex-Korrelation	63
5.1.2	Beschränkung des Datenumfangs	64
5.1.3	Kriterien für das Verwerfen von Einzelbeiträgen	65
5.2	d-Wellen-Korrelation und Vertexkorrektur	67
5.2.1	Quadratische Systeme mit $L=16$	67
5.2.2	Quadratische Systeme mit $L=36$	72
5.2.3	Quadratische Systeme mit $L=100$	77
5.3	s-Wellen-Korrelation mit negativem U	79
5.3.1	Erwartungswerte für Energie und ODLRO	79
5.3.2	Abstandsabhängigkeit der s-Wellen-Korrelation	80

5.4 Plateauwerte der d-Wellen-Korrelation	84
5.4.1 Supraleitende Korrelationen bei $U = 4$	84
5.4.2 Modulationen in den Hopping-Termen	90
6 Zusammenfassung und Ausblick	93
A Weitere Histogramme	97
A.1 Verteilungen zur Energie	97
A.2 Verteilungen zu ODLRO	98
A.3 Gemittelte Spin- \downarrow -Erwartungswerte	99
A.4 Histogramme mit Flanken	101
B Matrixrechnungen mit Slaterdeterminanten	103
B.1 Skalarprodukt zweier Slaterdeterminanten	103
B.2 Erwartungswerte im PQMC	103
B.3 Erwartungswerte für ODLRO	104
C Das Monte Carlo Verfahren	107
C.1 'Importance Sampling'	107
C.2 Markov-Ketten	107
C.3 Metropolis-Algorithmus	108
C.4 Fehler der Monte-Carlo-Rechnung	109
C.5 Simulated Annealing	110
Literaturverzeichnis	111
Danksagung	119

Einleitung

Der Grundzustand eines quantenmechanischen Systems ist die Lösung seiner Schrödingergleichung zum niedrigsten Energiedurchgang. Für die Hamiltonoperatoren der Festkörperphysik, die man über die kanonische Quantisierung der klassischen Vierteilchensysteme erhält, hängt dieser zunächst einmal von den Koordinaten aller beschriebenen Teilchen ab. Die Zahl der Freiheitsgrade liegt also in der Größenordnung 10^{23} . Selbst wenn der Grundzustand also exakt bekannt ist, wäre zur Bestimmung seiner Erwartungswerte immer noch eine extrem umfangreiche Rechnung erforderlich. Daran wird deutlich, wie sehr man in der Festkörperphysik auf reduzierte quantenmechanische Modellsysteme angewiesen ist, deren Eigenfunktionen rechentechnisch so handhabbar sind, daß man mit ihnen auch Erwartungswerte bestimmen kann. Dabei müssen diese aber immer noch die gerade interessierenden physikalischen Eigenschaften eines realen Festkörpers reproduzieren können.

Eine der wohl bekanntesten und erfolgreichsten dieser Theorien ist die BCS-Theorie der Supraleitung. Diese kann die mikroskopischen Mechanismen konventioneller supraleitender Materialien gut erklären. Das Elektronensystem der von Bednorz und Müller bereits 1986 entdeckten supraleitenden Kuprate (HTSC) kann sie jedoch (z. B. wegen der abweichenden Effekte bei der Isotopensubstitution) nicht zufriedenstellend beschreiben. Deren normalleitende Eigenschaften sind dabei mit dem wohl am meisten verwendeten Modellsystem für Elektronen im Festkörper, dem Hubbard-Modell, sehr gut reproduzierbar. Diese hängen jedoch ganz entscheidend von der Elektron-Elektron-Wechselwirkung ab, was Berechnungen für die vermutete supraleitende Phase mittels einfacher Molekularfeldmethoden nicht ohne weiteres möglich macht.

Alternativ ist für kleine Systemgrößen die direkte Diagonalisierung beispielsweise mittels des Lanczos-Algorithmus möglich. Mit zunehmender Zahl an Gitterplätzen übersteigt jedoch die Dimension der zu diagonalisierenden, darstellenden Matrix die heutigen rechentechnischen Möglichkeiten. Daneben bleiben noch die sogenannten Quanten-Monte-Carlo-Methoden (QMC-Methoden), um Aussagen über Parameterbereiche der Hubbard-Modelle gewinnen zu können, die für eine Beschreibung der supraleitenden Phase der HTSC in Frage kommen. Die vorliegende Arbeit beschränkt sich dabei im wesentlichen auf das Projektion-Quanten-Monte-Carlo-Verfahren (PQMC). In Kapitel 1 wird dazu erst einmal die Anwendbarkeit von hubbardartigen Modellen zur Beschrei-

bung der HTSC besprochen. Das darauf folgende Kapitel 2 hat die grundlegenden Zerlegungen für den Hamiltonoperator, welche den gängigen QMC-Verfahren zugrunde liegen, zum Inhalt. Außerdem wird das Vorgehen bei der Berechnung der quantenmechanischen Erwartungswerte, speziell auch zum Nachweis einer möglichen supraleitenden Korrelation, vorgestellt.

Die numerischen Aspekte des PQMC sind in Kapitel 3 erörtert. Der Schwerpunkt der Diskussion liegt dabei auf den Untersuchungen zur Stabilität der Fließkommarechnungen gerade auch im Zusammenhang mit dem Auftreten des Vorzeichenproblems. Nebenbei liefern die dabei durchgeführten Berechnungen von Größen, für die beim Auftreten einer Teilchen-Loch-Symmetrie analytische Aussagen gemacht werden können, eine gute Möglichkeit, die Korrektheit der Implementierung insgesamt zu überprüfen.

In Kapitel 4 werden die Besonderheiten der Verteilungen über die Monte-Carlo-Beiträge zu den quantenmechanischen Erwartungswerten bei den PQMC-Rechnungen für diverse Simulationsparameter vorgestellt und die dadurch bedingten Schwierigkeiten bei der Berechnung der quantenmechanischen Erwartungswerte besprochen. Deren numerische Entstehung wird anschließend noch etwas genauer erörtert. Nebenher sind die Möglichkeiten besprochen, die Konsistenz der Ergebnisse der PQMC-Rechnungen gerade auch im Vergleich mit anderen Verfahren zur Berechnung von Grundzustandeigenschaften zu erhöhen.

Neben einer Differenzbildung aus der Herleitung zum Monte-Carlo-Sampling macht ein zusätzlicher Korrekturterm bei den Rechnungen für den Nachweis von supraleitenden Korrelationen Probleme, der in den Simulationen mit vergleichsweise kleinen, im Computer dadurch aber noch simulierbaren Systemen nicht einfach vernachlässigt werden kann. Inwieweit den daraus entstehenden, zusätzlichen numerischen Schwierigkeiten durch eine genauere Analyse des Abstandverhaltens der Korrelationen begegnet werden kann, ist in Kapitel 5 zusammengefaßt. Darüberhinaus wird dort auch besprochen, was die Ergebnisse letztendlich über mögliche supraleitende Korrelationen des Grundzustandes des untersuchten Hubbard-Hamiltonians aussagen können.

In Anhang A sind einige zusätzliche Verteilungen über die Monte-Carlo-Beiträge diverser quantenmechanischer Observablen zu finden. Die Herleitungen für die Berechnung des Skalarproduktes zweier Slaterdeterminanten und der quantenmechanischen Erwartungswerte werden in Anhang B kurz überrissen. Um die in der Arbeit verwendeten Begriffe zur Monte-Carlo-Rechnung nicht uneingeführt zu lassen, wird in Anhang C eine knappe Einführung in die theoretischen Grundlagen des 'Importance Sampling' gegeben.

Kapitel 1

Hubbard-Modelle

1.1 Der ursprüngliche Modellhamiltonian

Das Hubbard-Modell wurde 1963 unabhängig voneinander von J. Hubbard [Hub63], J. Kanamori [Kan63] und M.C. Gutzwiller [Gut63] vorgeschlagen. Im weiteren Verlauf des wissenschaftlichen Diskurses verblieb ersterer jedoch als alleiniger Namensgeber.

Die Ortsdarstellung des Hubbard-Hamiltonoperators in 2. Quantisierung

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \quad (1.1)$$

ergibt sich aus dem Hamiltonoperator für wechselwirkende Elektronen im elektrischen Potential eines ortsfesten Ionengitters durch Vernachlässigung des langreichweiten An- teils der Coulomb-Wechselwirkung und die Beschränkung auf ein einziges elektronisches s-Band [Bae95].

1.2 Hubbard-Modelle für die HTSC

1.2.1 Emery-Modell

Die allen supraleitenden Kupraten (HTSC) gemeinsamen Cu0-Ebenen gelten als die Träger der supraleitenden Ströme. Das Anordnungsschema der dabei an der Fermikante liegenden, gefüllten $p_{x/y}$ -Orbitale des Sauerstoffs und halb gefüllten $d_{x^2-y^2}$ -Orbitale des Kupfers in diesen Ebenen ist in Bild 1.1 gezeigt. Die nicht supraleitenden undotierten HTSC haben in diesem Bild ein halb gefülltes Valenzband, sollten also elektrisch leitend sein. Sie sind jedoch antiferromagnetische Isolatoren, was man im Rahmen des von Mott [Mot49] vorgeschlagenen und von Hubbard gerechneten [Hub64a], [Hub64b] Mott-Hubbard-Überganges erklären kann, wenn man die elektronischen Korrelationen mit im

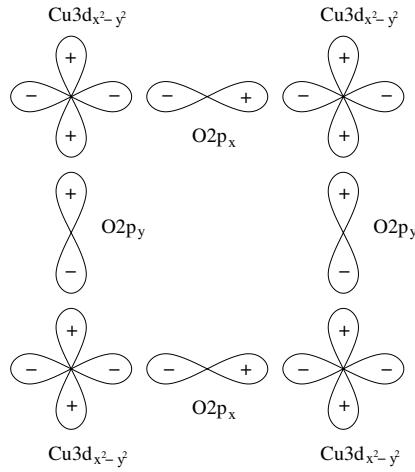


Abbildung 1.1: Schematische Anordnung der Cu- und O-Orbitale für das 3-Band-Hubbard-Modell

Modell berücksichtigt. Der Metall-Isolator-Übergang tritt dann ein, wenn die Elektronen-Elektronen-Wechselwirkung U groß wird.

Dies ist Motivation dafür, auch die Ladungsträger in einer Cu0-Ebene mit einem 3-Band-Hubbard-Hamiltonian zu beschreiben. Ein von Emery vorgeschlagenes Modell erweitert dabei den Hamiltonian (1.1) um eine elektronische Wechselwirkung zwischen benachbarten Kupfer- und Sauerstoff-Orbitalen [Eme87]. Es gibt davon ausgehend begründete Anhaltspunkte dafür, daß auch ein effektiver 1-Band-Hubbard-Hamiltonian das niedrigerenergetische Eigenwertspektrum richtig wiedergeben kann [Son95] [Fei96]. Die Beschränkung auf (1.1) in dieser Arbeit ist insofern unproblematisch, als daß das verwendete Projektor-Monte-Carlo-Verfahren ohnehin nur die Grundzustandseigenschaften des Modell-Hamiltonians liefert.

1.2.2 t-t'-Hubbard-Modell

Da die atomaren Wellenfunktionen von Cu und O in den Ebenen stark lokalisiert sind, also nur schmale Energiebänder ausbilden, fallen die t_{ij} in (1.1) mit zunehmendem Abstand $\|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|$ stark ab [Hir87], was nachfolgende Vereinfachung rechtfertigt.

$$t_{ij} = \begin{cases} t & \text{falls } i \text{ und } j \text{ nn.} \\ t' & \text{falls } i \text{ und } j \text{ nnn.} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (1.2)$$

Dabei bezeichnet nn. nächste und nnn. übernächste Nachbarn. Mit dem so abgeleiteten t-t'-Hubbard-Modell

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} [c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + h.c.] - t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} [c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + h.c.] + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} , \quad (1.3)$$

wobei hier $\langle \rangle$ und $\langle\langle \rangle\rangle$ die Summe über nächste und übernächste Nachbarn bezeichnet, gelingt es, die normalleitenden Eigenschaften einiger HTSC mit geeigneten Parametern sehr gut zu reproduzieren. Dies kann als weiteres Argument für die Anwendbarkeit eines effektiven Ein-Band-Modelles für die Simulation der HTSC betrachtet werden [And91]. Ein Überblick darüber ist in [Fet98], Kapitel 2, und den dort zitierten Artikeln zu gewinnen. Dort wird auch speziell auf die Reproduzierbarkeit des Phasendiagrammes der HTSC mit dem t - t' -Modell eingegangen.

Durch die Einführung des t' -Termes erhält man darüber hinaus noch einen Parameter, der es einem erlaubt, ein Van-Hove-Szenario [Hov53] in der Simulation zu bewerkstelligen. Durch Variation von t' lässt sich beispielsweise die logarithmische Van-Hove-Singularität in der elektronischen Zustandsdichte, die das unendlich ausgedehnte 2-dimensionale Modell für $U = 0$ hat, so verschieben, daß diese auch abseits der Halbfüllung noch in der Nähe der Fermikante zu liegen kommt [Sin95]. t' muß dazu von der Größe der Unterdotierung $x = 1 - \frac{n_\uparrow + n_\downarrow}{L}$ des jeweils gerechneten Systems aus L Gitterpunkten sein, wobei $n_s, s \in \{\uparrow, \downarrow\}$, die Anzahl der Elektronen mit dem jeweiligen Spin bezeichnet [Hus96b]. Ein solches Szenario kann unter der zusätzlichen Annahme einer attraktiven Paar-Wechselwirkung an der Fermikante auch einige charakteristische Merkmale der HTSC, wie z.B. die Abhängigkeit des Isotopen-Effektes von der Sprungtemperatur, erklären [New95].

1.3 Einteilchenoperator und ebene Wellen

Der Einteilchenoperator mit den Hopping-Matrixelementen in (1.3) ist im k -Raum diagonal und beschreibt nicht miteinander wechselwirkende Elektronen im Festkörper. Diese können dabei als gitterperiodisch modulierte ebene Wellen, den so genannten Bloch-elektronen, geschrieben werden. Das Hopping nur zu nächsten und übernächsten Nachbarn führt dabei in 2 Dimensionen mit $\vec{k} = (k_x, k_y)$ zu der Energie-Impuls-Abhängigkeit

$$E(k) = -2t(\cos(k_x) + \cos(k_y)) - 4t' \cos(k_x) \cos(k_y) . \quad (1.4)$$

Vernachlässigt man die Kristallstruktur ganz und betrachtet das Ionengitter als homogen geladenen Hintergrund, werden aus den Einteilchenzuständen ebene Wellen [Nol91]

$$\Psi_{\vec{k}} = e^{i\vec{k}\vec{r}} . \quad (1.5)$$

Da diese für \vec{k} und $-\vec{k}$ energetisch entartet sind, ergeben geeignete Linearkombinationen dieser Zustände Einteilchenwellenfunktionen mit nur reellen Koeffizienten bei der

Darstellung im Ortsraum. Ein Vielteilchenzustand von N Elektronen kann damit als Slaterdeterminante aus N dieser Einteilchenzustände konstruiert werden.

1.4 Supraleitung im Hubbard-Modell

Die Frage, ob ein geeignetes Hubbard-Modell die supraleitenden Eigenschaften der von Bednorz und Müller 1985 entdeckten supraleitenden Kuprate (HTSC) korrekt beschreiben kann, ist auch fast 20 Jahre nach deren Entdeckung nicht klar zu beantworten. Dies liegt zum einen daran, daß etablierte Methoden wie Störungsansätze [Lin91] und Mean-Field-Methoden [Hir85] auf Grund der starken Elektronenkorrelation¹ in dem für die Supraleitung relevanten Parameterbereich versagen; eine analytische Lösung liegt ohnehin nur für das eindimensionale Hubbard-Modell vor [Lie68]. Zum anderen treten bei den alternativ durchführbaren numerischen Quanten-Monte-Carlo-Verfahren spezifische Schwierigkeiten auf, die die Ergebnisse der bislang durchgeführten Rechnungen nicht unumstritten lassen (mehr dazu in Kapitel 3.2). Diese werden in dieser Arbeit im Rahmen des Projektor-Quanten-Monte-Carlo-Verfahren mit dem t-t'-Modell (1.3) besprochen.

¹Von starker Korrelation spricht man, wenn $U \gg t_{ij}$ gilt.

Kapitel 2

Quanten-Monte-Carlo-Verfahren

2.1 Übersicht über die QMC-Verfahren

Die etablierten Quanten-Monte-Carlo-Verfahren lassen sich grob in die drei mit den englischen Namen bezeichneten Verfahren Greens-Function-Monte-Carlo (GFMC), Diffusion-Monte-Carlo (DMC) und Auxiliary-Field-Quantum-Monte-Carlo (AFQMC) einteilen. Letzterer Name hat sich erst in den letzten Jahren etabliert und umfaßt das Projector-Quantum-Monte-Carlo (PQMC) bzw. Grandcanonical Quantum-Monte-Carlo (GQMC), die sich beide in ihrer numerischen Umsetzung sehr ähneln. Einen Überblick über die verschiedenen Verfahren gewinnt man beispielsweise in [Bin95], Kapitel 8.

Für die Rechnungen zu Hinweisen auf einen möglichen supraleitenden Grundzustand des Hubbard-Modells abseits der Halbfüllung wurden hauptsächlich das Constrained-Path-Quantum-Monte-Carlo (CPMC) [Zha96], welchem im wesentlichen ein DMC-Algorithmus zu Grunde liegt, und die AFQMC-Methoden [Hus96a] verwendet. Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich vornehmlich mit den Eigenschaften des PQMC.

2.2 Das Projector-Quantum-Monte-Carlo

Ziel des PQMC ist es, mittels des Operators

$$\exp(-\Theta \mathcal{H}) \quad (2.1)$$

einen quantenmechanischen Zustand $|\Psi_T\rangle$, der nicht orthogonal zum Grundzustand $|\Psi_0\rangle$ sein darf, über $\Theta \rightarrow \infty$ auf $|\Psi_0\rangle$ zu projizieren. Dann gilt für den Grundzustandserwartungswert eines Operators \mathcal{O} gerade

$$\langle \Psi_0 | \mathcal{O} | \Psi_0 \rangle = \frac{\langle \Psi_T | e^{-\Theta \mathcal{H}} \mathcal{O} e^{-\Theta \mathcal{H}} | \Psi_T \rangle}{\langle \Psi_T | e^{-2\Theta \mathcal{H}} | \Psi_T \rangle} \quad . \quad (2.2)$$

Um die Rechnung mit dem Hamiltonoperator (1.3) effizient durchführen zu können, wird der Projektionsoperator zuerst einmal mit einem nach H. F. Trotter und M. Suzuki benannten Verfahren zerlegt und daran anschließend der Term der elektronischen Wechselwirkung mit Hilfe einer diskreten Hubbard-Stratonovich-Zerlegung in einen effektiven Einteilchenoperator umgeschrieben. Dies ist auch das Vorgehen beim GQMC, wobei dort allerdings $\text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H})$ berechnet wird. Ebenso bedient sich die Behandlung des Hubbard-Hamiltonians mittels DMC-Methoden dieser beiden Zerlegungen [Zha96].

2.3 Trotter-Suzuki-Zerlegung

Der Hopping-Anteil

$$\mathcal{H}_0 = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} [c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + h.c.] - t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} [c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + h.c.] \quad (2.3)$$

und der Wechselwirkungsterm

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \quad (2.4)$$

von (1.3) vertauschen nicht miteinander, sind also nicht gleichzeitig diagonalisierbar. Dadurch tauchen bei der Anwendung der Exponentialfunktion auch Terme auf, die die nicht verschwindenden Kommutatoren der beide Operatoren enthalten. Falls für zwei Operatoren \mathcal{A} und \mathcal{B} die Gleichungen $[[\mathcal{A}, \mathcal{B}], \mathcal{A}] = 0$ und $[[\mathcal{A}, \mathcal{B}], \mathcal{B}] = 0$ gelten, kann man mit dem Baker-Hausdorff-Theorem

$$e^{\mathcal{A}} e^{\mathcal{B}} = e^{\mathcal{A} + \mathcal{B} + \frac{1}{2}[\mathcal{A}, \mathcal{B}]} \quad (2.5)$$

arbeiten, von dem ausgehend in [Bla96] auch eine generische Darstellung des in Anhang C verwendeten Wickschen Theorems hergeleitet wird. Im PQMC verwendet man jedoch eine, für zwei als stetig vorausgesetzte Operatoren \mathcal{A} und \mathcal{B} geltende, Trotter-Suzuki-Zerlegung, die im Prinzip in beliebiger Ordnung angewendet werden kann [Suz86]. In dieser Arbeit wurde, wenn nicht explizit etwas anderes gesagt ist, eine Trotter-Suzuki-Zerlegung 2. Ordnung verwendet, die sich zu

$$e^{-\Theta(\mathcal{A}+\mathcal{B})} \approx (e^{\tau(\mathcal{A}+\mathcal{B})})^m \quad \text{mit} \quad e^{\tau(\mathcal{A}+\mathcal{B})} = e^{\frac{\tau}{2}\mathcal{A}} e^{\tau\mathcal{B}} e^{\frac{\tau}{2}\mathcal{A}} + \mathcal{O}(\tau^3) \quad (2.6)$$

und $\tau = -\frac{\theta}{m}$ schreibt. Um den Fehler klein zu halten, muß also in den numerischen Rechnungen $1 \gg \frac{\Theta}{m}$ gelten. Die Ordnung der Zerlegung macht man sich am einfachsten durch den Vergleich der Taylorentwicklung der beiden Seiten von (2.6) klar [Rae96].

2.4 Hubbard-Stratonovich-Zerlegung

Durch Trotter-Suzuki wird die Rechnung in die Hintereinanderausführung der Operatoren $\exp(\mathcal{H}_0)$ und $\exp(\mathcal{H}_{\text{int}})$ zerlegt, die jeweils in einer anderen Basis diagonalisiert werden können. Jedoch ist der Wechsel der Basis, um von einem Operator zum anderen zu gelangen, mit erheblichem Rechenaufwand verbunden. Numerisch effizienter ist es, zuerst einmal eine diskrete Hubbard-Stratonovich-Transformation durchzuführen [Hir83]. Diese macht den Term der elektronischen Wechselwirkung

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{\Theta}{m}U\sum_i n_{i\uparrow}n_{i,\downarrow}\right) &= \prod_i \exp\left(-\frac{\theta}{m}Un_{i\uparrow}n_{i,\downarrow}\right) \\ &= \frac{1}{2^L} \exp\left(-\frac{\theta U}{2m}\sum_i \hat{n}_i\right) \sum_{\{\sigma_i=\pm 1\}} \exp\left(\lambda \sum_i \sigma_i \hat{m}_i\right) \end{aligned} \quad (2.7)$$

zu einem Exponential eines effektiven Einteilchen-Operators. Dabei läuft i über die L Gitterplätze und es gelten die Definitionen

$$\hat{n}_i \equiv \begin{cases} n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 1 & \text{falls } U \leq 0 \\ n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} & \text{falls } U > 0 \end{cases} \quad (2.8)$$

$$\hat{m}_i \equiv \begin{cases} n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 1 & \text{falls } U \leq 0 \\ n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow} & \text{falls } U > 0 \end{cases} \quad (2.9)$$

$$\cosh(\lambda) \equiv \exp\left(\frac{\theta}{2m}|U|\right) \quad . \quad (2.10)$$

Die Elektronen wechselwirken nun nicht mehr untereinander, sondern nur mehr indirekt über das so eingeführte Ising-Hilfsfeld σ . Die darstellende Matrix des Einteilchenoperators kann genauso wie der ursprüngliche Vielteilchenterm in Diagonalgestalt notiert werden und schreibt sich dabei zu

$$\begin{pmatrix} \exp(s\lambda\sigma_1) & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \exp(s\lambda\sigma_L) \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

wobei $s \in \{1, -1\}$ die Abhängigkeit der Zerlegung vom Elektronenspin berücksichtigt. Der Term

$$\frac{1}{2^L} \exp\left(-\frac{\tau}{2}U\sum_i \hat{n}_i\right) \equiv \frac{1}{2^L} \exp\left(-\frac{\tau}{2}U\hat{N}\right) \quad (2.12)$$

führt nur zu einer Verschiebung des Nullpunktes der Energie und lässt die propagierte Wellenfunktion unbeeinflusst. Er kann daher vernachlässigt werden. Anzumerken ist dabei, daß im GQMC (2.12) im Hamiltonoperator verbleibt, um bei Halbfüllung $\mu = 0$ zu haben.

2.5 Behandlung des Hopping-Termes

2.5.1 Matrixdarstellung des Hopping-Operators

Der Hopping-Term ist bereits eine Linearkombination von Einteilchenoperatoren. Für die Berechnung des Exponentials seiner darstellenden Matrix kommen drei verschiedene Methoden zur Anwendung.

- Der Operator ist im Impulsraum diagonal. Um dies auszunutzen, muß die Wellenfunktion vor jeder Multiplikation mit $\exp(\tau H_0)$ erst einer Fouriertransformation unterworfen werden [Rae87]. Die Anwendung der 'Fast-Fourier'-Transformation macht es dabei jedoch erforderlich, sich auf Gittergrößen zu beschränken, die eine Potenz zur Basis 2 sind.
- Das Exponential wird mittels Taylor-Entwicklung, Padé-Approximation oder Eigenwertzerlegung der symmetrischen Matrix direkt berechnet. Dabei gilt es zu beachten, daß die Verfahren sich nicht immer numerisch stabil verhalten [Mat96].
- Der Operator wird mit Hilfe der Even-Odd-Zerlegung als eine Summe von Operatoren geschrieben, deren darstellende Matrizen Blockstruktur haben. In einer Dimension beispielsweise

$$\mathcal{H}_0 = -t \sum_i (c_{2i}^\dagger c_{2i+1} + c_{2i+1}^\dagger c_{2i}) - t \sum_i (c_{2i-1}^\dagger c_{2i} + c_{2i}^\dagger c_{2i-1}) . \quad (2.13)$$

Die Unterblöcke haben dabei die Form

$$\begin{pmatrix} 0 & \tau t \\ \tau t & 0 \end{pmatrix} . \quad (2.14)$$

Die Exponentialberechnung beschränkt sich auf diese Unterblöcke und man erhält Untermatrizen der Form [Hir85][Sor89]

$$\begin{pmatrix} \cosh(\tau t) & \sinh(\tau t) \\ \sinh(\tau t) & \cosh(\tau t) \end{pmatrix} = \cosh(\tau t) \begin{pmatrix} 1 & \tanh(\tau t) \\ \tanh(\tau t) & 1 \end{pmatrix} . \quad (2.15)$$

Allerdings vertauschen diese Matrizen im allgemeinen nicht miteinander. Der Fehler ist dabei in derselben Ordnung in τ wie die Trotter-Suzuki-Zerlegung von Hoppingterm und wechselwirkendem Anteil der Hubbard-Hamiltonians [Mat96]. Da die Even-Odd-Zerlegung den numerischen Aufwand von $\mathcal{O}(l^3)$ auf $\mathcal{O}(l^2)$ senkt, war sie das Mittel der Wahl in den nachfolgenden Simulationen, wenn nicht explizit etwas anderes gesagt wird.

In den Simulationen galt, wenn nicht explizit etwas anderes gesagt wird, immer $t = 1$. Dies hat den Vorteil, daß so die Energieskala schon festgelegt ist und die weiteren Parameter U und t' direkt hingeschrieben werden können. Andernfalls wären die für das Verhalten der Simulation eigentlich entscheidenden Quotienten U/t bzw. t'/t anzugeben.

2.5.2 Die Randbedingungen für das Gitter

Da die elektronische Wechselwirkung nur zwischen Elektronen am gleichen Gitterort nicht verschwindet, treten die Randbedingungen des Gitters auch nur in den Matrizen von (2.3) auf. In den hier simulierten Systemen wurde immer mit kontinuierlichen Randbedingungen gerechnet. Dies bedeutet am Beispiel des 2-dimensionalen Falles, daß bei einem $l_x \times l_y$ -Gitter die nächsten Nachbarn $c_i^\dagger c_{(i+1) \bmod l}$ bzw. $c_i^\dagger c_{(i+l-1) \bmod l}$, $l \in \{l_x, l_y\}$ in die Berechnung der Hopping-Matrix mit einfließen. Dadurch kann zwischen zwei Gitterpunkten ein maximaler Abstand r von $r = \sqrt{((l_x/2)^2 + (l_y/2)^2)}$ vorkommen.

2.6 Propagierende Slaterdeterminanten

Das PQMC ist im kanonischen Ensemble formuliert, die Anzahl der Elektronen im Gitter ist für die ganze Simulation fest. Nach der Hubbard-Stratonovich-Zerlegung sind Elektronen mit unterschiedlichem Spin darüberhinaus unterscheidbare Teilchen und bleiben es wegen des Fehlens von Spineinklapp-Prozessen auch. Deshalb kann man die Elektronenzustände für Spin \uparrow und Spin \downarrow als zwei separate Slaterdeterminanten darstellen. Die Wirkung des effektiven Einteilchen-Projektionsoperators ist dann für beide Determinanten getrennt berechenbar. Wenn $|\Psi_T\rangle$ die Testwellenfunktion bezeichnet, gilt zusammengefaßt nunmehr

$$\begin{aligned} |\Psi_0\rangle &\approx \exp(-\Theta\mathcal{H})|\Psi_T\rangle &= & \quad (2.16) \\ \sum_{\{\sigma\}} \left[\prod_{j=1}^m \exp\left(-\frac{\tau}{2}\mathcal{H}_0\right) \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{\tau}{2}U\hat{N}\right) \exp\left(\lambda \sum_i \sigma_i^j \hat{m}_i\right) \exp\left(-\frac{\tau}{2}\mathcal{H}_0\right) \right] & |\Psi_T\rangle_\uparrow \otimes |\Psi_T\rangle_\downarrow \\ & \equiv \sum_{\{\sigma\}} |\sigma\rangle & . \end{aligned}$$

Letztere Definition ist für die spätere Diskussion nützlich. Die Summe über die Felder $\{\sigma\}$ ergibt sich durch die HS-Transformation innerhalb der Trotter-Suzuki-Zerlegung. Man hat es dadurch mit dem m -fachen Produkt der Summe über Hilfsfelder σ_i am Ort i zu tun. Zu bemerken ist, daß dies den entscheidenden Schritt darstellt, in dem man im Vergleich zur exakten Diagonalisierung Speicherplatz auf Kosten der Rechenzeit spart.

Die Darstellung des Projektionsoperators als Exponential von Einteilchenoperatoren macht nun eine effiziente numerische Berechnung möglich. Denn das Bild einer Slaterdeterminante, auf die ein solcher Operator wirkt, ist wieder eine Slaterdeterminante. Dies folgt als Korollar aus dem Thouless-Theorem [Tho60][Rin80], kann aber auch direkt nachgerechnet werden [Fri90] [Ham90]. Eine Feldkonfiguration σ legt also eine Propagation im Raum der Slaterdeterminanten zu festem n_{el} fest, wobei dies in der 'imaginären' Zeiteinheit τ über die Matrixrechnungen für den jeweiligen 'Trotter-Slice'

m geschieht. Der Ausdruck 'imaginäre Zeit' ergibt sich durch Vergleich von 2.1 mit dem quantenmechanischen Zeitentwicklungsoperator für nicht explizit zeitabhängige Probleme $U(t) = \exp(-i\hbar t \mathcal{H})$, wenn $t_0 = 0$ ist. Es muß insgesamt eine Summation über 2^{Lm} Konfigurationen des Isingfeldes vorgenommen werden.

Da die Anzahl der Feldkonfigurationen schon bei kleinen Systemen mit physikalisch sinnvollen Projektionsparametern sehr groß wird (es muß ja $m \gg \theta$ und $\theta \rightarrow \infty$ gelten), kann die Summe über die σ_i nur mit einem 'Importance-Sampling' Verfahren berechnet werden. Dazu formt man (2.2) wie nachfolgend um, wobei die Notation aus (2.16) Verwendung findet;

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\langle \Psi_T | e^{-\Theta \mathcal{H}} \mathcal{O} e^{-\Theta \mathcal{H}} | \Psi_T \rangle}{\langle \Psi_T | e^{-2\Theta \mathcal{H}} | \Psi_T \rangle} = \frac{\sum_{\{\sigma\}\{\sigma'\}} \langle \sigma | \mathcal{O} | \sigma' \rangle}{\sum_{\{\sigma\}\{\sigma'\}} \langle \sigma | \sigma' \rangle} = \frac{\sum_{\{\sigma\}\{\sigma'\}} \langle \sigma | \sigma' \rangle \frac{\langle \sigma | \mathcal{O} | \sigma' \rangle}{\langle \sigma | \sigma' \rangle}}{\sum_{\{\sigma\}\{\sigma'\}} \langle \sigma | \sigma' \rangle}. \quad (2.17)$$

Das Skalarprodukt $\langle \sigma | \sigma' \rangle$ ¹ liefert noch keine geeignete Gewichtungsfunktion für das 'Importance Sampling', da es nicht positiv definit ist. Deshalb wird dessen Vorzeichen $\text{sign}(\langle \sigma | \sigma' \rangle)$ davon abgespalten und in den Erwartungswert geschoben, so daß für die gewichtete Summation schließlich gilt

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{\text{MC}} = \frac{\sum_{\{\sigma\}\{\sigma'\}} |\langle \sigma | \sigma' \rangle| \text{sign}(\langle \sigma | \sigma' \rangle) \frac{\langle \sigma | \mathcal{O} | \sigma' \rangle}{\langle \sigma | \sigma' \rangle}}{\sum_{\{\sigma\}\{\sigma'\}} |\langle \sigma | \sigma' \rangle| \text{sign}(\langle \sigma | \sigma' \rangle)}. \quad (2.18)$$

Die quantenmechanische Rechnung beschränkt sich bis hierhin letztendlich auf die Matrixmultiplikation der linearen Algebra und einer Determinantenberechnung zur Bestimmung des Monte-Carlo-Gewichtes. In den Veröffentlichungen wird dieses Vorgehen deshalb auch als 'Determinantal Approach' bezeichnet.

2.7 Erwartungswerte im PQMC

2.7.1 Einteilchen-Greensfunktionen

Um tatsächlich quantenmechanische Erwartungswerte mit (2.18) zu erhalten, müssen die Ausdrücke $\frac{\langle \sigma | \mathcal{O} | \sigma' \rangle}{\langle \sigma | \sigma' \rangle}$ berechnet werden. Dabei nützt man aus, daß alle Observablen als Linearformen von Einteilchen-Greensfunktionen zur gleichen Zeit $\langle c_i c_j^\dagger \rangle$ geschrieben werden können [Fet71][Hir85]. Es genügt daher, Ausdrücke der Form $\langle \sigma | c_i c_j^\dagger | \sigma' \rangle$ zu betrachten, die man als Vakuumerwartungswert im zu Grunde liegenden Fock-Raum auffaßt [Bla96]. Deren Berechnung läuft dann numerisch auf die Invertierung der Matrix des Skalarproduktes der propagierten Zustände hinaus, wie in Anhang B.2 gezeigt wird.

¹Zur Berechnung des Skalarproduktes zweier Slaterdeterminanten siehe Anhang B.1

2.7.2 Off-Diagonal Long-Range Order (ODLRO)

In der BCS-Theorie ist der supraleitende Ordnungsparameter die Energielücke

$$\Delta_k = - \sum_{k'} V_{k'k} u_{k'} v_{k'} \quad , \quad (2.19)$$

wenn der BCS-Grundzustand zu $|\Psi_0\rangle = \Pi_k (u_k + v_k c_{k,\uparrow}^\dagger c_{-k,\downarrow}^\dagger) |0\rangle$ notiert ist. Die Energielücke kann mittels Fouriertransformation $\Psi(x - y) = \sum_k \Psi(k) \exp(ik(x - y))$ aus den Einteilchen-Greensfunktionen im Ortsraum berechnet werden [Sch00]. Im PQMC-Algorithmus ist durch dessen Formulierung als kanonisches, effektives Einteilchenproblem der Nachweis von Supraleitung so jedoch nicht möglich. Ausdrücke der Form $\langle c_{i,\uparrow}^\dagger c_{j,\downarrow} \rangle$ können nicht direkt berechnet werden. Deshalb muß man auf andere Methoden ausweichen.

Zum Nachweis von möglicherweise supraleitendem Verhalten des Grundzustandes des Hubbard-Hamiltonians in den PQMC-Rechnungen wird daher das Auftreten von 'Off-diagonal long-range Order' verwendet. Man berechnet dazu die größten Eigenwerte von reduzierten Dichtematrizen. Dieses Konzept wurde zuerst für die Charakterisierung der Bose-Einstein-Kondensation von Penrose und Onsager verwendet [Pen56]. In der Folgezeit konnte dann von unterschiedlichen Autoren gezeigt werden, daß zum einen Supraleitung ODLRO zur Folge hat [Yan62] und umgekehrt ODLRO zum Meißner-Effekt und der Flußquantisierung führt [Sew90][Nie95]. Allerdings wird in diesen Arbeiten die Existenz eines magnetischen Feldes vorausgesetzt. In [Arr96] wurde gezeigt, daß es Hamiltonoperatoren gibt, für die man Eigenzustände findet, die in Abwesenheit eines solchen Feldes ODLRO aufweisen, ohne daß man daraus auf Supraleitung schließen könnte. Der zweifelsfreie Nachweis von ODLRO in dem durch (1.3) vorgegebenen quantenmechanischen System ist also nur ein erster Schritt, der aber natürlich zuerst einmal gemacht werden muß.

Zum Nachweis von ODLRO in den Quanten-Monte-Carlo-Rechnungen wird der größte Eigenwert der reduzierten Zweiteilchendichtematrix

$$\rho(i, j, k, l) = \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} c_{l\downarrow} \rangle \quad (2.20)$$

berechnet (siehe dazu Anhang B.3). Für die Supraleitung interessieren dabei speziell die Paar-Korrelationsfunktionen

$$\rho(i, i+m, j, j+m) = \langle \Delta_m^\dagger(i) \Delta_m(j) \rangle = \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{(i+m)\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow} c_{(j+m)\downarrow} \rangle \quad , \quad (2.21)$$

wobei diese für bestimmte Symmetrien, wie beispielsweise der lokalen s-Welle

$$\Delta_{os}^\dagger(i) = c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \quad , \quad (2.22)$$

auch relativ einfach aufgebaut sein können.

Da das Modell für die Beschreibung der HTSC verwendet wird, konzentriert man sich dabei auf Matrixelemente, die Spin-Singlett-Elektronen mit d -Wellen-Symmetrie beschreiben. Die meisten Übersichtsartikel zu diesem Thema kommen zu dem Schluß, daß die experimentellen Befunde auf diese Symmetrie hinauslaufen [Sca95][Ann96][Tsu00]. Durch eine dann notwendige Summation über die nächsten Nachbarn erhält man letztlich die Zweiteilchen-Korrelationsfunktion für die d -Wellen-Symmetrie

$$C_d(i, j) = \langle \Delta_{d_{x^2-y^2}}^\dagger(i) \Delta_{d_{x^2-y^2}}(j) \rangle \quad . \quad (2.23)$$

Sie wird mit dem Paarerzeugungs-Operator

$$\Delta_{d_{x^2-y^2}}^\dagger(i) = \sum_{\langle n.n. \rangle} g_\delta (c_{i\uparrow}^\dagger c_{i+\delta\downarrow}^\dagger - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i+\delta\uparrow}^\dagger) \quad (2.24)$$

gebildet, wobei $g_\delta = 1$ für Nachbarschaft in x-Richtung und $g_\delta = -1$ für Nachbarn in y-Richtung. Im Impulsraum hat der Paarerzeuger der d -Wellen-Symmetrie die Form

$$\Delta_{d_{x^2-y^2}}^\dagger(k) = 2(\cos(k_x) - \cos(k_y))(c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger - c_{k\downarrow}^\dagger c_{-k\uparrow}^\dagger) \quad . \quad (2.25)$$

Dabei ist k ein Vektor des reziproken Gitters und die Längenskala ist so gewählt, daß $a = 1$ für die Gitterperiode a gilt. Wie die Symmetrie die Paar-Wechselwirkung an der Fermikante bestimmt, ist in [Sca95] schematisch dargestellt.

Allerdings hat (2.23) unabhängig von der konkreten Symmetrie auch schon im wechselwirkungsfreien System einen von 0 verschiedenen Wert. Diesen Beitrag verursachen die Einteilchenkorrelationen

$$\overline{C}(i, j)_s = \langle c_{is}^\dagger c_{js} \rangle \quad , \quad s \in \{\uparrow, \downarrow\} \quad , \quad (2.26)$$

die in den ersten Termen der diagrammatischen Entwicklung mit renormierten Greensfunktionen auftauchen [Whi89]. Diese Korrelationen klingen mit dem Abstand $\|\vec{i} - \vec{j}\|$ zwischen den Teilchen exponentiell ab. Da aber nur relativ kleine Systeme überhaupt simuliert werden können, betrachtet man gleich die Differenz aus (2.23) und (2.26)

$$C(i, j)^V = C(i, j) - \overline{C}(i, j)_\uparrow \overline{C}(i, j)_\downarrow \quad , \quad (2.27)$$

die man Vertex-Korrelationsfunktion nennt.

Kapitel 3

Simulationen mit dem PQMC

3.1 Die MC-Simulation

3.1.1 Monte-Carlo-Moves

Es wurden diverse Verfahren für die Durchführung eines 'Move'-Versuches beim 'Importance Sampling' über die Ising-Hilfsfelder σ (siehe dazu Anhang C) entwickelt.

3.1.2 Single-Spin-Flip

Mit Hilfe der Einteilchen-Greensfunktionen lässt sich die Akzeptanz-Wahrscheinlichkeit \mathcal{R} für die Annahme einer neuen Spinkonfiguration σ_{neu} , die durch Umklappen eines einzelnen Ising-Spins σ_i^j im 'Trotter-Slice' j der Feldes σ_{alt} entsteht, schreiben als

$$\mathcal{R} = \prod_{s=\uparrow,\downarrow} (1 + \Delta_{ii}^s(j) \langle c_i(j) c_i^\dagger(j) \rangle_s) \quad , \quad (3.1)$$

mit $\Delta_{ii}^s(j) = \exp(s\lambda(\sigma_i^{j(\text{neu})} - \sigma_i^{j(\text{alt})})) - 1$ [Loh89]. Die Variable s bezeichnet dabei den Elektronenspin und es ist $s = 1$ für die Elektronen mit Spin \uparrow und $s = -1$ für die Elektronen mit Spin \downarrow . Bei den nachfolgenden Formeln wird der Spinindex zum Zwecke der besseren Übersichtlichkeit fallen gelassen, alles weitere gilt jeweils separat für beide der propagierten Slaterdeterminanten.

Wird der Move angenommen, ergibt sich die Matrix

$$\mathbf{G}(j) \quad \text{mit} \quad G_{kl}(j) = \langle c_k(j) c_l^\dagger(j) \rangle \quad (3.2)$$

aus den neuen Einteilchen-Greens-Funktionen zur imaginären Zeit j [Loh89] zu

$$\mathbf{G}(j)^{\text{neu}} = \mathbf{G}(j)^{\text{alt}} - \frac{1}{\mathcal{R}} \mathbf{G}(j)^{\text{alt}} \Delta(j) (\mathbf{1} - \mathbf{G}(j)^{\text{alt}}) \quad . \quad (3.3)$$

Dabei bezeichnet Δ die Matrix, die außer dem Eintrag Δ_{ii} nur Elemente gleich 0 besitzt. Zu den Einteilchen-Greens-Funktionen zu einer anderen imaginären Zeit l kommt man, indem man an die Matrix zur Zeit j geeignete Matrizen anmultipliziert, die die Propagation rückgängig machen bzw. weiterführen, bis man zum gewünschten Trotter-Time-Slice kommt. Dieses als 'Wrapping' bezeichnete Verfahren ist möglich, da die Matrix \mathbf{D}^{-1} in (B.6) für alle imaginären Zeiten gleich und das Matrixprodukt assoziativ ist. Durch das Abspeichern von Produkten solcher 'Wrapping'-Matrizen kann man auch den Sprung über mehrere Trotter-Slices effizient berechnen [Loh89].

3.1.3 Cluster-Move-Algorithmus

Beim Cluster-Algorithmus werden mehrere der $m \times L$ Spins des Hilfsfeldes σ gleichzeitig umgedreht und die Übergangswahrscheinlichkeit direkt über die Skalarprodukte der propagierten Slaterdeterminanten berechnet. Das macht diesen Algorithmus langsamer als das Verfahren mit Single-Spin-Flip. Allerdings sind die Ergebnisse im Gegensatz etwa zum Single-Spin-Flip-Algorithmus unabhängig von zusätzlichen Simulationsparametern wie etwa der Wiederholungsrate von notwendigen, zusätzlichen numerischen Stabilisierungsmaßnahmen [Hus96a].

3.1.4 Numerische Stabilisierung

Beim Cluster-Move-Algorithmus müssen die Einteilchen-Greensfunktionen in den Trotter-Slices über die darstellenden Matrizen des Hubbard-Hamiltonoperators explizit berechnet werden. Dies ist auch beim Single-Spin-Flip-Algorithmus notwendig, z.B. für die Berechnung der Startkonfiguration oder aber zur numerischen Stabilisierung, da sich Rundungsfehler in der Berechnung von (3.3) aufsummieren [Sca81] [Bla81]. Die üblichen Slaterdeterminanten als Testwellenfunktion bestehen dabei aus n_{el} Einteilchenwellenfunktionen, die orthogonal zueinander sind. Bei der unabhängigen Propagation der Einteilchenzustände durch die Trotter-Slices geht deren Orthogonalität verloren. Auf Grund der endlichen numerischen Rechengenauigkeit kann so auch die gesamte Information über den fermionischen Zustand abhanden kommen. Um dies zu verhindern, benutzt man als numerische Stabilisierungstechnik das 'Modified Gram-Schmidt'-Verfahren. Dabei wird die propagierte $l \times n_{\text{el}}$ -Matrix der Einteilchenzustände in das Produkt aus einer $l \times n_{\text{el}}$ -Matrix Q mit n_{el} orthonormierten Spaltenvektoren (Einteilchenzustände) und eine obere $n_{\text{el}} \times n_{\text{el}}$ -Dreiecksmatrix R zerlegt. Wegen der Assoziativität der Matrixmultiplikation und der Homomorphie der Determinantenabbildung bezüglich der Matrixmultiplikation genügt es dann, die Propagation mit der Matrix Q fortzuführen [Loh89]. Diese Zerlegung ist ein Spezialfall der allgemeinen QR -Zerlegung, die numerisch stabiler implementiert werden kann, allerdings auch langsamer ist [Gol89].

Ausreichende Stabilisierung sollte dann erreicht sein, wenn das Ergebnis nicht mehr von der Anzahl der Orthogonalisierungen in einem einzelnen Trotter-Slice abhängt.

3.2 Das Vorzeichenproblem im PQMC

Vom Vorzeichenproblem oder 'Minus Sign'-Problem spricht man, wenn der Nenner von (2.18), der fortan mit $\langle \text{sign} \rangle$ abgekürzt wird, sehr kleine Werte annimmt. Um das Emery-Modell für die HTSC als effektives Ein-Band-Modell rechnen zu können, sollte $U/t \approx 8$ gesetzt sein [Son95][Bac91][Hyb89]. Bei dieser starken Korrelation gilt $\langle \text{sign} \rangle < 0.1$ schon bei kleinen Gittergrößen von 4×4 Punkten. Entsprechend schlecht wird die statistische Effizienz der Quanten-Monte-Carlo-Algorithmen. Damit ist dies derzeit das offensichtlichste Problem, welches die Anwendbarkeit der QMC-Verfahren auf die Fragen zur Hochtemperatursupraleitung einschränkt. In dieser Arbeit wurde überwiegend mit $U = 4$ gerechnet. Bei dieser Wechselwirkung erhält man bei nicht allzu großen Systemen noch konvergente Ergebnisse, gleichwohl sich die Einflüsse des Vorzeichens schon bemerkbar machen.

3.2.1 Erklärungen für das Vorzeichenproblem

Das Vorzeichenproblem tritt bei all jenen QMC-Rechnungen auf, die als effektives Einteilchenproblem mittels Trotter-Suzuki- und Hubbard-Stratonovich-Zerlegung formuliert werden. In all diesen Verfahren wurde festgestellt, daß das mittlere Vorzeichen exponentiell mit zunehmendem Projektionsoperator (was einer abnehmenden Temperatur im GQMC entspricht) verschwindet [Loh90][Ass90], also

$$\langle \text{sign} \rangle = \alpha \exp(-\beta) \quad (3.4)$$

gilt. α hängt dabei von Simulationsparametern wie der Systemgröße, der Höhe der elektronischen Wechselwirkung U , der genauen Testwellenfunktion Ψ_T (PQMC) und dem chemischen Potential (GQMC) bzw. der Elektronenzahl (PQMC) ab. S. Sorella wies dabei auf den Zusammenhang zwischen der Abhängigkeit des mittleren Vorzeichens von der genauen Füllung und der energetischen Entartung des wechselwirkungsfreien Systems an der Fermikante hin [Whi89B]. In der Tat bestätigten all die anderen veröffentlichten Untersuchungen, daß das Vorzeichenproblem bei Elektronenfüllungen weniger gravierend ist, deren Fermienergie im wechselwirkungsfreien System außerhalb eines energetisch entarteten Einteilchenmultipletts liegt. Man unterscheidet deshalb heutzutage zwischen Simulation mit 'Open-Shell'-Füllung und Rechnungen mit 'Closed-Shell'-Elektronenkonfiguration [Loh90][Ass90][Bor92].

Außerdem haben sich im Laufe der Jahre verschiedene, teilweise speziell auf die jeweilige QMC-Methode bezogene Ansätze etabliert, wie man das Auftreten des Vorzei-

chenproblems erklären kann. In [Lin92] wird an Hand des mit den Paulimatrizen ρ_ξ , $\xi \in \{x, y, z\}$, formulierten einfachen Beispielhamiltonians

$$\mathcal{H} = a\rho_x + b\rho_y \quad (3.5)$$

gezeigt, daß im GQMC allein schon eine ungeschickte Formulierung des physikalischen Problems ein Vorzeichenproblem zur Folge haben kann. Dort wird vorgerechnet, daß durch eine unitäre Transformation mit dem Operator $\mathcal{U} = \exp(-i\frac{\pi}{4}\rho_x)$ die bei der direkten Spurbildung in (3.5) auftretenden, sich gegenseitig egalisierenden Beiträge mit unterschiedlichen Vorzeichen vermieden werden können. Analog dazu kann auch eine ungeeignete Hubbard-Stratonovich-Zerlegung die Vorzeichenprobleme verschärfen [Bat93].

Im PQMC und im DMC wird darüberhinaus das Verschwinden von $\langle \text{sign} \rangle$ durch eine unbehinderte Propagation der Testwelle $\Psi'(t)$ über die Nodengrenze $N = \{\Psi | \langle \Psi_0 | \Psi \rangle = 0\}$ hinweg erklärt [Fah91]. Diese Sichtweise dient als Ausgangspunkt für den Ansatz, dem Vorzeichenproblem mittels einer Beschränkung der propagierten Slaterdeterminante beizukommen. Konkret wird nur über Hilfsfelder summiert, für die $\langle \Psi_c | \Psi_p(i) \rangle > 0$, $i = 1 \dots m$, gilt, wenn m wieder die Anzahl der 'Trotter-Slices' ist und Ψ_c eine Slater-determinante bezeichnet, die dem tatsächlichen Grundzustand möglichst nahe kommen muß. Falls $\Psi_C = \Psi_0$, wäre dieses Vorgehen dann exakt. Im DMC kann der Algorithmus für diesen Ansatz sehr effizient umgesetzt werden. Er wird in [Zha96] genauer beschrieben und dort als 'Constraint Path Monte Carlo' (CPMC) bezeichnet. Da das Verfahren für $\Psi_C \rightarrow \Psi_0$ exakt wird, war es naheliegend, die so erhaltenen Energien zumindest als eine obere Grenze für die tatsächliche Grundzustandsenergie zu sehen. Daß die Dinge allerdings nicht so einfach liegen, kann man in [Zha96] nachlesen.

3.2.2 Simulationen ohne Vorzeichenproblem

Simulationen, die ohne weiteres ohne Vorzeichenproblem ablaufen, sind für geeignete Parametersätze für alle Verfahren möglich. Das PQMC mit dem 1-D-Hubbard-Modell hat bei der Wahl einer geeigneten Testwellenfunktion kein Vorzeichenproblem [Lin92]. Und auch in den 2-D-Hubbard-PQMC-Simulationen verschwindet auf Grund bestimmter Symmetrien bei bestimmten Einstellungen der Simulationsparameter das Vorzeichenproblem.

Negatives U

Ein Ising-Spin σ_i der in Kapitel 2.4 eingeführten Hubbard-Stratonovich-Zerlegung koppelt bei unterschiedlichem Vorzeichen der elektronischen Wechselwirkung U laut (2.9) an eine jeweils andere physikalische Größe an. Bei positivem U ist es der Gesamtspin $\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}$ am Ort i , für negatives U hingegen die Gesamtladung $\hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}$. Dadurch

ergibt eine Propagation bei fester Feldkonfiguration mit einer Testwellenfunktion der Form $|\Psi_T\rangle_{\uparrow} = |\Psi_T\rangle_{\downarrow}$ bei negativem U für beide Spinrichtungen ein identisches Monte-Carlo-Gewicht. Ein Vorzeichenproblem tritt bei solchen Simulationen also nicht auf, da das Ergebnis der Multiplikation beider Skalarprodukte immer größer 0 ist. In [Bat93] wird jedoch gezeigt, daß es für $U > 0$ keine Hubbard-Stratonovich-Zerlegung mit einem Ising-Hilfsfeld geben kann, bei der \uparrow - und \downarrow -Spins an die gleiche Größe koppeln und gleichzeitig die Vorzeichen aller Vorfaktoren unabhängig von der Feldkonfiguration sind.

Halbfüllung

Kann man das Gitter, auf dem der Hamiltonoperator definiert ist, in zwei Untergitter A und B zerlegen, so daß ein Hopping nur von A nach B und umgekehrt stattfindet, ist man in der Lage mittels der kanonischen partiellen Teilchen-Loch-Transformation,

$$\begin{aligned} \text{Ortsraum : } \quad c_{i\uparrow}^{\dagger} &\rightarrow d_{i\uparrow}^{\dagger} & , \quad c_{i\downarrow}^{\dagger} &\rightarrow (-1)^i d_{i\downarrow} \\ c_{i\uparrow} &\rightarrow d_{i\uparrow} & , \quad c_{i\downarrow} &\rightarrow (-1)^i d_{i\downarrow}^{\dagger} \\ k-\text{Raum : } \quad c_{k\uparrow}^{\dagger} &\rightarrow d_{k\uparrow}^{\dagger} & , \quad c_{k\downarrow}^{\dagger} &\rightarrow d_{(k+\pi)\downarrow} \\ c_{k\uparrow} &\rightarrow d_{k\uparrow} & , \quad c_{k\downarrow} &\rightarrow d_{(k+\pi)\downarrow}^{\dagger} \end{aligned} \quad (3.6)$$

das positiv U -Modell auf ein negativ U -Modell abzubilden [Mic90]. Dabei ist in dem hier interessierenden zweidimensionalen Fall $(-1)^i \equiv (-1)^{(x_i+y_i)}$ definiert, wobei der Gittervektor R_i zu $\vec{R}_i = (x_i, y_i)$ geschrieben ist. Denn dadurch behält der transformierte kinetische Teil des Hubbard-Hamiltonians seine Form und im Wechselwirkungsbeitrag gilt $\hat{n}_{i\downarrow} \rightarrow 1 - \hat{n}_{i\downarrow}$.

Obige Transformation deckt eine Spin-Ladungs-Symmetrie auf. Schreibt man den Spin-Operator \vec{S}_i für den Ort i in zweiter Quantisierung zu

$$\vec{S}_i = \frac{1}{2} \xi_i^{\dagger} \vec{\rho} \xi_i \quad \text{mit} \quad \xi_i = \begin{pmatrix} c_{i\uparrow} \\ c_{i\downarrow} \end{pmatrix}, \quad (3.7)$$

wobei $\vec{\rho} = (\rho^+, \rho^-, \rho_z)$ über $\rho^{\pm} = \rho_x \pm i\rho_y$ mittels der Pauli-Matrizen aus (3.5) definiert ist, führt (3.6) zu

$$\begin{aligned} S_i^+ &\leftrightarrow (-1)^i \Delta_{os}^{\dagger}(i) \\ S_i^- &\leftrightarrow (-1)^i \Delta_{os}(i) \\ 2S_i^z = n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow} &\leftrightarrow n_i - 1 = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 1 \end{aligned} \quad (3.8)$$

mit dem Δ_{os} aus (2.22). Man kann also Paar-Korrelationen und Ladungsdichte für negatives U über die Spin-Observablen im repulsiven Modell und umgekehrt gewinnen.

Die Teilchen-Loch Symmetrie gewährleistet auch, daß das PQMC bei Halbfüllung mit positivem U ohne Vorzeichenproblem gerechnet werden kann, wenn $t' = 0$ in (1.3)

gesetzt ist. Im Gegensatz zum GQMC [Hir85] hat man im PQMC allerdings noch zusätzlich darauf zu achten, auch die Testwellenfunktion korrekt zu berechnen. Es gilt für die Transformation (3.6) der k -Raum-Testwelle $|\Psi_T\rangle_{\downarrow} = \prod_{k \in \Psi_T} c_{k\downarrow}^{\dagger} |0\rangle$

$$|\Psi_T\rangle_{\downarrow} \rightarrow \prod_{k \in \Psi_T} d_{(k+\pi)\downarrow} \prod_{k \in K} d_{k\downarrow}^{\dagger} |0\rangle \quad , \quad (3.9)$$

wenn K die Menge aller reziproken Gittervektoren der 1. Brillouin-Zone des Einteilchenraumes bezeichnet [Lin92]. Die Lochoperatoren $d_{k\downarrow}$ wirken also nun auf die Slater-determinante $\prod_{k \in K} d_{k\downarrow}^{\dagger} |0\rangle$ anstelle der Teilchenoperatoren $c_{k\downarrow}$, die fermionische Einteilchenzustände aus dem Vakuumzustand $|0\rangle$ erzeugten. Wie beim attraktiven Modell ist das Vorzeichenproblem nur dadurch gelöst, daß die Skalarprodukte für Spin \uparrow und Spin \downarrow dasselbe Vorzeichen haben; es gilt konkret [Hir85]

$$\langle \sigma | \sigma' \rangle_{\uparrow} = \langle \sigma | \sigma' \rangle_{\downarrow} e^{\lambda \sum_{i,m} \sigma_i^m} \quad . \quad (3.10)$$

Da die Transformation der Testwelle abseits der Halbfüllung zu unterschiedlichen Teilchenzahlen für Spin- \uparrow - und Spin- \downarrow -Elektronen führt, gelingt es damit dort nicht mehr, das Vorzeichenproblem aus den Simulationen zu eliminieren. Im GQMC muß man analog $\mu = 0$ voraussetzen, wenn μ das chemische Potential bezeichnet. Dies entspricht bei einer Formulierung des Hamiltonoperators wie in [Hir85] dann ebenfalls der Halbfüllung.

Der Operator \vec{S}_i aus (3.7) taucht auch bei einer Näherungsrechnung von (1.1) mit $U \gg t$ auf. Das dadurch erhaltene t -J-Modell ist durch den Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (1 - n_{i,-\sigma}) c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} (1 - n_{j,-\sigma}) + J \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{S}_i \vec{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j) \quad , \quad (3.11)$$

wobei $J = \frac{t^2}{U}$, definiert. Bei Halbfüllung verschwindet der Hoppingterm und es gilt dann $n_i \equiv 1$. Das Modell reduziert sich auf den Heisenbergoperator.

3.2.3 Dichteschätzung

In den folgenden Abschnitten wird immer wieder mit Histogrammen argumentiert. Da diese nicht einfach an eine parametrische Verteilung angepaßt werden konnten, werden sie in einzelnen Kapiteln mit einer nicht parametrischen Dichteschätzung behandelt. Als Verallgemeinerung der Histogrammtechnik, bei der die Höhe einer normierten Säule S_x der Breite h über

$$f(x) = \frac{1}{nh} |\{X_i | X_i \in S_x\}| \quad (3.12)$$

mit n als Anzahl der Meßwerte X_i gegeben ist, wird eine Verteilung mittels eines Kernschätzers $K(x)$ über

$$f(x) = \frac{1}{nh} \sum_{i=1}^n K\left(\frac{x - X_i}{h}\right) \quad (3.13)$$

erzeugt. In dieser Arbeit wurde dabei für $K(x)$ immer die Normalverteilung gewählt, also

$$K(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}h} \exp\left(-\frac{x^2}{2h^2}\right) . \quad (3.14)$$

Die Breite h bestimmt dabei die Intervalllänge, auf dem die Verteilungen geglättet werden. Um auch an den Rändern der Verteilung noch gute Glättungseigenschaften zu haben, wird mit einem $h = h' \cdot d_k(X_i)$ gerechnet, wobei $d_k(X_i) = |X_i - X_k|$, wenn X_k der k -te nächste Nachbarmeßwert von X_i ist [Sil86]. Da nur Information über die benachbarten Meßwerte vorliegt, galt $h' = 1$. Die in dieser Arbeit zu sehenden Verteilungen beruhen dabei immer auf $N_x \approx 500$ Stützstellen. Für die einzelnen Abbildungen ist jeweils $\bar{h}_k = \frac{1}{m} \sum_{X_i} h_k(X_i)$ angegeben, wenn m die Anzahl der Meßwerte ist. Dabei wurde k an die einzelne Simulation mittels $k = \frac{m}{N_x}$ angepaßt. Die Dichteschätzung hat gegenüber der Histogrammtechnik den Vorteil, unabhängig von der genauen Lage und Breite irgendwelcher Kanäle zu sein. Außerdem können die so gewonnenen Verteilungen schon bei einer schlechten Statistik der Meßreihe, also nur wenigen Beiträgen, als Funktion über den Erwartungswertbereich aufgetragen werden.

Um den Verlauf von Verteilungen zu unterschiedlichen Simulationseinstellungen miteinander zu vergleichen, werden des öfteren mehrere Graphen in einer Abbildung zusammengefaßt. Um die Übersicht durch die Fluktuation der Graphen nicht verloren gehen zu lassen, wurden diese wo nötig in der y-Achse gegeneinander verschoben eingezeichnet. Der genaue Wert der Verschiebung ist dabei bei den meisten Bildern leicht durch die Lage der Ausläufer der Verteilungen erschließbar und wird nicht jedesmal neu mit angegeben.

3.2.4 Numerische Stabilität und Vorzeichenproblem

Das Vorzeichen eines Monte-Carlo-Schrittes ergibt sich aus der Determinante des Skalarproduktes der propagierten Testwellenfunktion (siehe Kapitel B.1). Generell kann man sagen, daß deren korrekte numerische Berechnung einige Aufmerksamkeit erfordert. So kann man aus der Konditionszahl

$$\kappa(A) = \frac{\|A\|}{\|A^{-1}\|} , \quad (3.15)$$

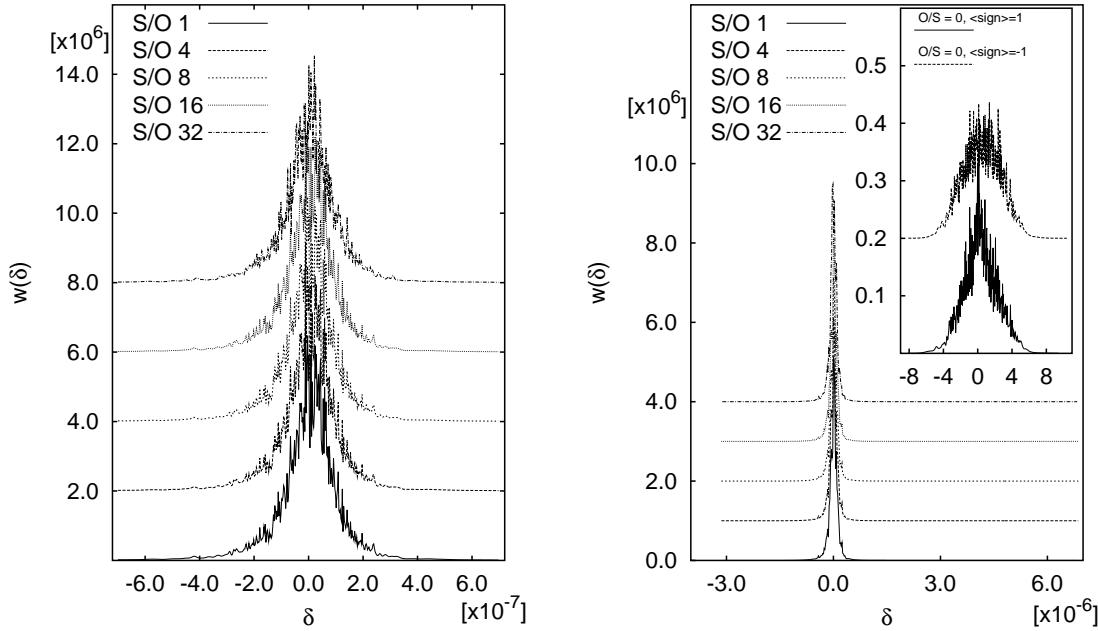
wobei $\|\cdot\|$ eine geeignete Matrixnorm bezeichnet, nicht auf den Wert der Determinante schließen. Dabei gilt ein großes $\kappa(A)$ als Anzeichen dafür, daß die Matrix numerisch schlecht konditioniert ist [Gol89]. Dies macht sich in den Simulationen zuallererst dadurch bemerkbar, daß $\langle \text{sign} \rangle$ auch von der Art und Häufigkeit von Stabilisierungsmaßnahmen abhängt, wie sie in Abschnitt 3.1.4 angesprochen wurden. Um den nicht immer eindeutigen Zusammenhang zwischen Konditionszahl (3.15) und Genauigkeit der Monte-Carlo-Determinante zu umgehen, wird mit den Systemen bei Halbfüllung argumentiert.

In den Abbildungen 3.1 bis 3.3 sind dabei exemplarisch Histogramme von

$$\delta = \log \left(\frac{\langle \sigma | \sigma' \rangle_{\uparrow}}{\langle \sigma | \sigma' \rangle_{\downarrow} \exp \left(\sum_{i,m} \lambda \sigma_i^m \right)} \right) = \log (\langle \sigma | \sigma' \rangle_{\uparrow}) - \log (\langle \sigma | \sigma' \rangle_{\downarrow}) - \sum_{i,m} \lambda \sigma_i^m \quad (3.16)$$

zweier unterschiedlicher Systemgrößen bei verschiedenen Wechselwirkungen und variabler Anzahl an Orthogonalisierungsschritten pro Feldkonfiguration für jeweils einen einzelnen MC-Lauf mit dem Cluster-Move-Verfahren zu sehen. Es wurde mit $\tau = \frac{1}{8}$ und insgesamt 64 'Trotter-Slices' gerechnet. Bei exakter Rechnung gilt wegen (3.10) $\delta = 0$. Die Histogramme in den Abbildungen umfassen jeweils mindestens 15000 Meßwerte.

Bei den 4×4 -Systemen in den Abbildungen 3.1 und 3.2 liegt bei einer mittleren Anzahl von Orthogonalisierungsschritten der Fehler in der Größenordnung $\approx 10^{-6}$. Bemerkenswert ist, daß dieser dabei relativ unabhängig von der elektronischen Wechselwirkung ist. Allerdings steigt er mit größer werdendem U an, wenn nur ein Orthogonalisierungsschritt am Ende der Propagation ausgeführt wird ($S/O = 32$). Die rechten Insets zeigen darüber hinaus, daß die numerische Berechnung der Determinante ohne Orthogonalisierungsschritte eine deutlich schlechtere Genauigkeit aufweist.



(a) Ausschnitt an den Maxima der Verteilungen

(b) Gesamter Wertebereich der Verteilung

Abbildung 3.1: δ aus (3.16), 4×4 -System mit $U=2$ S/O bedeutet Slices zwischen zwei Orthogonalisierungsschritten; $\bar{h}_k \approx 3 \cdot 10^{-9}$ (im Inlet $\bar{h}_k \approx 1 \cdot 10^{-2}$). Simulationsdaten $\langle n \rangle = 1$, $\tau = \frac{1}{8}$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices'.

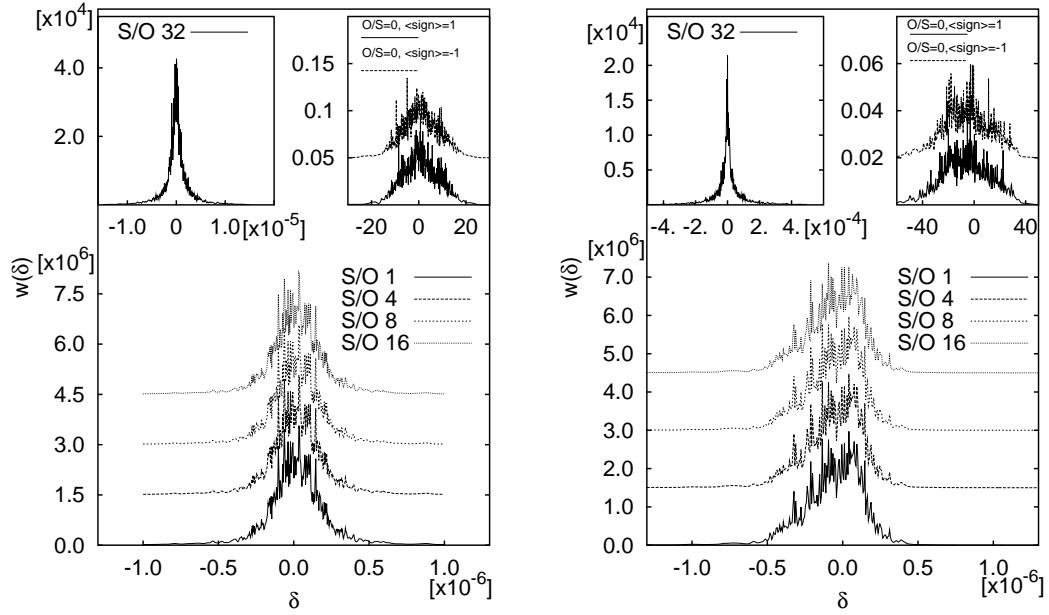
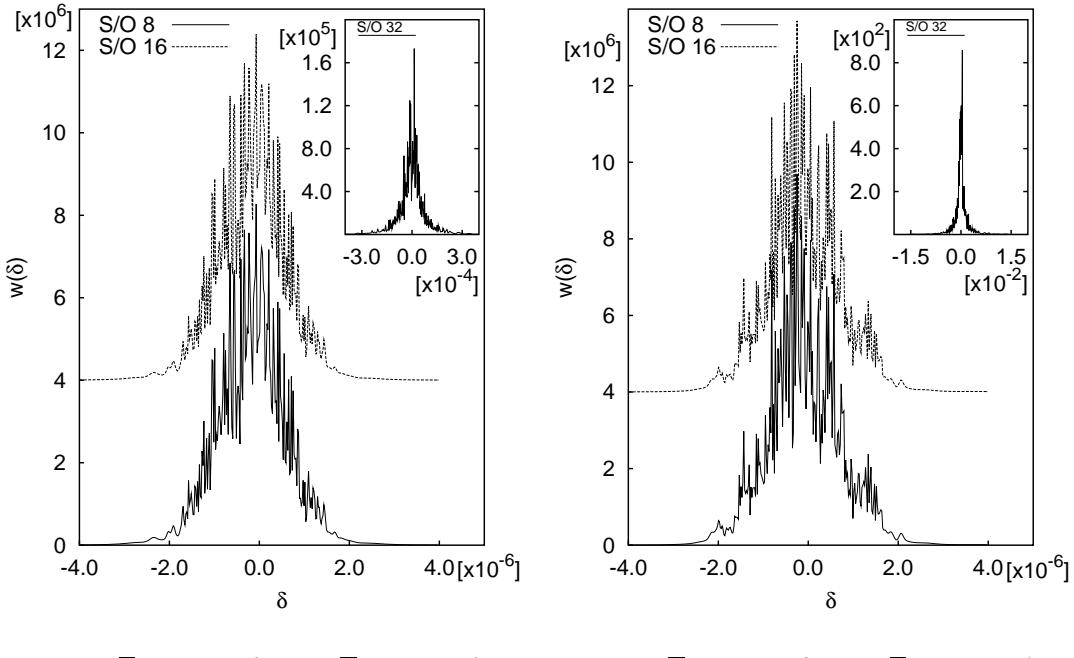
(a) $U=4, \bar{h}_k \approx 6 \cdot 10^{-9}$ ($\bar{h}_k \approx 2 \cdot 10^{-7}$ Inlet links, $\bar{h}_k \approx 5 \cdot 10^{-2}$ Inlet rechts)(b) $U=6, \bar{h}_k \approx 4 \cdot 10^{-9}$ ($\bar{h}_k \approx 7 \cdot 10^{-5}$ Inlet links, $\bar{h}_k \approx 1 \cdot 10^{-1}$ Inlet rechts)

Abbildung 3.2: δ aus (3.16), 4×4-System, Simulationsdaten $\langle n \rangle = 1$, $\tau = \frac{1}{8}$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices'.

sierungsschritte total zusammenbricht. Dies passiert bereits bei einer vergleichsweise

Systemgröße	U	S/O	min.	max.
4x4	4	1,4,8,16	$-7.0 \cdot 10^{-6}$	$4.0 \cdot 10^{-6}$
		32	$-4.0 \cdot 10^{-4}$	$1.5 \cdot 10^{-4}$
		keine	-35	30
	6	1,4,8,16	$-3.5 \cdot 10^{-6}$	$2.5 \cdot 10^{-6}$
		32	-0.1	0.1
		keine	-65	60
8x8	4	8,16	$-6.0 \cdot 10^{-6}$	$8.0 \cdot 10^{-6}$
		32	$-3.5 \cdot 10^{-4}$	$1.5 \cdot 10^{-4}$
	6	8,16	$-6.0 \cdot 10^{-6}$	$1.5 \cdot 10^{-6}$
		32	-0.15	0.15

Tabelle 3.1: Größenordnung der minimalen und maximalen Beiträge zu $\delta(\sigma)$; S/O bezeichnet die Anzahl 'Trotter-Slices' zwischen zwei Stabilisierungsschritten.



(a) $U=4, \bar{h}_k \approx 3 \cdot 10^{-8}$ (Inlet $\bar{h}_k \approx 3 \cdot 10^{-7}$) (b) $U=6, \bar{h}_k \approx 3 \cdot 10^{-8}$ (Inlet $\bar{h}_k \approx 2 \cdot 10^{-4}$)

Abbildung 3.3: δ aus (3.16), 8×8 -System, S/O bedeutet 'Trotter-Slices' zwischen zwei Orthogonalisierungsschritten; Simulationsdaten $\langle n \rangle = 1, \tau = \frac{1}{8}$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices'.

kleinen elektronischen Wechselwirkung von $U = 2$. Selbst das Vorzeichen stimmt nicht mehr; was bei Abweichungen von (3.16) in der Größenordnung $\approx \exp(10)$ allerdings nicht verwundern darf. Es bleibt dabei noch anzumerken, daß dann auch die Schwankungen von δ mit zunehmender Wechselwirkung größer werden, ganz im Gegensatz zu den Rechnungen mit angeschalteten Orthogonalisierungsschritten.

Bei den 8×8 -Systemen in Abbildung 3.3 wurde wegen der immensen Fehler bei den kleineren Systemen auf Rechnungen ganz ohne Orthogonalisierung verzichtet. Während die Systemgröße um den Faktor 4 ansteigt, erhöht sich die Breite der δ -Verteilungen dabei erkennbar schwächer um einen Faktor ≈ 2 , die Abweichung bleibt dabei in der Größenordnung von 10^{-6} . Insgesamt bestätigt sich der Eindruck, welcher von einer Überprüfung der Stabilität der Rechnungen mittels (3.15) in [Hus96a] gewonnen wurde. Demnach ist ab einer Mindestanzahl an Orthogonalisierungsschritten (hier S/O = 2) während der Propagation durch eine Feldkonfiguration für die hier untersuchten Gittergrößen keine Verbesserung der Rechengenauigkeit mehr zu erzielen. Die korrekte Berechnung der Monte-Carlo-Gewichte ohne Orthogonalisierung ist numerisch nicht möglich.

Alle Verteilungen zeigen zudem starke Ausreißer, wie sie in Abbildung 3.1(b) exemplarisch gezeigt sind. In Tabelle 3.1 sind die jeweils minimalen und maximalen Beiträ-

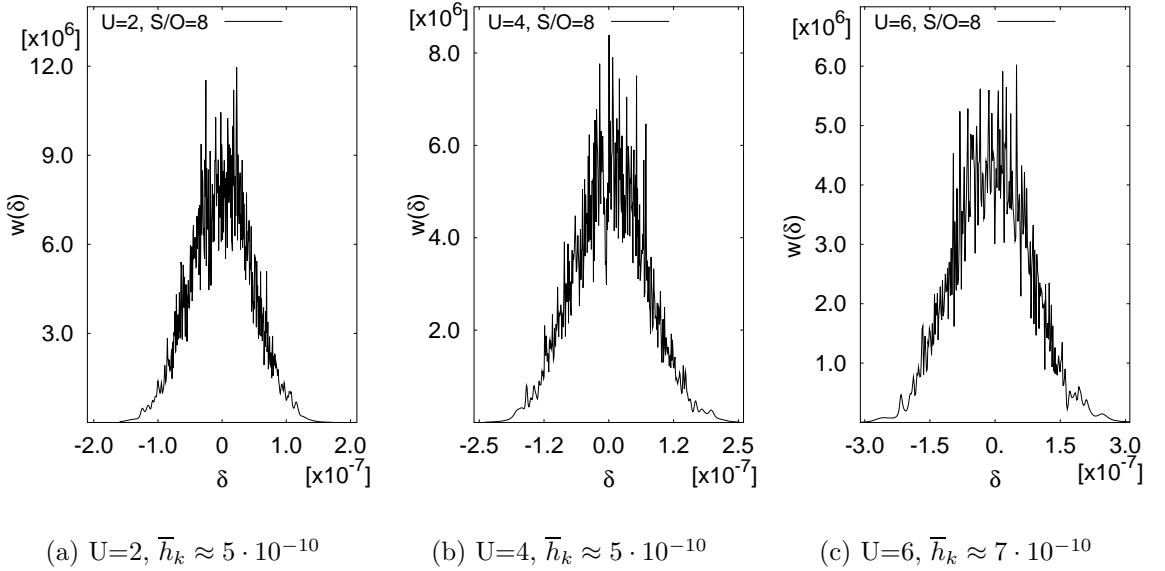


Abbildung 3.4: δ aus (3.16) Systemgröße 4×4 , 11 Elektronen mit Spin \uparrow , 5 Elektronen mit Spin $\downarrow \Leftrightarrow \langle n \rangle = 1$, $\tau = \frac{1}{8}$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices'; es wurde alle 8 'Trotter-Slices' orthonormiert.

ge zu den besprochenen Verteilungen aufgelistet. Sie deuten numerische Schwierigkeiten bei der Berechnung des Monte-Carlo-Gewichtes einzelner Hubbard-Stratonovich-Feldkonfigurationen an. Ein falsches weil negatives Vorzeichen des Skalarproduktes ergibt sich dabei allerdings nur, wenn keinerlei numerische Stabilisierung vorgenommen wird.

In den späteren Simulationen weg von der Halbfüllung wurde mit $\langle n \rangle < \frac{1}{2}$ gerechnet. Da dabei die Matrizen aus dem Skalarprodukt der propagierten Slaterdeterminanten weniger Einträge aufweisen, sollte deren Berechnung auch mindestens von der gleichen Güte wie in den in diesem Abschnitt vorgestellten Simulationen sein. Daß diese Annahme nicht ganz aus der Luft gegriffen ist, wird in den Abbildungen 3.4 und 3.5 mit Hilfe von Simulationen bei Halbfüllung gezeigt, für die $n_\uparrow \neq n_\downarrow$ gilt. Dabei hatten zumindest die Matrizen in der Berechnung der Elektronen mit Spin \downarrow die gleiche Anzahl an Einträgen wie die jeweiligen Matrizen in den späteren Simulationen mit $\langle n \rangle \approx 0.7$. Auch hier bewegen sich die maximalen Abweichungen vom theoretischen Wert im Bereich von 10^{-6} . Auffällig an den Simulationen mit $n_\uparrow \neq n_\downarrow$ ist, daß in einem einzelnen Monte-Carlo-Lauf die Ausreißer eine starke Tendenz in entweder die positive oder negative Richtung besitzen können (siehe exemplarisch dazu die Werte des 4×4 -Systems für $U = 6$ in Tabelle 3.2). Da diese statistisch verteilt sein sollten, ist dabei wohl eine zu kurze Markov-Kette die Ursache für die Asymmetrie.

Für die hier betrachteten Systeme war ab einem $S/O = 16$ keine wesentliche Änderung

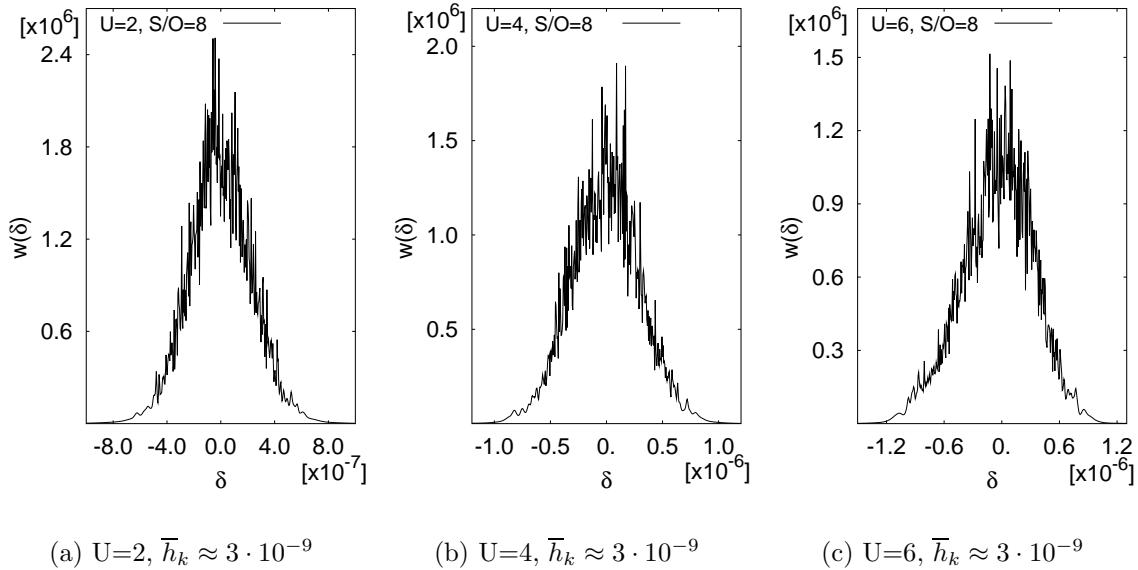


Abbildung 3.5: δ aus (3.16), 8×8 -System, 39 Elektronen mit Spin \uparrow und 25 Elektronen mit Spin $\downarrow \Leftrightarrow \langle n \rangle = 1$, $\tau = \frac{1}{8}$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices'; es wurde alle 8 'Trotter-Slices' orthonormiert.

Systemgröße	U	S/O	min.	max.
4x4	6	8	$-4.0 \cdot 10^{-7}$	$1.7 \cdot 10^{-6}$
8x8	2	8	$-3.0 \cdot 10^{-6}$	$2.0 \cdot 10^{-6}$
	4		$-5.1 \cdot 10^{-6}$	$4.5 \cdot 10^{-6}$
	6		$-3.0 \cdot 10^{-6}$	$2.6 \cdot 10^{-6}$

Tabelle 3.2: Minimale und maximale Beträge von $\delta(\sigma)$ für die Histogrammausschnitte in den Bildern 3.4-3.5. S/O bezeichnet die Anzahl an 'Trotter-Slices' zwischen zwei Stabilisierungsschritten.

mehr hinsichtlich der Abweichung von (3.16) zu beobachten. Deshalb sollte man davon ausgehen können, daß die Stabilität der Rechnung mit $S/O = 8$ auch für größere Systeme (12×12 bzw. 16×16) weiter bestehen bleibt. Da das immer positive Vorzeichen dabei nur durch die spezielle Symmetrie zwischen Spin- \uparrow - und Spin- \downarrow -Elektronen gewährleistet wurde, bleibt es allerdings fraglich, ob dieses Ergebnis auch für das Vorzeichen der Skalarprodukte der propagierten Wellenfunktionen geltend bleiben kann. Greift man sich allerdings zufällig einzelne Spinkonfigurationen im Monte-Carlo Gleichgewicht heraus, die ein negatives Vorzeichen bei entsprechenden Simulationsparametern liefern, und wiederholt die Determinantenberechnung mit massiv erhöhter Stellenzahl, wie es die Fließkommaimplementierungen in den gängigen Computer-Algebra-Systemen

beispielsweise ermöglichen, bleibt ein negatives Vorzeichen erhalten.

Um gänzlich auszuschließen, daß die variable gültige Stellenzahl der Fließkommarechnung für das Vorzeichenproblem verantwortlich ist, wurde ein Algorithmus implementiert, der Simulationen innerhalb der rationalen Zahlen ermöglicht. Dies ist möglich, da bei kontinuierlichen Randbedingungen in die Matrizen, mit deren Hilfe die Testwellenfunktion propagiert wird, letztendlich nur die Faktoren

$$\begin{aligned} \exp(\lambda s) & , \quad s \in \{1, -1\} \\ \tanh\left(\frac{\tau}{k}t\right) & , \\ \tanh\left(\frac{\tau}{k}t'\right) & , \quad k \in \{2, 4\} \end{aligned} \quad (3.17)$$

eingehen, wobei λ in Abschnitt 2.4 und τ in Abschnitt 2.3 definiert wurden. Die Parameter U , t und t' wählt man dann implizit so, daß obige Faktoren rationale Werte annehmen. Dazu können die Matrixeinträge $m_u(s) = \exp(\lambda)^s$, die die Wechselwirkung mit dem Hubbard-Stratonovich-Feld vermitteln, direkt auf einen rationalen Wert gesetzt werden. Das passende Vorgehen für den \tanh sieht man besser, wenn man beispielsweise für das Hopping zu nächsten Nachbarn

$$\tanh\left(\frac{\tau}{k}t\right) = \frac{1 - \exp(\tau t)^{\frac{2}{k}}}{1 + \exp(\tau t)^{\frac{2}{k}}} \quad (3.18)$$

schreibt. Es werden dann die $m_t = \exp(\tau t)^{\frac{1}{4}}$ auf einen rationalen Wert gesetzt, analoges gilt für t' . Die eigentlichen Parameter U und t bzw. t' berechnen sich daraus mit den Gleichungen aus Kapitel 2 zu

$$U = \frac{2}{\tau} \log(\cosh(\log(m_u(1)))) \quad , \quad (3.19)$$

und

$$\xi = \frac{4}{\tau} \log(m_\xi) \quad , \quad (3.20)$$

mit $\xi \in \{t, t'\}$. Gleichung (3.19) ergibt sich aus der Definition von λ in der Hubbard-Stratonovich-Zerlegung in Abschnitt 2.4 für $U > 0$, also dem Vorzeichen der Wechselwirkung, bei der gerade die Vorzeichenprobleme auftreten. Da die genauen Verhältnisse t/U bzw. t'/t in den Simulationen ohnehin nur in der Größenordnung von 1 eine Rolle spielen, ist man bezüglich der die Propagation vermittelnden Matrizen in den Simulationsparametern nicht sehr eingeschränkt. Um die Rechnung mit der nötigen Genauigkeit auch durchführen zu können, wurde die 'GNU Multiple Precision Arithmetic Library' (kurz GMP) verwendet [Tor04].

Die Simulationen beschränkten sich dabei auf 4×4 -Systeme, da sich dort die unnormierten ebenen Wellen aus Abschnitt 1.3, aus denen die Testwellenfunktion aufbaut wird, als

$$\cos\left(\frac{\pi}{2}lx\right), \quad l = 0, 1, 2 \quad \text{und} \quad \sin\left(\frac{\pi}{2}x\right) \quad \text{mit } x = 0, 1, 2, 3 \quad (3.21)$$

schreiben. Sie nehmen nur die Werte 1 und 0 an, lassen sich also ebenso wie die Matrixelemente mit rationalen Werten schreiben. Die korrekte Normierung der Erwartungswerte bleibt ohnehin durch 2.18 gewährleistet. Um die Rechnung innerhalb der rationalen Zahlen zu halten, mußte allerdings während der Propagation auf eine Gram-Schmidt-Orthonormierung verzichtet werden. Es konnten dennoch konvergente Ergebnisse erzielt werden, da mit im Prinzip nur durch den Speicherplatz begrenzter Genauigkeit gerechnet wurde. Die korrekte Implementierung wurde mit Hilfe von Testläufen für $U = 0$ und das Verschwinden von (3.16) bei Halbfüllung überprüft. Dabei nahm das δ bei einem 4×4 -System mit $U/t \approx 8$ Werte in der Größenordnung von 10^{-14} an, war also um einen Faktor $\approx 10^{-7}$ näher am Theoriewert als in den Rechnungen mit Fließkommaarithmetik.

Zur Berechnung der Monte-Carlo-Gewichte und damit auch zu (3.16) mußte das Produkt der Hauptdiagonale der mit Hilfe des Gaußschen Eliminationsverfahrens diagonalisierten Matrizen \mathbf{D} der Einteilchenskalarprodukte (B.2) unter Benutzung der Logarithmusfunktion in Fließkommaarithmetik dargestellt werden. Ansonsten wären Nenner und Zähler des direkt im rationalen berechneten Skalarproduktes zu groß geworden, hätten also zu viel Speicherplatz benötigt. Dies dürfte wohl der hauptsächliche Grund dafür sein, warum $\delta = 0$ nicht exakt galt. Dafür spricht jedenfalls, daß die Abweichungen vom Theoriewert nicht von dem jeweiligen Verhältnis U/t abhängen, wie Kontrollrechnungen ergaben.

Es stellte sich dabei heraus, daß der Algorithmus auch schon bei einer relativ kleinen Zahl an 'Trotter-Slices' deutlich langsamer bleibt, als die Rechnungen mit Fließkommaarithmetik. Er konnte etwas beschleunigt werden, indem man die Beschränkung auf die rationalen Zahlen für die Orthonormierungen während der Propagation aufgibt (die GMP-Lib stellt extra Konvertierungsfunktionen hierfür bereit). Dies hatte bei den (allerdings nur relativ wenigen) protokollierten Feldkonfigurationen keinen erkennbaren Einfluß auf die Genauigkeit der Monte-Carlo-Gewichte. Bei einer Orthonormierung nach jeweils 4 'Trotter-Slices' in einem 4×4 -System mit $U/t \approx 8$ ergibt sich bei Halbfüllung beispielsweise ein δ in der Größenordnung von 10^{-12} , weicht also im Vergleich mit den Rechnungen ganz im Rationalen um einen Faktor 100 mehr vom exakten Wert ab. Er ist dabei aber immer noch um ein Vielfaches genauer als die Fließkommarechnung. Insgesamt bleibt der Algorithmus jedoch immer noch um mehrere Größenordnungen langsamer als der Fließkommaalgorithmus. Dabei hängt die Geschwindigkeit der Rechnung im Rationalen unter anderem auch vom verfügbaren Hauptspeicher des Rechners ab.

Um bei der daher geringen Anzahl an tatsächlich berechneten Hubbard-Stratonovich-Feldkonfigurationen auch negative Vorzeichen in den Skalarprodukten erwarten zu können, wurde mit $U/t \approx 8$ gerechnet, wobei $t'/t \approx 0.25$ galt. Konkret war $m_u = \frac{3}{7}$, $m_t = \frac{49}{50}$ und $m_{t'} = \frac{201}{200}$ gesetzt. Es war außerdem $\tau = \frac{1}{8}$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices'. Dabei stellte sich heraus, daß schon nach ein paar Monte-Carlo-Steps (≈ 10) auch Feldkonfigurationen auftauchen, die ein negatives Vorzeichen des Skalarproduktes zwischen den

von beiden Seiten propagierten Slaterdeterminanten verursachen, trotzdem die Rechnung komplett in \mathbb{Q} stattfand. Umgekehrt wurden auch in den Standardsimulationen die Matrixeinträge auf Werte gesetzt, die den Fließkommadarstellungen rationaler Zahlen entsprechen. Damit konnte wieder eine Anzahl an Feldkonfigurationen von mehreren 10^5 gerechnet werden. Es ergab sich dabei ebenfalls kein Unterschied zu den Rechnungen, wo die Parameter U , t und t' unter der Vorgabe $t = 1$ festgelegt wurden. Das Vorzeichenproblem kann demnach nicht einfach mit der fehlenden Genauigkeit der Computerarithmetik in Zusammenhang gebracht werden, gleichwohl dessen Auftreten auch meist mit Beobachtungen verbunden ist, die auf numerische Instabilitäten hinweisen. Dieser Sachverhalt kommt in diesem und vor allem in den kommenden Abschnitten noch deutlicher zum Vorschein.

Die Rechnungen im Rationalen könnten vielleicht geeignet sein, gerade den Zusammenhang zwischen Vorzeichenwechsel und Instabilitäten in den Rechnungen besser zu verstehen. Dazu wäre es allerdings nötig, diese Simulationen um einige Größenordnungen zu beschleunigen. Dies scheint nur durch schnellere Hardware z. B. den Bau einer speziell auf dieses Problem abgestimmten Recheneinheit möglich. Voraussichtlich ist man auch dann noch auf relativ kleine Systemgrößen festgelegt. Aber es wäre möglich, damit schon Erkenntnisse zu gewinnen, die helfen können, auch die Fließkommarechnung stabiler zu machen.

In der Monte-Carlo-Simulation, wie sie hier implementiert wurde, kommt es hauptsächlich auf das Verhältnis der Absolutbeträge zweier Skalarprodukte an, wie man an Hand von (2.18) und (C.7) sieht. Die Ergebnisse in diesem Abschnitt legen nahe, daß dieses in den Fließkommarechnungen mit einer doch recht hohen Genauigkeit (10^{-6} für das größte untersuchte System) berechnet werden kann. Eine Abseits der Teilchen-Loch-Symmetrie auftretende Vorzeicheninstabilität sollte unter diesen Umständen keinen wesentlichen Effekt auf den eigentlichen Konvergenzprozeß der Markov-Kette haben. Es ergibt sich kein Hinweis darauf, daß die Konvergenz der Rechnung beim Auftreten des Vorzeichenproblems insgesamt in Frage zu stellen ist.

3.3 Verbesserung der Monte-Carlo-Statistik

In diesem Abschnitt werden einige Ansätze aufgelistet, um die Formulierung der Quanten-Monte-Carlo-Algorithmen bezüglich des Vorzeichenproblems zu verbessern. Sie kommen ohne zusätzliche Parameter (wie z.B. der Nodenwelle in [Zha96]) aus und haben alle die Trotter-Suzuki- mit einer nachgeschalteten Hubbard-Stratonovich-Zerlegung gemeinsam.

3.3.1 Unitäre Transformationen

Wo möglich, kann man den Hilbertraum einer unitären Transformation unterwerfen, welche das Vorzeichenproblem behebt. Dies ist gerade das Vorgehen bei der partiellen Teilchen-Loch-Transformation aus 3.2.2, welche jedoch die Simulationen auf den Parameterbereich mit Halbfüllung und $t' = 0$ beschränkt. Die partielle Teilchen-Loch-Transformation spielt ebenfalls eine Rolle bei der Aufdeckung einer $SO(4)$ -Symmetrie des 1-Band-Hubbard-Hamiltonians bei Halbfüllung, wenn Hopping-Terme nur für nächste Nachbarn betrachtet werden [Yan90]. Diese kann auch noch auf mehr als nur zweiteilige Gitter verallgemeinert werden¹, was aber die Einführung eines geeigneten quantisierten Magnetfeldes erfordert [Erc92]. Da in dieser Arbeit mit Hopping zu übernächsten Nachbarn gerechnet wird, jedoch kein äußeres Feld in den Hamiltonoperator einfließt, bleiben die Rechnungen mit unitären Transformationen auf Kapitel 3.2.4 beschränkt.

3.3.2 Erhaltung der globalen $SU(2)$ -Symmetrie

Der Hubbard-Hamiltonian schreibt sich mit Hilfe von (3.7) zu

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \xi_i^\dagger \xi_j + U \sum_i \left(\frac{1}{2} n_i - \frac{2}{3} \vec{S}_i^2 \right) \quad , \quad (3.22)$$

wobei $n_i = \xi_i^\dagger \xi_i$. In dieser Darstellung kann man die Invarianz des Hopping-Terms und der Summe über die n_i unter der globalen $SU(2)$ -Symmetrietransformation $g : \xi \rightarrow g \xi, g \in SU(2)$ leicht überprüfen. Auch die Summe über die \vec{S}_i ändert sich nicht, wie man mit Hilfe von

$$g^{-1} \sigma_i g = \sigma_j R_j^i \quad , \quad (3.23)$$

wobei $R \in SO(3)$, ebenfalls schnell nachrechnet [Erc97]. Für die in Abschnitt 2.4 angegebene Hubbard-Stratonovich-Zerlegung für $U > 0$ ist diese Symmetrie gebrochen und wird erst durch die Summation über das Hilfsfeld wieder hergestellt [Ass98]. In zuletzt zitiertem Paper wurde vom Autor F. F. Assaad ein erweiterter Hubbard-Hamiltonian mittels einer modifizierten Zerlegung

$$\exp\left(-\frac{\theta}{m} U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}\right) = \frac{1}{2^L} \exp\left(-\frac{\theta U}{2m} \sum_i \hat{n}_i\right) \sum_{\{\sigma_i=\pm 1\}} \exp(i\alpha \sum_i \sigma_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 1)) \quad (3.24)$$

umgeformt, der die Symmetrie schon für jede einzelne Feldkonfiguration erhält. Dabei muß $\cos(\alpha) = \exp(-\frac{\theta}{2m} U)$ gelten. Das Vorgehen brachte Verbesserungen für die Berechnung einzelner Observablen wie etwa der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen. Eine Verbesserung der Vorzeichenproblematik insgesamt ergab sich nicht.

¹Zweiteilige Gitter können derart in Untergitter A und B zerlegt werden, daß Hopping-Terme nur zwischen Gitter A und Gitter B auftreten.

3.3.3 Trotter-Suzuki-Zerlegungen höherer Ordnung

Man betrachtet wieder einen Operator der Form $\exp(-\Theta(\mathcal{A} + \mathcal{B}))$, wie er auch in Abschnitt 2.3 schon notiert war. Er soll ebenfalls Ausgangspunkt für die Betrachtungen zu Trotter-Suzuki-Zerlegungen noch höherer Ordnung sein. Die in [Suz86] angegebene formale Herleitung von Zerlegungen der Ordnung größer $\mathcal{O}(\tau^3)$ arbeitet dabei mit Kommutatoren aus Linearkombinationen der beiden Operatoren \mathcal{A} und \mathcal{B} und ist nur leicht handhabbar, wenn diese selbst wieder als Summe von kommutierenden Operatoren geschrieben werden können. Deshalb kam von Suzuki der Vorschlag, durch geeignete Wahl eines zusätzlichen Parameter a den Fehler der nächsthöheren Ordnung zu eliminieren [Suz90]. Man erhält so beispielsweise eine von Trotter als fraktal dargestellte Zerlegung

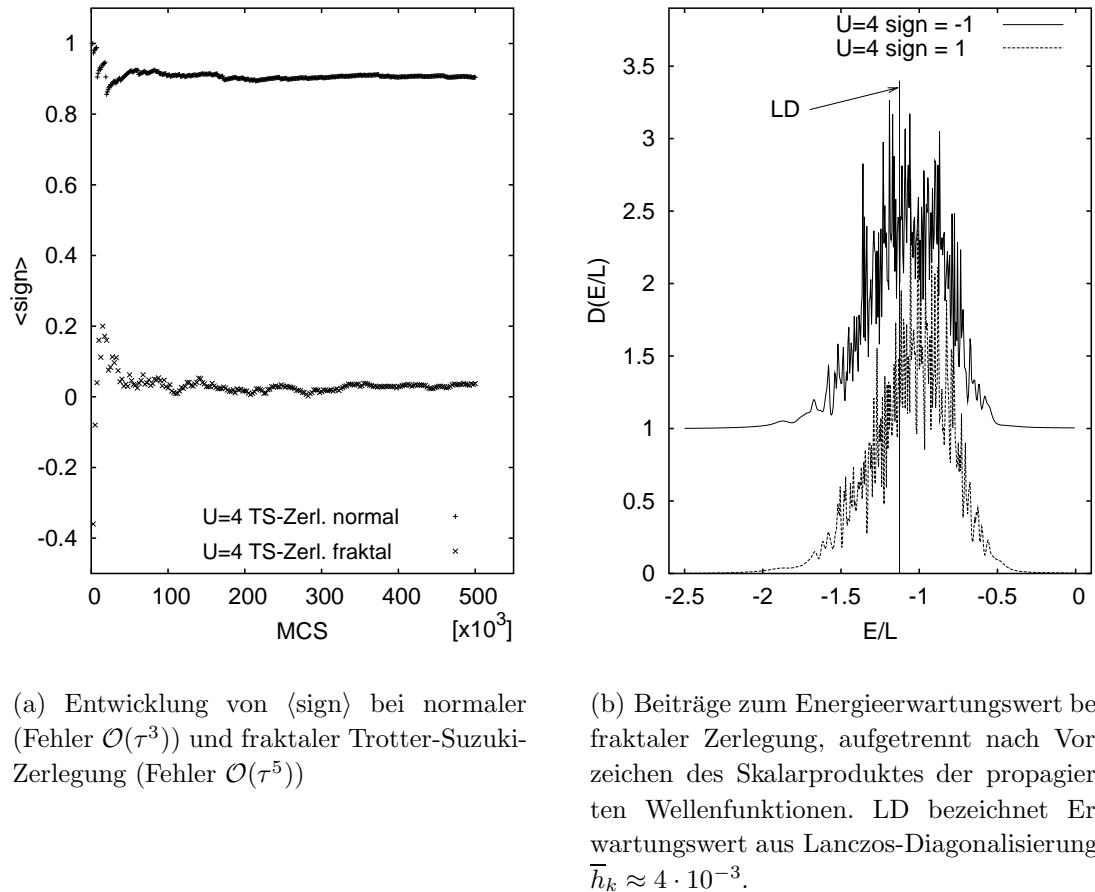


Abbildung 3.6: Simulationsdaten $\tau = \frac{1}{8}$, $L = 16$, $U = 4$, $\langle n \rangle = 0.63$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices' in beiden Simulationen. Verteilung über Energiebeiträge der normalen Zerlegung sind in Abb. 4.2 zu sehen.

4. Ordnung

$$\begin{aligned} e^{\tau(\mathcal{A}+\mathcal{B})} &= e^{a\tau\mathcal{A}/2} e^{a\tau\mathcal{B}} e^{a\tau\mathcal{A}} e^{a\tau\mathcal{B}} e^{(1-3a)\tau\mathcal{A}/2} e^{(1-4a)\tau\mathcal{B}} \\ &\times e^{(1-3a)\tau\mathcal{A}/2} e^{a\tau\mathcal{B}} e^{a\tau\mathcal{A}} e^{a\tau\mathcal{B}} e^{a\tau\mathcal{A}/2} + \mathcal{O}(\tau^5) \end{aligned} \quad (3.25)$$

mit $a = \frac{1}{4-\sqrt[3]{4}} \approx 0.41449$. Bisher konnte noch niemand zeigen, daß solche Zerlegungen das Vorzeichenproblem entschärfen. Auch für diese Arbeit durchgeführte PQMC-Rechnungen mit der Zerlegung in (3.25) führten eher zu einer Verschlechterung der Vorzeichen-Statistik, wie in Abb. 3.6(a) zu sehen ist. Bemerkenswert an Abb. 3.6(b) ist dabei, daß beide Verteilungen für positives und negatives Vorzeichen separat schon eine gute Näherung für den eigentlichen Erwartungswert darstellen, der mittels der vertikalen Linie eingezeichnet ist. Die Qualität der Näherung leidet dabei wieder durch betragsmäßig große, jedoch vereinzelt auftretende Ausreißer, wie sie schon bei der Diskussion in Abschnitt 3.2.4 auftraten. So zeigen die vollen Histogramme in Abb. 3.6(b) Einträge im Wertebereich zwischen -4 und 4 . Dieses Verhalten findet sich auch in den Simulationen mit der Standard-Trotter-Suzuki-Zerlegung wieder und wird in Kapitel 4 genauer analysiert. In einem Vorgriff sei noch darauf hingewiesen, daß die Histogramme sich mit der fraktalen TS-Zerlegung gegenüber denen der Standardrechnungen deutlich verbreitern, wie ein Vergleich mit Abb. 4.2(a) zeigt.

3.3.4 Verallgemeinerte HS-Transformationen

In Anlehnung an [Bat93] werden in diesem Abschnitt die Möglichkeiten für die Zerlegung des Wechselwirkungsterms in eine Summe von Einteilchentermen erörtert. Da dies im Hinblick auf das Vorzeichenproblem geschieht, soll hier $U > 0$ gelten. Die Hubbard-Stratonovich-Transformation aus Kapitel 2.4 kann dazu wie folgt verallgemeinert werden;

$$\exp(-\tau U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}) = \frac{1}{2} \exp(-\tau \frac{U}{2} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})) \int dy P(y) y^{n_{i\uparrow}} f(y)^{n_{i\downarrow}} . \quad (3.26)$$

Der Vorfaktor vor dem Integral auf der rechten Seite von (3.26) gewährleistet, daß

$$\int dy P(y) = 2 \quad (3.27)$$

$$\langle y \rangle = 2 \exp(\tau \frac{U}{2}) \quad (3.28)$$

$$\langle f(y) \rangle = 2 \exp(\tau \frac{U}{2}) \quad (3.29)$$

$$\langle y f(y) \rangle = 2 \quad (3.30)$$

vorausgesetzt wird. Um über ein Ising-Hilfsfeld summieren zu können, muß für $P(y)$ weiterhin gelten

$$P(y) = \alpha \delta(y - A) + \beta \delta(y - B) , \quad (3.31)$$

wobei δ die Delta-Distribution bezeichnet. Mit $f(y) = y^{-1}, \alpha = 1, \beta = 1, A = \exp(\lambda), B = \exp(-\lambda)$ und der Produktbildung über die Gitterorte erhält man wieder die Zerlegung aus Kapitel 2.4 für $U > 0$. Für $f(y) = y$ unterscheiden sich die Determinanten der Skalarprodukte von Spin \uparrow - und Spin \downarrow -Elektronen nicht. Bei $U > 0$ ist dann aber notwendig $P(y)$ nicht mehr positiv definit, wenn es die Gleichungen (3.27) bis (3.30) noch erfüllen soll [Bat93], d.h. für (3.31) o. E. $\alpha > 0$ und $\beta < 0$. Es gelingt also nicht wie im Fall $U < 0$, das Sign-Problem durch eine günstige Wahl der Hubbard-Stratonovich-Zerlegung zu umgehen.

Der Spezialfall $f(y) = y, A = 1, B = -1, \alpha = 1 + \exp(\tau \frac{U}{2}), \beta = 1 - \exp(\tau \frac{U}{2})$ gewährt einen Einblick in die Interaktion von Hubbard-Stratonovich-Zerlegung und Monte-Carlo-Integration. Denn bei $U = 0$ hat lediglich eine einzelne Feldkonfiguration $\sigma_A = \{y_{il}\}$ ein Gewicht ungleich 0. Dies ist genau dann der Fall, wenn für alle Paare i, l $y_{il} = A = 1, 1 \geq i \geq L, 1 \geq l \geq m$ gilt, wobei L die Anzahl der Gitterplätze und m die Anzahl der 'Trotter-Slices' bezeichnet. Die Zerlegung ist offenbar absolut ungeeignet für eine Monte-Carlo-Integration. Diese problematische Wahrscheinlichkeitsverteilung sollten auch kleine U nicht reparieren können und in der Tat weichen die Ergebnisse von PQMC-Simulationen mit $U > 0$ bei dieser Zerlegung von den Resultaten der exakten Diagonalisierung stark ab. Umgekehrt liefert die übliche Zerlegung mit $f(y) = y^{-1}$ bei $U = 0$ für jede Feldkonfiguration den richtigen Erwartungswert und bei nicht allzu großen Systemgrößen und elektronischen Wechselwirkungen U noch gute Ergebnisse.

Kapitel 4

Erwartungswertverteilung und MC-Vorzeichen

4.1 Erwartungswerte der Energie

Es wurden bei den in diesem Abschnitt betrachteten 4×4 -System $8 \cdot 10^5$ MCS berechnet, wobei $3 \cdot 10^5$ MCS für das Einlaufen in die Gleichgewichtsverteilung (siehe Anhang C) angesetzt waren. Weiterhin war in den Simulationen das Hopping zu den übernächsten Nachbarn mit $t' = -0.22$ wieder angeschaltet. Es galt außerdem $\tau = 1/8$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices'. Es sollen zuallererst die Histogramme der jeweils einzelnen Beiträge zur Energie also $E(\sigma)$ betrachtet werden. Für die Lage des Nullpunktes der y-Achse der einzelnen Verteilungen gilt auch in diesem Kapitel die Bemerkung im letzten Absatz von Abschnitt 3.2.3. Die Maxima der getrennt voneinander erstellten Histogramme für den Erwartungswert bei positivem Vorzeichen und demjenigen bei negativem Vorzeichen in den Abb. 4.1-4.5 ähneln sich auch bei nicht verschwindendem $\langle \text{sign} \rangle$ stark. Beide treten dabei etwa in der Nähe der Erwartungswerte auf, die in [Fet98] mit Hilfe der Diagonalisierung über ein Lanczos-Verfahren berechnet wurden und mit einem Fehler in der dritten Nachkommastelle angegeben sind bzw. für Systemgrößen $L > 16$ über ein stochastisches Diagonalisierungsverfahren berechnet wurden. Diese Werte wurden mittels einer vertikalen Linie ebenfalls in das jeweilige Diagramm eingezeichnet. Die Verteilungen sind dabei so normiert, daß ihr Integral immer 1 ergibt. Für die Betrachtungen zum Vorzeichen des Skalarproduktes, welches das Monte-Carlo-Gewicht bestimmt, wird außerdem das Hubbard-Stratonovich-Feld σ als $\{\sigma\} = \{\sigma^L, \sigma^R\}$ geschrieben, wobei die Indizes L und R die Propagation von Links und von Rechts unterscheiden.

Die Verteilungen von δ in Abbildung 3.1(b) sind gewissermaßen auch exemplarisch für die Verteilung der in diesem Kapitel vorgestellten quantenmechanischen Erwartungswerte wie z.B. der Energie. Diese laufen von einem ausgeprägten Maximum zu den Rändern

Parameter	U	sign	min.	max.
$L = 16$ $t' = -0.22$ $\langle n \rangle = 0.63$	2 $\langle \text{sign} \rangle = 0.57$	1	-1.65	-0.94
		-1	-1.55	-0.98
	4	1	-2.06	-0.48
		-1	-2.22	1.77
		1	-3.20	1.60
		-1	-3.51	5.85
	2 $\langle \text{sign} \rangle = 0.29$	1	-1.51	-0.74
		-1	-1.49	-0.63
		1	-2.22	0.43
		-1	-2.81	6.85
		1	-5.09	1.25
		-1	-5.14	1.21
		1	-1.44	-1.09
		-1	-1.30	-1.12
$L = 36$ $t' = -0.22$ $\langle n \rangle = 0.72$	4	1	-4.35	14.79
		-1	-2.00	-0.36
		1	-2.30	0.29
		-1	-2.46	0.20
	6	1	-1.44	-1.09
		-1	-1.30	-1.12
		1	-4.35	14.79
		-1	-2.00	-0.36
$L = 64$ $t' = -0.22$ $\langle n \rangle = 0.78$	2	1	-1.44	-1.09
		-1	-1.30	-1.12
		1	-4.35	14.79
		-1	-2.00	-0.36
	4	1	-2.30	0.29
		-1	-2.46	0.20
		1	-1.44	-1.09
		-1	-1.30	-1.12

Tabelle 4.1: Minimale und maximale Beiträge zu E/L

hin nur allmählich aus. Wie man aus Tabelle 4.1 herauslesen kann, werden die extremen Beiträge zur Energie bei den 4×4 -Systemen mit steigender Wechselwirkung relativ zum Wert bei dem das Maximum der Verteilung liegt immer größer. Die Verteilungen mit negativem Vorzeichen fasern dabei zumindest bei höheren Wechselwirkungen weiter aus. Orientiert man sich an den Ergebnissen der exakten Diagonalisierung, so erkennt man weiter, daß bei größer werdendem U zusätzlich zur Verschlechterung der Monte-Carlo-Statistik, die sich aus dem Auftreten von negativen Skalarprodukten ergibt, über die ausfasernden Ränder zudem noch Schwierigkeiten bei der korrekten Berechnung des tatsächlichen Erwartungswertes auftreten.

Da, wie bereits angemerkt, bei den kleinen Systemen sowohl der Mittelwert der Konfigurationen mit positivem Vorzeichen als auch der Mittelwert der Felder, die ein negatives Vorzeichen im Skalarprodukt der propagierten Wellenfunktionen produzieren, schon für sich alleine eine gute Näherung der tatsächlichen Grundzustandsenergie liefern (siehe dazu auch [Lin92]), kann dies dazu führen, daß die eigentlich korrekte Berechnung bei Mitnahme des Vorzeichens ein schlechteres Ergebnis liefert als eine (weder physikalisch

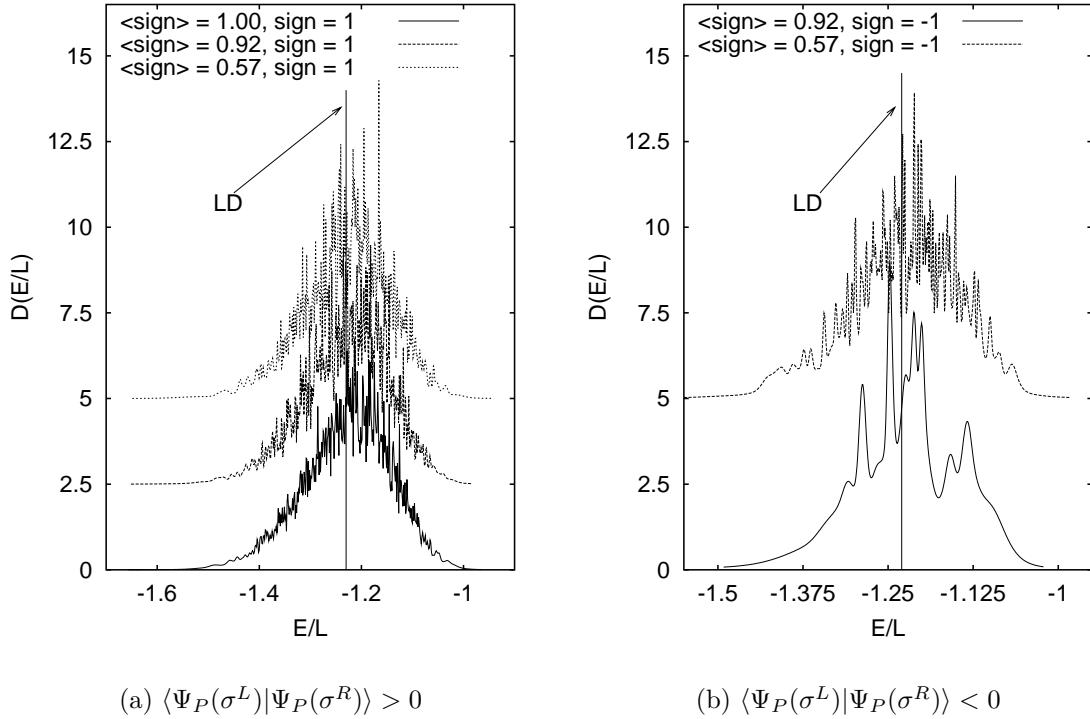


Abbildung 4.1: Beiträge zur Energie, Simulationsparameter $L = 16$, $U = 2$, $\tau = \frac{1}{8}$, $\langle n \rangle = 0.625$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices', unterschiedliche $\langle \text{sign} \rangle$ über verschiedene Testwellenfunktionen (siehe Haupttext), LD kennzeichnet Erwartungswert einer Lanczos-Diagonalisierungsrechnung, $\bar{h}_k \approx 6 \cdot 10^{-4}$ für alle Graphen.

noch mathematisch gerechtfertigte) Rechnung unter Vernachlässigung des Vorzeichens. Dabei ist unklar, unter welchen Umständen dieses Verhalten auftritt [Mat01]. Anzumerken bleibt dabei, daß dies nicht allein eine Eigenschaft des PQMC-Algorithmus ist, sondern auch im GQMC beobachtet werden kann [Mat04].

Das 4×4 -System mit $U=2$ enthält bei den hier verwendeten Simulationsparametern keine negativen Vorzeichen im Monte-Carlo-Sampling, wenn als Testwellenfunktion eine Slaterdeterminante aus den in Kapitel 1.3 angesprochenen ebenen Wellen $\Psi_{WW=0}^T$ verwendet wird. Verrauscht man jedoch $\Psi_{WW=0}^T$ durch Addition von $\lambda_i \vec{e}_i$ an die Einteilchenzustände, wobei die λ_i zufällig aus einem festgelegten Intervall $[0, r]$, $r > 0$, gewählt sind und mit \vec{e}_i die Wannierfunktionen an den Orten \vec{r}_i gemeint sind¹, so nimmt $\langle \text{sign} \rangle$ mit größer werdendem r immer mehr ab. Dabei unterscheiden sich die Verteilungen aus Abb. 4.1 hinsichtlich ihres Verhaltens von den Verteilungen der Simulationen bei $U = 4$ bzw. $U = 6$ mit unverrauschttem $\Psi_{WW=0}^T$, welche jeweils ein ähnliches mittleres Vorzeichen $\langle \text{sign} \rangle$ produzieren (Abbildung 4.2). Die Histogramme haben zwar genau-

¹anschließend wurde wieder orthonormiert

so ihr Maximum in der Nähe des Erwartungswertes der Lanczos-Diagonalisierung, die Verteilungen zu Beiträgen bei negativem Vorzeichen des Skalarproduktes der propagierten Slaterdeterminanten fasern jedoch mit abnehmendem $\langle \text{sign} \rangle$ nicht so sehr aus. Ganz im Gegensatz zum Verhalten der Simulationen bei höherer Wechselwirkung, wie man Tabelle 4.1 entnehmen kann. Für $U = 4$ beispielsweise ist der größte Wert bei den Beiträgen mit negativem Skalarprodukt der propagierten Slaterdeterminanten gar positiv, ein Vorzeichenwechsel, der bei $U = 2$ und verrauschter Testwelle nicht auftritt. Die höheren Maximalbeiträge gehen dabei mit einer zunehmenden Breite der Verteilungsmaxima bei größer werdender elektronischer Wechselwirkung einher.

Geht man zu einer Systemgröße von 6×6 Gitterplätzen, also $L = 36$, über, so findet sich in den Abb. 4.3 und 4.4 für die Wechselwirkungen $U = 2$, $U = 4$ und $U = 6$ qualitativ dasselbe Verhalten der Verteilungen des Energieerwartungswertes im Monte-Carlo-Sampling wieder, wie in den 4×4 -Systemen. Es wurden $1,5 \cdot 10^6$ MCS berechnet, die ersten $5 \cdot 10^5$ dabei verworfen. Die mittels einer vertikalen Linie eingezeichneten Vergleichsergebnisse wurden allerdings diesmal aus dem Graphen in Abb. 4.3 in [Fet98] abgelesen, sind also mit einem absoluten Ablesefehler von etwa ± 0.02 behaftet. Sie

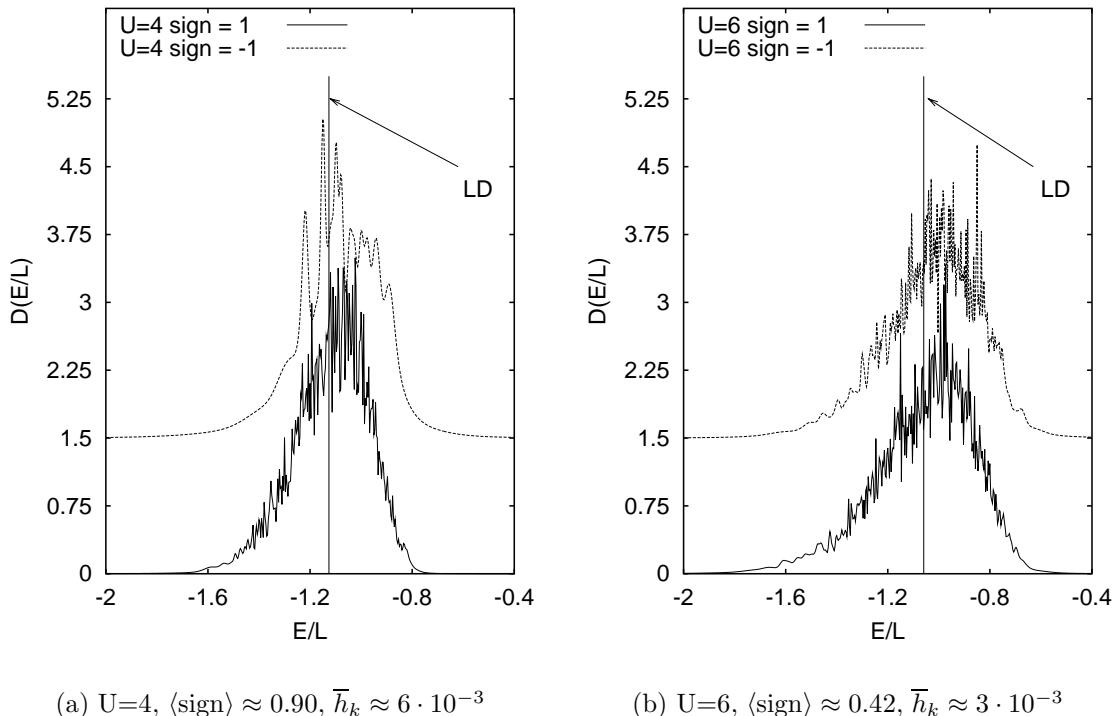


Abbildung 4.2: Beiträge zur Energie, Simulationsparameter $L = 16$, $\tau = \frac{1}{8}$, $\langle n \rangle = 0.625$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices', LD kennzeichnet Erwartungswert einer Lanczos-Diagonalisierungsrechnung (LD), $\text{sign} = \text{sign}(\langle \Psi_P(\sigma^L) | \Psi_P(\sigma^R) \rangle)$

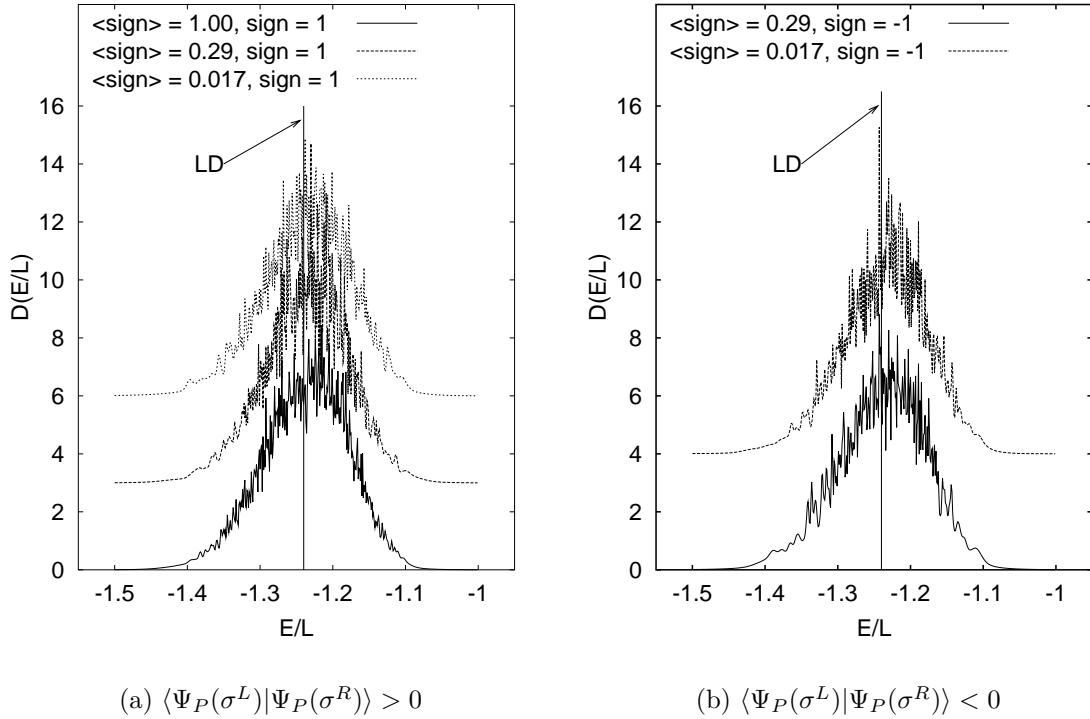
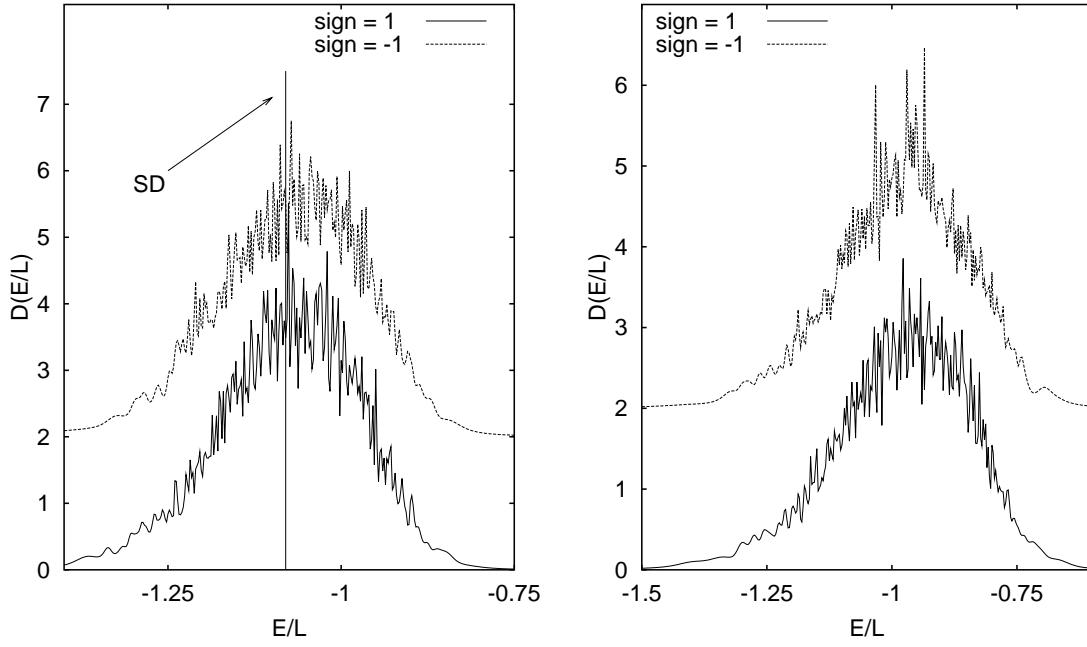


Abbildung 4.3: Beiträge zur Energie, Systemparameter $L = 36$, $U = 2$, $\tau = \frac{1}{8}$, $\langle n \rangle = 0.72$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices', verschiedene $\langle \text{sign} \rangle$ unterschiedlich Testwellenfunktionen (siehe Haupttext), LD kennzeichnet den Erwartungswert einer Lanczos-Diagonalisierungsrechnung (LD) , $\bar{h}_k \approx 3 \cdot 10^{-4}$ bei allen Graphen

stammen aus Rechnungen mit einem stochastischen Diagonalisierungsverfahren [Rae93]. Wie man Tabelle 4.1 und Abbildung 4.3 entnimmt, nehmen bei größerer elektronischer Wechselwirkung die maximalen Beiträge deutlich schneller zu als die Breite der jeweiligen Verteilung. Dabei zeigt beispielsweise die Rechnung mit $U = 4$ in den Beiträgen mit negativem Vorzeichen einen größeren maximalen Absolutwert als die Beiträge bei $U = 6$. Ganz grundsätzlich bleibt also lediglich festzuhalten, daß die gesampelten Werte und vor allem auch ihr Vorzeichen stark von der konkret berechneten Markov-Kette abhängen, wie die Histogramme einer Gegenrechnung in Anhang A zeigen. Dies deutet darauf hin, daß sie das Ergebnis einer numerisch schwierigen Einzelrechnung sind, wie beispielsweise die Matrixinversion nach einer Propagation durch ein nicht gut handhabbares Hubbard-Stratonovich-Feld.

Anzumerken bleibt noch, daß auch im 6×6 -System bei einer kleinen elektronischen Wechselwirkung von $U = 2$ eine ungeeignete Testwellenfunktion die Statistik im wesentlichen wieder hauptsächlich über das Vorzeichen des Skalarproduktes, welches das Monte-Carlo-Gewicht bestimmt, verschlechtert und nicht so sehr durch Histogramm-



(a) $U=4$, $\langle \text{sign} \rangle \approx 0.29$, SD kennzeichnet Erwartungswert aus einer stochastischen Diagonalisierungsrechnung, $\bar{h}_k \approx 2 \cdot 10^{-3}$

(b) $U=6$, $\langle \text{sign} \rangle \approx 0.02$, $\bar{h}_k \approx 3 \cdot 10^{-3}$

Abbildung 4.4: Beiträge zur Energie, Systemparameter $L = 36$, $\tau = \frac{1}{8}$, $\langle n \rangle = 0.72$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices', $\text{sign} = \text{sign}(\langle \Psi_P(\sigma^L) | \Psi_P(\sigma^R) \rangle)$

Ausreißer. Dies steht wiederum im Gegensatz zu den Rechnungen für größere U , wo $\langle \text{sign} \rangle$ von vornherein nicht sehr groß ist. Dort werden die Verteilungsränder gerade von großen extremen Beiträgen geprägt. In Abb. 4.5 sind zur Abrundung noch die Verteilungen der Beiträge zum Erwartungswert der Energie in den 8×8 -Systemen für die Wechselwirkungen $U = 2$, $U = 4$ und $U = 6$ zu sehen. Auch deren Ränder werden

L	U	LD/SD	PQMC	PQMC sign=1	PQMC _b	PQMC _b sign=1
16	6	-1.059	-1.081 ± 0.003	-1.060 ± 0.001	-1.060 ± 0.001	-1.060 ± 0.001
36	4	-1.05 ± 0.01	-1.088 ± 0.003	-1.080 ± 0.001	-1.078 ± 0.001	-1.078 ± 0.001

Tabelle 4.2: E/L aus dem PQMC und der Lanczos- und stochastischen Diagonalisierung, Index b bezeichnet Mittelung über Werte im Intervall $I_B = [-2., -0.4]$ für $L = 16$ und $I_B = [-2.4, 0.]$ für $L = 36$, sign=1 heißt Mittelung nur über Daten mit positivem Skalarprodukt der propagierten Wellenfunktionen, Fehlerrechnung mit 100 Bins

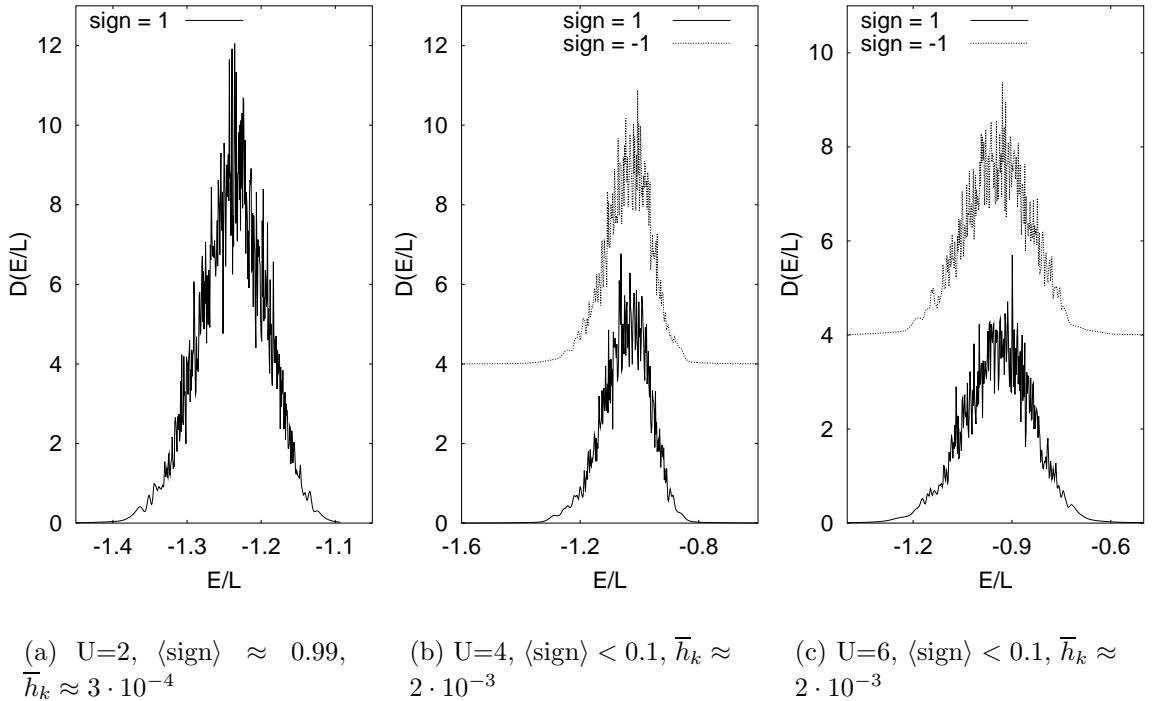


Abbildung 4.5: Beiträge zur Energie, Systemgröße $L = 64$, $\tau = \frac{1}{8}$, $\langle n \rangle = 0.72$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices', $\text{sign} = \text{sign}(\langle \Psi_P(\sigma) | \Psi_P(\sigma') \rangle)$

durch teilweise sehr große Ausreißer gebildet. Dabei ist wiederum der Lauf mit $U = 4$ am auffälligsten. Das Fehlen von Vergleichswerten aus alternativen Berechnungsmethoden zum Grundzustand lässt jedoch eine wenigstens im Ansatz objektive Einteilung in numerisch stabil bzw. instabil berechnete Beiträge nicht mehr zu.

Die Fehlerrechnung war in den Quanten-Monte-Carlo-Rechnungen, gerade im Zusammenhang mit dem Vorzeichenproblem, auch immer im Mittelpunkt des Interesses [Hat94] [Ham93]. Dabei hat sich die Binning-Fehlerrechnung als am brauchbarsten erwiesen [Hus96a]. Wie in [Hat94] beschrieben, werden die berechneten Mittelwerte einer einzelnen Markov-Kette oder auch aus verschiedenen Markov-Ketten mehrerer Läufe in N gleich große Datensätze, so genannte Bins, aufgeteilt und deren Mittelwerte r_i , $i = 1, \dots, N$, jeweils einzeln berechnet. Daraus erhält man eine Standardabweichung

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_i (r_i - \bar{r})^2} \quad (4.1)$$

der Mittelwerte r_i , wobei \bar{r} den Mittelwert des gesamten Datensatzes bezeichnet. Für den Fehler Δr von \bar{r} gilt damit

$$\Delta r = \frac{\sigma}{\sqrt{N}} \quad . \quad (4.2)$$

Bei genügend großen Bins ist sichergestellt, daß die in Kapitel C.4 angesprochene Fehlerabschätzung des Markov-Prozesses $\propto \frac{1}{\sqrt{N}}$ Gültigkeit besitzt.

Bei den höheren Wechselwirkungen ergeben sich beim PQMC mit Hopping zum übernächsten Nachbarn tendenziell niedrigere Grundzustandsenergien als bei Rechnungen mit vergleichbaren Diagonalisierungsverfahren (siehe dazu auch [Fet98] Kapitel 4). Mittlet man jedoch beispielsweise bei der Verteilung für das 4×4 -System mit $U = 6$ aus Abb. 4.2(b) nur über das Verteilungsmaximum und ignoriert die Ausreißer, ergeben sich nahezu übereinstimmende Werte, wie man in Tabelle 4.2 sieht. Der gleiche Effekt kann erreicht werden, wenn man nur die Verteilung der Beiträge mit positivem Skalarprodukt der propagierten Slaterdeterminanten betrachtet, wie man weiter der Tabelle entnehmen kann. Der Mittelwert ändert sich auch nicht durch eine Beschränkung des Wertebereiches. Die Einschränkung des zulässigen Bereiches auf das in Abb. 4.2(b) zu sehende Intervall ist dabei zugegebenermaßen willkürlich. Was damit aber gezeigt werden kann ist, daß die Möglichkeit existiert, auch ohne eine Korrektur durch das Vorzeichen einen Wert in der Größenordnung der exakten Diagonalisierung berechnen zu können.

Bei der Energieverteilung im 6×6 -System mit $U = 4$ aus Abb. 4.4(a) gelingt eine Korrektur durch Weglassen der Beiträge mit negativem Skalarprodukt bzw. Beschränkung des zulässigen Wertebereiches für die $E(\sigma)$ nicht mehr ganz so gut. Eine Übereinstimmung mit dem Wert der stochastischen Diagonalisierung innerhalb der gültigen Fehler des PQMC ergibt sich bei keinem der vier unterschiedlichen Mittelungsmethoden. Der korrigierte Wert bewegt sich aber immerhin schon einmal in Richtung des Diagonalisierungsergebnisses, wie man wieder in Tabelle 4.2 erkennt. Die bleibende Abweichung kann ihre Ursache in einem zu kurzen Simulationslauf für das PQMC haben. Es ist aber auch möglich, daß die stochastische Diagonalisierungsrechnung auf zu wenig Basisvektoren beruht [Fet98].

4.2 Erwartungswerte für ODLRO

Für die Analyse der Histogramme über die Erwartungswerte zur Bestimmung einer supraleitenden Korrelation ergibt sich im Gegensatz zu den Verteilungen über die Energie eine zusätzliche Schwierigkeit. Wie man an Gleichung (2.27) sieht, setzt sich die Vertex-Korrelationsfunktion C^V bereits aus mehreren zu messenden $\langle\langle c_i^\dagger c_j \rangle\rangle_{MC}$ zusammen. Es werden in diesem Abschnitt daher nur die Beiträge zur Doppelsumme C der Monte-Carlo-Meßwerte der unkorrigierten Zwei-Teilchen-Korrelationsfunktionen aus 2.23 über jeweils alle Gitterplätze betrachtet, also

$$C = \frac{1}{L^2} \sum_{i,j} C_d(i, j) \quad . \quad (4.3)$$

Parameter	U	sign	min.	max.
$L = 16$ $t' = -0.22$ $\langle n \rangle = 0.63$	2 $\langle \text{sign} \rangle = 0.57$	1 -1	0.00 0.01	0.19 0.21
	4	1 -1	-1.16 -12.1	1.58 1.0
		1 -1	-2.25 -2.74	2.41 6.44
		1 -1	-0.35 -0.21	0.38 0.21
	6	1 -1	-0.95 -11.20	2.16 1.68
		1 -1	-3.27 -3.81	3.68 5.44
		1 -1	0.00 -0.16	0.11 0.04
		1 -1	-8.60 -2.36	4.03 0.84
	2	1 -1	-1.00 -2.89	2.35 9.83
		1 -1	-1.00 -2.89	2.35 9.83
$L = 36$ $t' = -0.22$ $\langle n \rangle = 0.72$	2 $\langle \text{sign} \rangle = 0.017$	1 -1	-0.35 -0.21	0.38 0.21
	4	1 -1	-0.95 -11.20	2.16 1.68
		1 -1	-3.27 -3.81	3.68 5.44
		1 -1	0.00 -0.16	0.11 0.04
	6	1 -1	-8.60 -2.36	4.03 0.84
		1 -1	-1.00 -2.89	2.35 9.83
		1 -1	-1.00 -2.89	2.35 9.83
		1 -1	-1.00 -2.89	2.35 9.83
	2	1 -1	-1.00 -2.89	2.35 9.83
		1 -1	-1.00 -2.89	2.35 9.83
$L = 64$ $t' = -0.22$ $\langle n \rangle = 0.78$	2 $\langle \text{sign} \rangle = 0.017$	1 -1	-0.35 -0.21	0.38 0.21
	4	1 -1	-0.95 -11.20	2.16 1.68
		1 -1	-3.27 -3.81	3.68 5.44
		1 -1	0.00 -0.16	0.11 0.04
	6	1 -1	-8.60 -2.36	4.03 0.84
		1 -1	-1.00 -2.89	2.35 9.83
		1 -1	-1.00 -2.89	2.35 9.83
		1 -1	-1.00 -2.89	2.35 9.83
	2	1 -1	-1.00 -2.89	2.35 9.83
		1 -1	-1.00 -2.89	2.35 9.83

Tabelle 4.3: Maximale und minimale Beiträge zu C

Ein Vergleich mit in der Literatur veröffentlichten Vertex-Korrelationsfunktionen C^V , die sich auf [Fet98] beschränken muß, ist so nur durch Addition der Vertexkorrektur \bar{C} möglich. Da diese wie gesagt selbst eine Summe über Mittelwerte ist, können davon nicht ohne weiteres Verteilungen angefertigt werden. Deshalb wurde deren in den PQMC-Simulationen berechneter Mittelwert verwendet. Die dabei wohl einfließenden starken Ausreißer, wie sie die Histogramme in Abb. 4.7-4.8 vermuten lassen, wurden mittels der 'Binning'-Fehlerrechnung aus Abschnitt 4.1 mit jeweils 20 Bins berücksichtigt. Da der Fehler sehr klein wird, scheinen sich bei der Vertexkorrektur die Extrembeiträge sehr gut herauszumitteln. Das beschriebene Vorgehen kann also als eher unproblematisch angesehen werden.

Die Diagramme wurden für die Parameter, für die Vergleichswerte vorlagen, um \bar{C} auf der horizontalen Achse verschoben. So ist ein direkter Vergleich mit den in [Fet98] angegebenen C^V möglich, die ebenso wie die Energieerwartungswerte bei den 4×4 -Systemen mittels Lanczos-Diagonalisierung und bei den 6×6 -Systemen mittels eines stochastischen Diagonalisierungsverfahrens berechnet wurden. Sie sind in den nachfol-

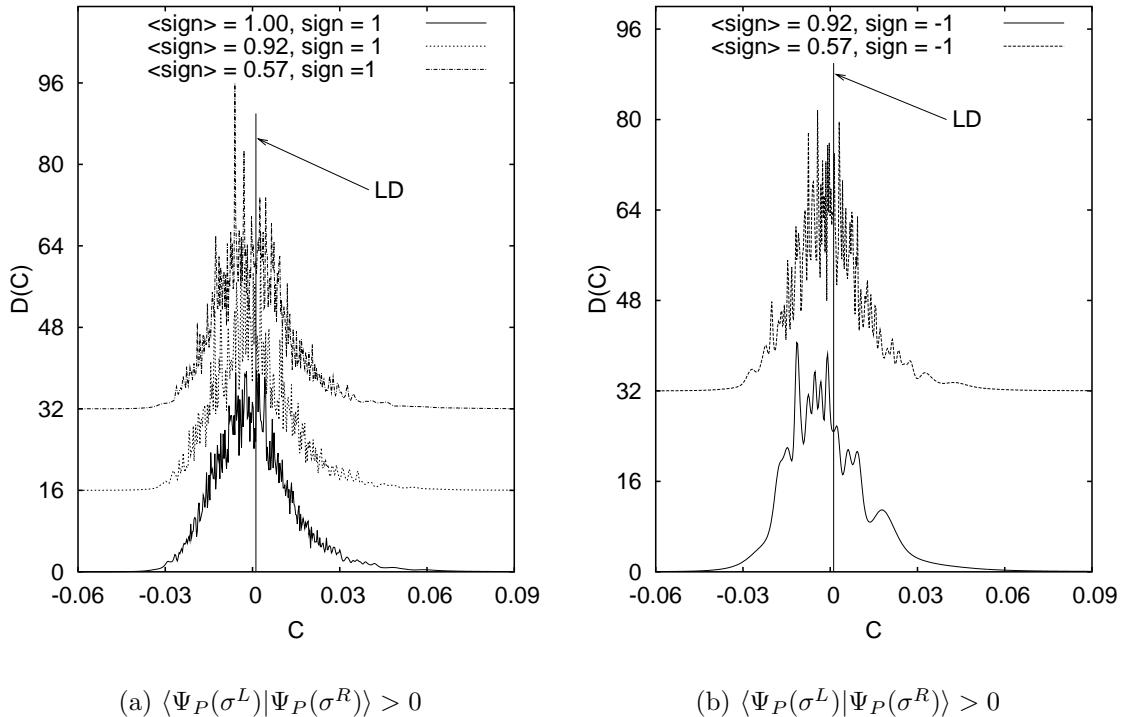


Abbildung 4.6: Beiträge zur d-Wellen-Korrelation, Systemparameter $L = 16$, $U = 2$, $\tau = \frac{1}{8}$, $\langle n \rangle = 0.625$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices', verschiedene $\langle \text{sign} \rangle$ durch unterschiedliche Testwellenfunktionen (siehe Haupttext), LD kennzeichnet Erwartungswert einer Lanczos-Diagonalisierungsrechnung, Fehler der PQMC-Vertexkorrektur um die die Verteilungen verschoben sind $\approx 1 \cdot 10^{-5}$, $\bar{h}_k \approx 2 \cdot 10^{-4}$ bei allen Graphen

genden Abbildungen ebenfalls wieder mittels einer vertikalen Linie eingezeichnet. Bei den 6×6 -Systemen kommt analog zur Situation bei den Betrachtungen zu den Energieerwartungswerten zusätzlich zu der bei der Vertexkorrektur gemachten Fehlern noch ein absoluter Ablesefehler von $\pm 2 \cdot 10^{-3}$ für die C^V hinzu, da diese wieder aus einem Graphen in [Fet98] stammen.

Die Daten wurden mit denselben Simulationen gewonnen, die auch die Histogramme über die Energie geliefert haben. Beginnt man wieder bei der Systemgröße 4×4 , so erkennt man in Tabelle 4.3, daß die Beiträge der Ausreißer in den einzelnen Simulationen teilweise noch größer sind als in den Energie-Verteilungen, obwohl C abhängig von den genauen Simulationsparametern um fast zwei Größenordnungen kleiner ist als E/L . Da C^V um noch eine Größenordnung kleiner ist als die unkorrigierte d-Wellen-Korrelation, können diese Ausreißer bei ohnehin schon kleinem $\langle \text{sign} \rangle$ die numerische Berechnung gänzlich versagen lassen. Im Gegensatz zur Energieberechnung, die sich aus Matrixelementen in der Nähe der Hauptdiagonalen der Matrix \mathbf{G} in (3.2) zusammensetzt,

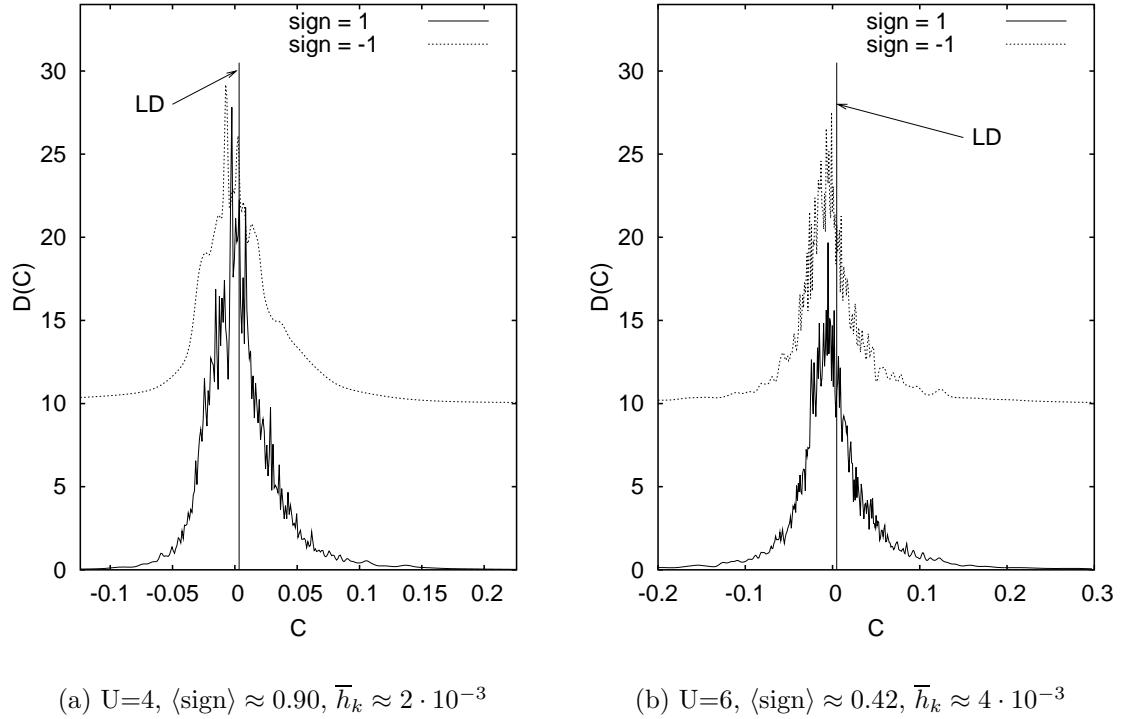


Abbildung 4.7: Beiträge zur d-Wellen-Korrelation, Systemparameter $L = 16$, $\tau = \frac{1}{8}$, $\langle n \rangle = 0.625$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices', LD kennzeichnet den Erwartungswert einer Lanczos-Diagonalisierungsrechnung, Fehler der PQMC-Vertexkorrektur, um die die Verteilungen verschoben sind $\approx 9 \cdot 10^{-5}$

enthalten die supraleitenden Korrelationen auch Matrixelemente abseits davon. Daß bei deren Berechnung nun die Histogramm-Streuung zunimmt, ist wiederum ein Indiz für numerische Schwierigkeiten bei der Berechnung von D bzw. D^{-1} in (B.8), letztere geht bei der Berechnung von \mathbf{G} ja entscheidend mit ein.

In Abbildung 4.6 sind die Histogramme von C im 4×4 -Gitter mit $U = 2$ zu sehen. Wie schon bei den Energiehistogrammen gilt auch für die d-Wellen-Korrelation, daß die Verteilungen bei verschiedenen Testwellenfunktionen, welche dann ein unterschiedliches $\langle \text{sign} \rangle$ mit sich bringen, in etwa gleich bleiben. Die Simulationen für $U = 2$ bei kleiner Gittergröße zeichnen sich also auch bei der Berechnung der d-Wellen-Korrelation nicht nur dadurch aus, daß es eine Testwelle gibt, bei der kein negatives Vorzeichen auftritt, sondern zusätzlich dazu auch durch eine stabile Berechnung der Erwartungswerte selbst bei ungeeigneten Testwellenfunktionen. Dies äußert sich darin, daß keine Beiträge von Hubbard-Stratonovich-Feldern auftreten, die extrem vom Wert abweichen, bei dem sich das Maximum der Verteilung befindet (siehe dazu Tabelle 4.3).

Die Histogramme für die d-Wellen-Symmetrie in den 6×6 -Gittern sind für alle Werte der

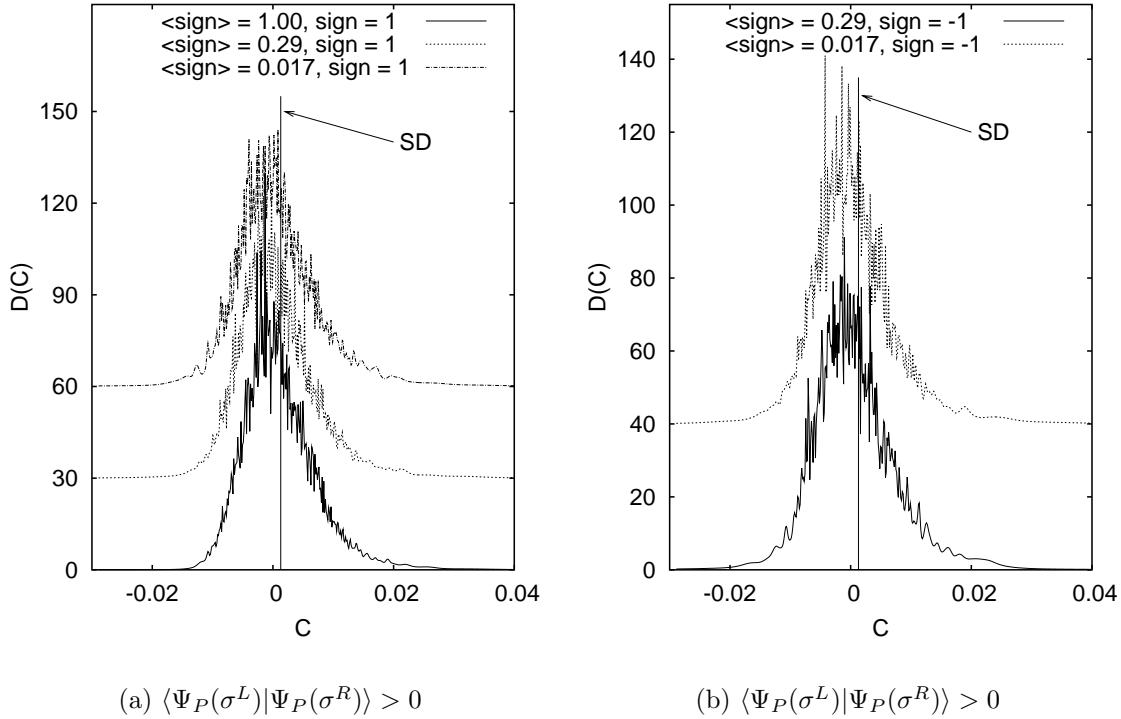
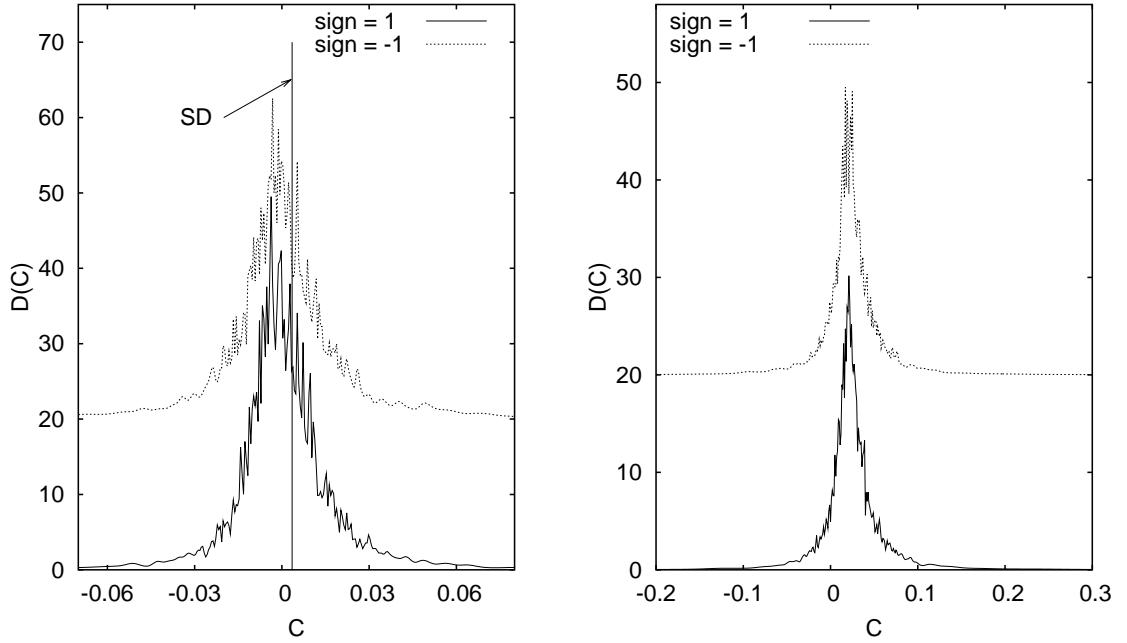


Abbildung 4.8: Beiträge zur d-Wellen-Korrelation, Simulationsparameter $L = 36$, $U = 2$, $\tau = \frac{1}{8}$, $\langle n \rangle = 0.72$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices', verschiedene $\langle \text{sign} \rangle$ über unterschiedliche Testwellenfunktionen, LD kennzeichnet den Erwartungswert einer Lanczos-Diagonalisierungsrechnung, Fehler der PQMC-Vertexkorrektur, um die die Verteilungen verschoben sind $\approx 1 \cdot 10^{-5}$, $\bar{h}_k \approx 9 \cdot 10^5$ bei $\langle \text{sign} \rangle = 1$, ansonsten $\bar{h}_k \approx 3 \cdot 10^{-4}$.

L	U	LD/SD [$\times 10^{-3}$]	PQMC [$\times 10^{-3}$]	PQMC sign=1 [$\times 10^{-3}$]	PQMC _b [$\times 10^{-3}$]	PQMC _b sign=1 [$\times 10^{-3}$]	I_B
16	4	3.4	4.3 ± 0.6	3.6 ± 0.3	2.4 ± 0.2	2.6 ± 0.2	[-0.1, 0.15]
	6	4.8	3.4 ± 2.0	1.2 ± 0.8	3.8 ± 0.7	3.1 ± 0.4	[-0.2, 0.3]
	6 (lang)	4.8	5.5 ± 1.8	3.6 ± 0.6	2.6 ± 0.5	3.0 ± 0.2	[-0.2, 0.3]
36	2	1.3 ± 0.1	1.2 ± 0.04	1.2 ± 0.03	1.2 ± 0.03	1.2 ± 0.03	[-0.03, 0.04]

Tabelle 4.4: C^V aus dem PQMC und der Lanczos- bzw. stochastischen Diagonalisierung. Der Index b bezeichnet Mittelung beschränkt auf das Intervall I_B (siehe Haupttext), sign=1 heißt Mittelung über Daten mit positivem Skalarprodukt der propagierten Slaterdeterminanten, Fehlerrechnung mit 100 Bins



(a) $U=4$, $\langle \text{sign} \rangle \approx 0.29$, SD kennzeichnet Erwartungswert einer stochastischen Diagonalisierungsrechnung, Fehler PQMC-Vertexkorrektur (Verschiebung!) $\approx 3 \cdot 10^{-4}$, $\bar{h}_k \approx 3 \cdot 10^{-3}$

(b) $U=6$, $\langle \text{sign} \rangle \approx 0.02$, $\bar{h}_k \approx 3 \cdot 10^{-3}$

Abbildung 4.9: Beiträge zur d-Wellen-Korrelation, Simulationsparameter $L = 36$, $\tau = \frac{1}{8}$, $\langle n \rangle = 0.72$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices', $\text{sign} = \text{sign}(\langle \Psi_P(\sigma^L) | \Psi_P(\sigma^R) \rangle)$

elektronischen Wechselwirkung wieder qualitativ mit den entsprechenden Energieverteilungen in den Abbildungen 4.3-4.4 vergleichbar, wenn auch die Ränder der Verteilungen generell weiter ausfasern. Wo und mit welchem Vorzeichen große Ausreißer auftreten, scheint dabei nur durch die konkrete Markov-Kette festgelegt. Simulationen mit unterschiedlichem Seed-Wert des Zufallszahlengenerators zeigen dabei jedoch ähnliches Verhalten, wovon man sich durch Hinzuziehen der Abbildungen in Anhang A überzeugen kann. Die Ausreißer in den Verteilungen von C für unterschiedliche Testwellenfunktionen (also kleiner werdendem $\langle \text{sign} \rangle$) machen sich schon bei $U = 2$ bemerkbar, was bei den Energie-Histogrammen nicht der Fall war. Die Stabilität der Messung mittels B.8 geht demnach mit zunehmender Systemgröße schon bei kleineren Wechselwirkungen verloren. Wie schnell dies geschieht, hängt dabei auch von der konkreten Observablen ab, wie der Vergleich zwischen dem Verhalten von E und C bei $L = 36$ und $U = 2$ zeigt.

Die Verteilungen zu den 8×8 -Systemen bieten ebenfalls keine Besonderheiten, wieder

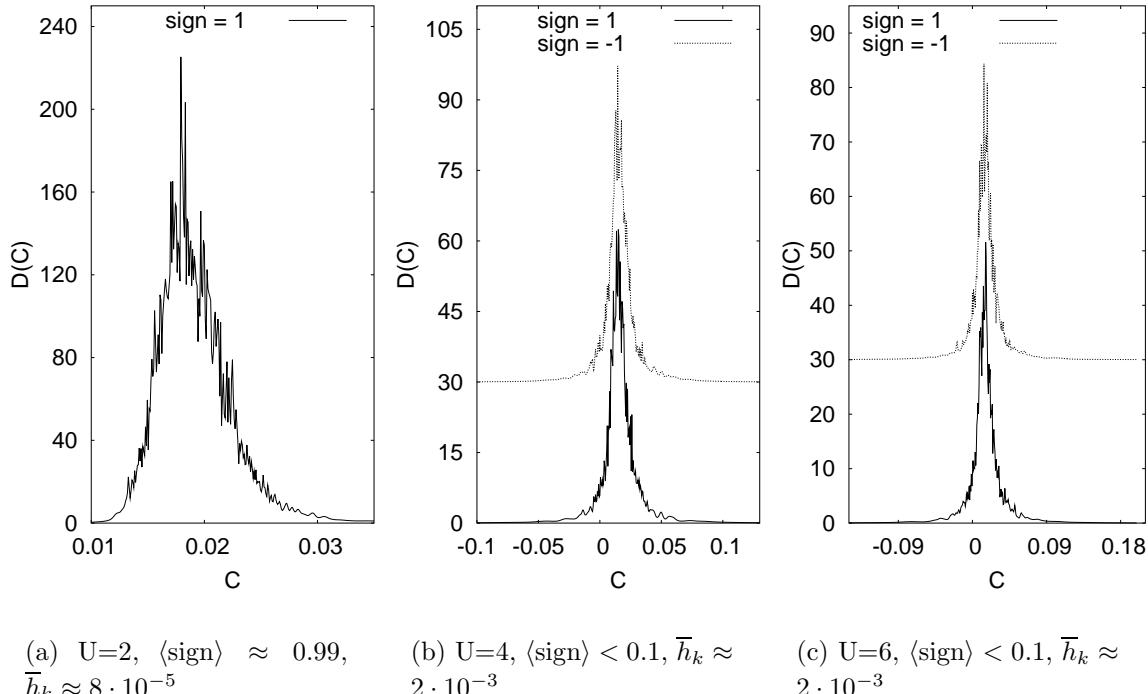


Abbildung 4.10: Beiträge zur d-Wellen-Korrelation, Simulationsparameter $L = 64$, $\tau = \frac{1}{8}$, $\langle n \rangle = 0.72$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices'

erscheinen die Maxima von Histogrammen, die $\text{sign}=1$ produzieren und derjenigen, die ein negatives Skalarprodukt liefern, nahezu deckungsgleich. Dies ist ja auch zu erwarten, wenn $\langle \text{sign} \rangle$ sehr kleine Werte annimmt. Denn nur so kann überhaupt ein endlicher Wert für C entstehen. Das Fehlen von Vergleichswerten aus anderen Verfahren läßt daher weitergehende Betrachtungen nicht zu. Es bleibt dabei anzumerken, daß auch die Verteilungen der besprochenen Erwartungswerte in größeren Systemen mit bis zu 16×16 Gitterplätzen ähnliches Verhalten zeigen. Die Betrachtungen zu den Verteilungen von C^V läßt sich also wie folgt zusammenfassen. Wo Vergleichswerte, gewonnen aus exakten bzw. stochastischen Diagonalisierungsverfahren vorliegen, sind die Maxima der entsprechenden Verteilungen von C in etwa in deren Nähe. Das Auftreten von negativen Vorzeichen erscheint dabei nicht als Korrektur, um den richtigen Erwartungswert zu bekommen, sondern eher als ein Artefakt der Näherungen.

Auch für C^V soll die Entwicklung des Erwartungswertes hinsichtlich der Beschränkung des zulässigen Wertebereiches der Einzelbeiträge und dem Verwerfen der Beiträge mit negativem Skalarprodukt der propagierten Wellenfunktionen dargestellt werden. Die Vertexkorrektur muß dabei wie schon beim Verschieben der Verteilungen als vorgegeben betrachtet werden. Es konnte bisher bei den Verteilungen für das 4×4 -Gitter mit Wechselwirkungen $U \geq 4$ aus Abb. 4.7 keine gute Übereinstimmung mit den Ergebnis-

sen aus anderen Verfahren zur Grundzustandsuntersuchung beobachtet werden [Fet98]. In der Tat ist das PQMC-Ergebnis mit 4.3 bei $U = 4$ viel zu hoch, wie man in Tabelle 4.4 nachlesen kann. Der relative Binning-Fehler liegt dabei etwa bei 0.6, ist aber dennoch zu klein, um noch von einer Übereinstimmung mit dem Resultat der Lanczos-Diagonalisierung sprechen zu können. Dagegen ist der Mittelwert, wenn er nur über die Beiträge mit positivem Skalarprodukt gewonnen wird, deutlich näher am Resultat der Lanczos-Diagonalisierung, wie man weiter der Tabelle entnimmt. Die Beschränkung der Mittelwertbildung auf einen Wertebereich um das Maximum bringt bei Mitnahme aller Beiträge einen zu niedrigen Wert im Vergleich zum Ergebnis der exakten Diagonalisierung. Die beschränkte Mittelwertbildung nur über die Beiträge, die bei positivem Vorzeichen des Skalarproduktes der propagierten Wellenfunktionen auftraten, ergibt ebenfalls einen viel zu kleinen Wert.

Die Probleme mit den großen Beiträgen mit negativem Vorzeichen werden ersichtlich, wenn man sich Tabelle 4.3 ansieht. Der Betrag des kleinsten negativen Wertes ist sehr viel größer als der Wert des größten positiven Beitrages. Da die Werte noch mit dem Vorzeichen des Skalarproduktes der propagierten Wellenfunktionen multipliziert werden, kann dies den großen Wert für C^V erklären. Es zeigt sich auch, daß das Binning solche Fehler wohl eher unterschätzt. Dabei sind die Abschneidegrenzen bei der Mittelwertbildung mit eingeschränktem Wertebereich der einzelnen Beiträge recht willkürlich gewählt. Alleine dadurch ist es möglich, das Ergebnis für C^V als Differenz zweier um eine Größenordnung höherer Erwartungswerte, stark zu verändern. Bei dem Vorgehen, sich auf den Wertebereich zu beschränken, in dem das Maxima der Verteilung liegt, wird die Übereinstimmung mit dem Wert des Lanczos-Diagonalisierungsergebnisses eher schlecht. Dabei fällt es vor allem schwer, die Asymmetrie der Verteilungsflanken richtig einzuschätzen. Die Überlegungen zeigen aber wiederum, daß es nicht unbedingt einer Korrektur durch das Vorzeichen bedarf, um die Ergebnisse zumindest für einen etwas umfangreicheren Parameterbereich konsistenter zu machen.

Beim 4×4 -System mit $U = 6$ stimmt der PQMC-Werte innerhalb des Fehlers mit dem Lanczos-Wert überein. Dabei werden jedoch die Binning-Fehler insgesamt sehr hoch, wie man wieder in Tabelle 4.4 sieht. Die Rechnung liefert allerdings keinen ausreichend großen Wert, um das Ergebnis des Erwartungswertes, wenn nur Beiträge mit positivem Skalarprodukt der propagierten Slaterdeterminanten verwendet werden, in Einklang mit dem Resultat der Lanczos-Diagonalisierung zu bringen. Dies kann etwas korrigiert werden, wenn man den zulässigen Wertebereich auf den in Abb. 4.7(b) zu sehenden Abschnitt einschränkt. Dies verbessert auch den Wert für C^V mit der korrekten Behandlung des Vorzeichens der Skalarprodukte, allerdings nimmt der Fehler dabei stärker ab als eine Konvergenz in Richtung Lanczos-Ergebnis erfolgt. Dies unterstreicht, daß die Fluktuationen am Rand der Verteilung sehr viel mehr für die Abweichung vom Mittelwert verantwortlich sind als die Beiträge im Verteilungsmaximum. Dabei weist der zugelassene Wertebereich bei der beschränkten Mittelwertbildung wie schon bei

$U = 4$ eine Asymmetrie hin zu positiven Werten auf, welche allerdings auch im Abfall der Verteilungsflanken zu sehen ist.

Wegen des doch sehr hohen Fehlers für das PQMC-Ergebnis wurde ein Kontrolllauf für $U = 6$ mit $5 \cdot 10^6$ MCS durchgeführt, wobei $1 \cdot 10^6$ MCS für das Einlaufen der Markov-Kette in den Gleichgewichtszustand reserviert waren. Wie man durch Vergleich von Abbildung 4.7(b) mit Abbildung A.3 in Anhang A sieht, unterscheiden sich die Verteilungsmaxima der beiden Läufe nur marginal. Bei dem längeren Lauf ergab sich ein mittleres Vorzeichen von $\langle \text{sign} \rangle \approx 0.4$, das $\langle \text{sign} \rangle$ blieb also nahezu konstant. Dagegen weicht die Vertexkorrektur (≈ 0.502) schon in der dritten Nachkommastelle vom Wert in den kürzeren Läufen ab (≈ 0.504). Durch die Differenzbildung ist diese gerade die erste Nachkommastelle von C^V . Dies kann als ein starkes Indiz dafür gewertet werden, daß die Markov-Kette des ersten Laufes noch nicht vollständig in die Gleichgewichtverteilung gefunden hatte. Die Binning-Fehler nehmen im Vergleich zur Zunahme der Rechenzeit (Faktor 5) allerdings nur schwach ab. Dafür sind vermutlich die Fluktuationen an den Verteilungsändern verantwortlich, die auch mit einer Erhöhung der Rechenzeit nur schwer in den Griff zu bekommen sind. Am meisten von der aufwendigeren Rechnung profitiert der Wert nur über die Beiträge, die bei positivem Vorzeichen des Skalarproduktes der propagierten Wellenfunktionen auftreten. Er ist zwar auch innerhalb der Fehler noch kleiner als das Lanczos-Ergebnis, zeigt aber einen Trend, dorthin zu konvergieren. Auch verhalten sich die Mittelwerte bei eingeschränktem Wertebereich für die Einzelbeiträge jetzt analog zu denjenigen bei $U = 4$; sie sind beide kleiner als die analogen Mittelwerte über alle Beiträge. Dies kann allerdings auch wieder mit den eher willkürlich festgelegten Grenzen für den zugelassenen Wertebereich liegen. Insgesamt wird deutlich, daß mit zunehmender Wechselwirkung U die Monte-Carlo-Statistik nicht nur unter einem abnehmendem mittleren Vorzeichen leidet, sondern sich wohl auch durch eine für die Methode eher ungeeignet entwickelnde Wahrscheinlichkeitsverteilung im Phasenraum verschlechtert.

Beim 6×6 -System mit $U = 2$ in Tabelle 4.4 fällt auf, daß die Binning-Fehler um eine Größenordnung kleiner sind als beispielsweise bei den größeren Wechselwirkungen im 4×4 -System. Dabei galt $\langle \text{sign} \rangle = 1$; konvergente Läufe zeichnen sich wie bereits mehrfach erwähnt eben gerade auch durch ein hohes mittleres Vorzeichen aus. Die Einschränkung des zulässigen Wertebereiches ändert ebenso nicht viel am Erwartungswert, der ohnehin ganz gut mit dem Wert der stochastischen Diagonalisierung übereinstimmt. Bei $U = 4$ geht die Stabilität schon so weit verloren, daß Werte von C^V zu einem einzelnen Lauf mit den eingangs des Abschnittes angegebenen MCS nur mit einem relativen Binning-Fehler von 0.6 angegeben werden könnten. Dieser wird zwar kleiner, wenn man die Mittelwertbildung nur über positives Vorzeichen vornimmt; die Werte sind dann jedoch durchweg niedriger als in der stochastischen Diagonalisierung berechnet. Es gelingt nicht mehr, nur durch genauere Analyse eines einzelnen Monte-Carlo-Laufes, mit deutlich herabgesetztem Rechenaufwand noch konsistente Ergebnisse zu erzielen. Deshalb

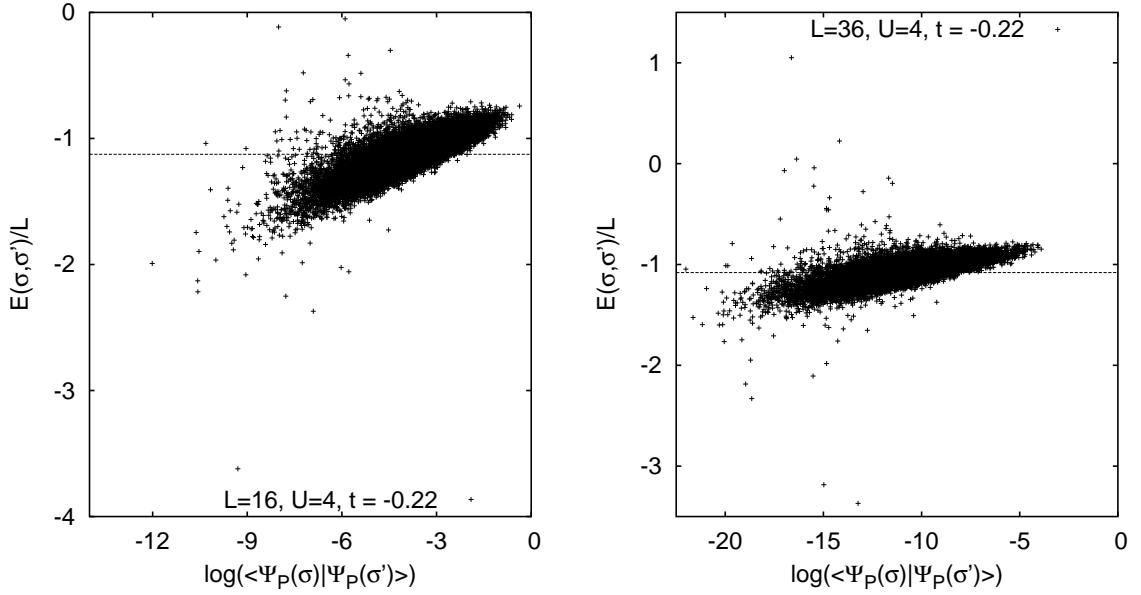


Abbildung 4.11: Beiträge zu E/L , $\Psi_P(\sigma)$ bezeichnet durch das Hubbard-Stratonovich-Feld σ propagierte und anschließend orthonormierte Wellenfunktion, $\Psi_P = \Psi_P^\uparrow \otimes \Psi_P^\downarrow$, horizontale Linien bezeichnen Erwartungswert der Lanczos- bzw. stochastischen Diagonalsierungsrechnungen

wurde auch auf die Angabe der Erwartungswerte an dieser Stelle verzichtet.

4.3 Numerische Beobachtungen

4.3.1 Orthogonalität der Slaterdeterminanten

In den vorangegangenen Abschnitten wurde mehrmals auf die Problematik der Matrix-invertierung bei der Erwartungswertbildung hingewiesen. Das Wicksche Theorem, das dabei Verwendung findet (siehe dazu auch Kapitel B.2) ist dabei nur für nicht orthogonale zueinander stehende Slaterdeterminanten anwendbar. Wie in Abb. 4.11 zu sehen, treten große Ausreißer tatsächlich ausschließlich bei den kleineren Skalarprodukten $\langle \Psi_P(\sigma^L) | \Psi_P(\sigma^R) \rangle$ auf. Eine Größenordnung von 10^{-6} bis 10^{-7} , die sich auch schon als Genauigkeit bei der Berechnung von (3.16) ergab, kann hier auch als grobe Grenze dienen, unterhalb welcher einzelne extreme Beiträge zum Mittelwert auftauchen. Ein Verwerfen der Beiträge derjenigen Ising-Felder, die ein Skalarprodukt kleiner als diesen Wert ergeben, kann allerdings durch die Verteilungen in Abb. 4.11 nicht gerechtfertigt werden.

Die Asymmetrie der Ausreißer in manchen Verteilungen kann man dadurch erklären, daß erst bei der Berechnung der Umkehrmatrix die Richtigkeit des Vorzeichens verloren geht. Denn dann entsteht neben der tatsächlichen Verteilung eine weitere mit umgekehrtem Vorzeichen, die allerdings durch die Normierung unterdrückt wird. Anzumerken bleibt dabei, daß Ausreißer auch schon bei den Systemen mit Halbfüllung auftraten (siehe Abb. 3.4(c)), und dort δ aus 3.16 ohne Zuhilfenahme von D^{-1} berechnet wurde. Jedoch dürfte eine anschließende Umkehrmatrixbildung für numerische Instabilitäten noch anfälliger sein als die alleinige Berechnung der Determinante D zur Bestimmung des Skalarproduktes.

Bei der ganzen Betrachtung bleibt es allerdings fraglich, ob es sich bei den extremen Beiträgen tatsächlich um numerische Ausreißer handelt oder ob es sich nicht doch etwa um relevante Beiträge zum Mittelwert handelt. Um die Situation näher zu beleuchten, wurden Simulationen durchgeführt, bei denen die Energie als Monte-Carlo-Gewicht diente. Analog Gleichung (2.18) schreibt sich die Summation über die Isingfelder $\sigma_{\text{ges}} = \{\{\sigma\}, \{\sigma'\}\}$ dabei zu

$$\langle E \rangle_{\text{MC}} = \frac{\sum_{\{\sigma\}\{\sigma'\}} \langle \sigma | \sigma' \rangle s \left| \frac{\langle \sigma | E | \sigma' \rangle}{\langle \sigma | \sigma' \rangle} \right|}{\sum_{\{\sigma\}\{\sigma'\}} \frac{\langle \sigma | \sigma' \rangle^2}{\langle \sigma | E | \sigma' \rangle} s \left| \frac{\langle \sigma | E | \sigma' \rangle}{\langle \sigma | \sigma' \rangle} \right|}. \quad (4.4)$$

$w' = \left| \frac{\langle \sigma | E | \sigma' \rangle}{\langle \sigma | \sigma' \rangle} \right|$ dient dabei als neues Monte-Carlo-Gewicht. Da dieses ebenfalls nicht positiv definit ist, muß wieder das abgespaltenen Vorzeichen $s = \text{sign} \left(\frac{\langle \sigma | E | \sigma' \rangle}{\langle \sigma | \sigma' \rangle} \right)$ mit in den Erwartungswert geschoben werden. Dieses Vorgehen hat unter anderem den Nachteil, daß man nur jeweils einen einzigen physikalischen Erwartungswert in einem Simulationslauf direkt berechnen kann.

Das Mitprotokollieren des Monte-Carlo-Gewichtes ergab, daß die Simulationen Feldkonfigurationen finden, für die w' Werte annimmt, die sehr stark vom Mittelwert $\langle E \rangle$ abweichen. Diese sind noch einmal deutlich höher als die Extremwerte beim Standard-Sampling. Die Simulationen frieren deshalb an diesen Phasenraumpunkten ein, daß Monte-Carlo-Sampling insgesamt versagt. Diese extremen Werte nehmen dabei mit steigender Wechselwirkung und Systemgröße zu. Erwähnenswert dabei ist, daß beispielsweise das 4×4 -System für $U = 2$ erst gar keine solchen Ausreißer findet, selbst wenn man mit sehr vielen MCS simuliert. Dies erklärt dann auch deren Fehlen im Standard-Verfahren. Die Extremwerte treten gerade wieder bei kleinen Skalarprodukten ν der propagierten und danach orthonormierten Wellenfunktionen, also $\nu = \langle \Psi_P(\sigma) | \Psi_P(\sigma') \rangle$, auf. Für die kleinsten Werte bei denen die Simulationen einfroren, galt beispielsweise bei $U = 6$, $\nu \approx 10^{-9}$ beim 4×4 -System und $\nu \approx 10^{-30}$ beim 10×10 -System. Dadurch werden sie auch vom Standard-Sampling eher vermieden, da das kleine ν mit großer Wahrscheinlichkeit auch nur ein kleines $w = |\rho \cdot \nu|$ zur Folge hat, wenn ρ den Beitrag der oberen Dreiecksmatrizen aus den Gram-Schmidt-Zerlegungen zum Monte-Carlo-Gewicht bezeichnet.

Diese Simulationen lassen es doch als sehr Wahrscheinlich erscheinen, daß die Extrembeiträge auch im Standard-Sampling ein Artefakt der Rechnung sind und keine physikalische Bedeutung haben. Da mit dem Betrag auch das Vorzeichen dieser Beiträge eher zufällig ist, sind diese zumindest ein Teil des Vorzeichenproblems. Zu erwähnen bleibt dabei, daß auch die Simulation aus Abschnitt 3.2.4, die sich auf rationale Zahlen beschränkt, beim Sampling mit Hilfe von (4.4) große Monte-Carlo-Gewichte findet. Allerdings sind diese nicht ganz so extrem wie in den Fließkommarechnungen. Man muß dazu aber wieder erwähnen, daß die Rechenzeiten nur sehr kurz waren. Die Instabilität beim Messen ist demnach jedoch sicherlich auch auf die Näherungen in den Zerlegungen von $\exp(-\Theta\mathcal{H})$ zurückzuführen und beruht nicht alleine auf numerischen Problemen. Bemerkenswert dabei ist auch, daß die Simulationen über (4.4) mit $U < 0$ ebenso wie beim quadratischen System mit $L = 16$ und $U = 2$ erst gar keine extrem großen Monte-Carlo-Gewichte w' produzieren. Die Symmetrie zwischen den Elektronen mit unterschiedlicher Spinrichtung unterläuft dort also nicht nur das Vorzeichenproblem sondern verhindert auch Konfigurationen, die problematische Meßwerte liefern.

4.3.2 Singular Value Decomposition

Wie kann man sich erklären, daß die Verteilungen für positives und negatives Vorzeichen so gut zusammenpassen? Dazu werden zuerst die die Propagation erzeugenden Matrizen $P(\sigma)_s^d$ betrachtet, wobei $s \in \{\uparrow, \downarrow\}$ den Elektronenspin und $d \in \{L, R\}$ zwischen der Propagation in $\langle \quad | (\equiv L)$ und $| \quad \rangle (\equiv R)$ von $\langle \exp(-\theta\mathcal{H})\Psi_T | \exp(-\theta\mathcal{H})\Psi_T \rangle$ unterscheidet. Das Gesagte gilt analog für beide Spinrichtungen, darum kann der Index s ab jetzt fallengelassen werden. Durch die Asymmetrie des Hubbard-Stratonovich-Feldes sind die einzelnen $P(\sigma)^d$ ebenfalls nicht symmetrisch, können also nicht diagonalisiert werden. Stattdessen ist es aber möglich, eine Singulärwertzerlegung

$$P^d = U^d \text{diag}(s_1^d, \dots, s_L^d)(V^d)^T \quad (4.5)$$

mit orthogonalen $L \times L$ -Matrizen $U_d = (u_1, \dots, u_L)$ und $V_d = (v_1, \dots, v_l)$ durchzuführen [Gol89]. Man gewinnt beim Mitprotokollieren der Singulärwerte den Eindruck, daß die Projektionseigenschaft von P_d gerade darin zum Ausdruck kommen, daß für genügend großes Θ

$$s_1^d \gg s_2^d \gg \dots \gg s_L^d \quad (4.6)$$

gilt, wobei $s_i^d > 0$ für alle i ist. Allerdings ist dabei anzumerken, daß auch einzelne Hubbard-Stratonovich-Felder auftauchen, für die (4.6) nur eher schlecht zutrifft. Läßt man diese außer Betracht und schreibt die Testwellenfunktion zu $\Psi_T = (\Psi_1, \dots, \Psi_N)$, wenn N die Anzahl der Elektronen gleichen Spins bezeichnet, gilt für die propagierte Testwellenfunktion $\Psi_P^d = (\Psi_1'^d, \dots, \Psi_N'^d)$

$$\Psi_i'^d = \sum_j s_j^d u_j^d \langle v_j^d | \Psi_j \rangle \approx s_i^d \langle v_i^d | \Psi_i^d \rangle u_i^d \quad . \quad (4.7)$$

Dabei wurde für die Näherung (4.6) benutzt und auch schon berücksichtigt, daß auf Grund der Orthonormierung die u_j^d mit $j > i$ aus der Summe näherungsweise herausgerechnet sind. Da die $s_i > 0$ sind, ist das Vorzeichen der Propagation letztlich nur durch die $\langle v_i^d | \psi_i^d \rangle$ und

$$\mathcal{O} = \text{sign}(\det(\langle u_i^L | u_j^R \rangle)) \quad (4.8)$$

festgelegt.

Führt man nun eine Simulation mit der Testwellenfunktion $\Psi_T = \Psi_{WW=0}^T$ bei $U = 2$ durch und protokolliert parallel dazu das Monte-Carlo-Gewicht für die in Kapitel 4.1 schon besprochenen verrauschten Startwellen $\Psi_T = \Psi_{\text{noise}}^T$, erhält man die in Abb. 4.12 und 4.13 mit Lauf_i bezeichneten Verteilungen. Der Index i soll für das indirekte Sampling über $\Psi_T = \Psi_{WW=0}^T$ stehen. Zum Vergleich sind die Gewichte aus den Simulationen, die direkt mit $\Psi_T = \Psi_{\text{noise}}^T$ gerechnet wurden und als Lauf_d bezeichnet sind, jeweils dargestellt. Der Index d steht dabei für direktes Sampling. Wie man erkennt, liegen die Monte-Carlo-Gewichte der Felder, die mittels indirektem Sampling erzeugt werden, beim direkten Lauf noch gut im Maximum der Verteilung. Sie sollten also auch dort mit großer Wahrscheinlichkeit erzeugt werden. Für die Erwartungswerte ist entscheidend,

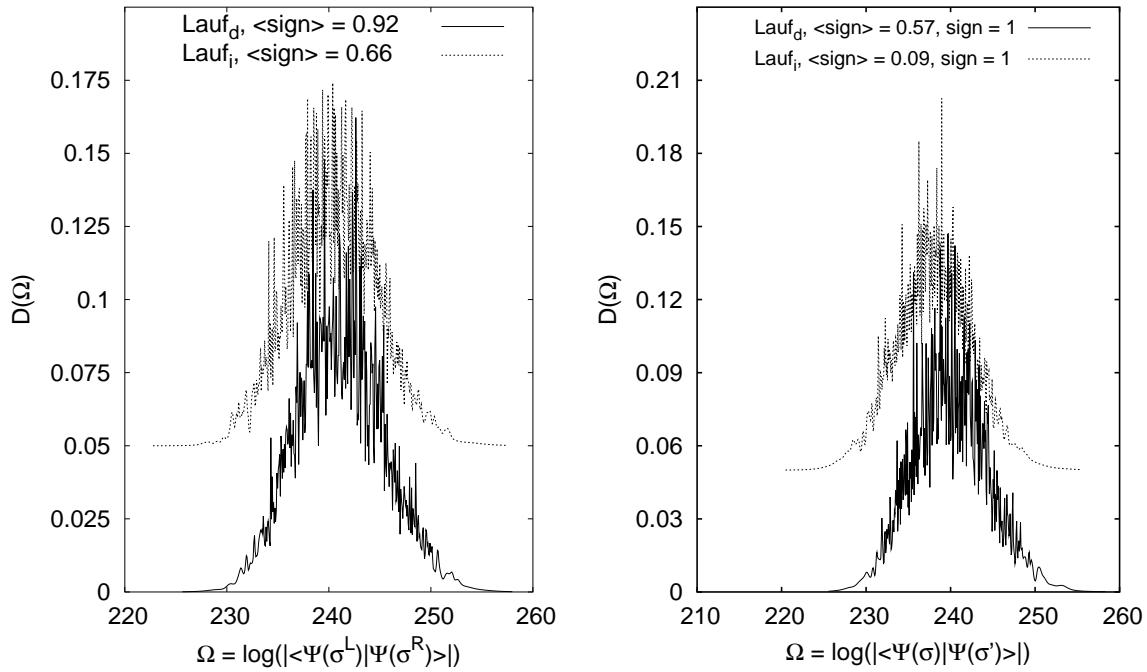


Abbildung 4.12: Monte-Carlo-Gewichte aus direktem (Lauf_d) und indirektem (Lauf_i) Sampling (siehe dazu Haupttext), zwei verschiedene Testwellenfunktionen, bei kleinem $\langle \text{sign} \rangle$ nur Beiträge für gleiches Vorzeichen des Skalarproduktes der propagierten Wellenfunktionen. Simulationsparameter $U = 2, L = 16, t' = -0.22, \tau = \frac{1}{8}, \langle n \rangle = 0.63, \tau = 1/8$ bei insgesamt 64 Trotter-Slices, $\bar{h}_k \approx 3 \cdot 10^{-2}$.

daß die in (B.8) eingehenden Ψ_P^d zuvor orthonormiert werden. Denn die u_i^d hängen nur vom Hubbard-Stratonovich-Feld ab und die $\langle v_i^d | \psi_i \rangle$ gehen durch die Orthonormierung nur noch über das Vorzeichen ein, wenn (4.7) gilt, da U^d bereits eine Orthogonalmatrix ist. Dann können sich die Beiträge einzelner Ising-Feldkonfigurationen von $\Psi_T = \Psi_{WW=0}$ und $\Psi_T = \Psi_{\text{noise}}$ nur über das Vorzeichen unterscheiden. Genau dies ist in den in Abb. 4.6 gezeigten Histogrammen auch zu sehen.

Anzumerken bleibt, daß $\langle \text{sign} \rangle$ für $\Psi_T = \Psi_{\text{noise}}^T$ bei der Simulation, wo die σ -Felder über $\Psi_T = \Psi_{WW=0}^T$ erzeugt wurden, deutlich niedriger war, als in den Läufen, wo $\Psi_T = \Psi_{\text{noise}}^T$ direkt das MC-Gewicht bestimmte. Das Auswandern der Verteilung der Gewichte nach rechts in den Abb. 4.12 und 4.13 beim direkten Sampling entschärft demnach die Vorzeichenproblematik. Die dafür verantwortlichen Felder, die beim indirekten Sampling noch nicht auftraten, sollten daher für die vorherige Betrachtung zum Vorzeichen keine größere Rolle spielen.

Das gerade beschriebene Verhalten wird durch Hubbard-Stratonovich-Felder, für die (4.7) nicht gilt, jedoch maskiert. Für diese Felder ist dabei (4.6) schon für die s_i mit

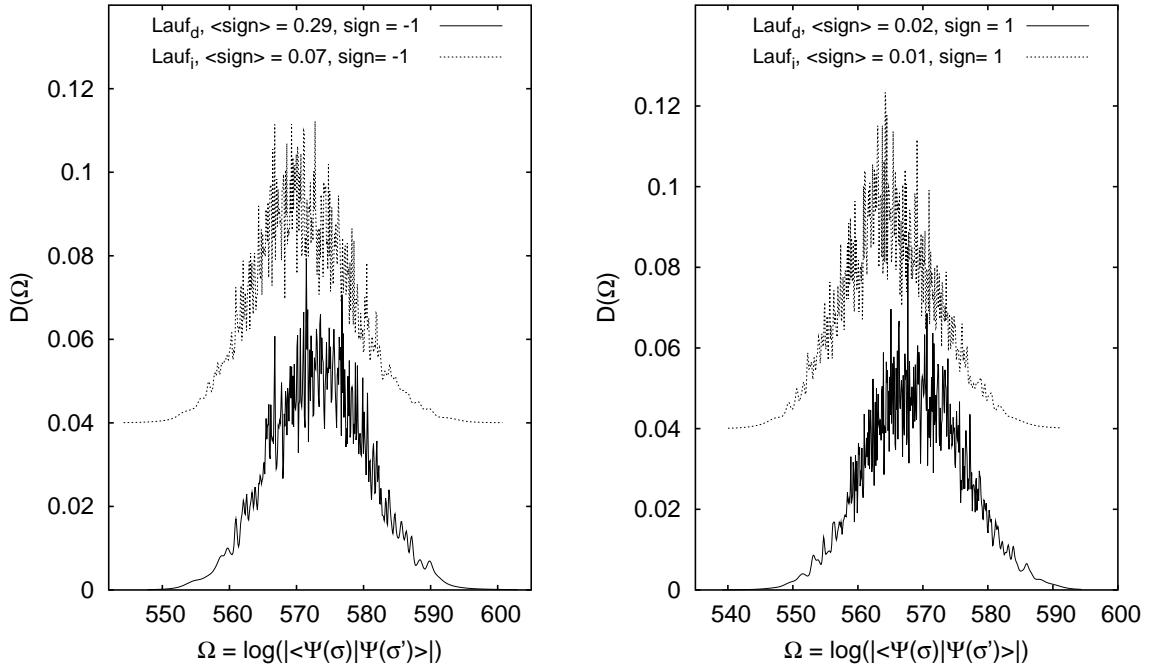


Abbildung 4.13: Monte-Carlo-Gewichte aus direktem (Lauf_d) und indirektem (Lauf_i) Sampling (siehe Haupttext), zwei verschiedene Testwellenfunktionen, bei kleinem ⟨sign⟩ nur Beiträge für gleiches Vorzeichen des Skalarproduktes, welches das MC-Gewicht festlegt, Simulationsparameter $U = 2, L = 36, t' = -0.22, \tau = \frac{1}{8}, \langle n \rangle = 0.72, \tau = 1/8$ bei insgesamt 64 Trotter-Slices, $\bar{h}_k \approx 4 \cdot 10^{-2}$.

$i < N$ nicht mehr hinreichend gut erfüllt. Die Einflüsse von noch tiefer liegenden Singulärwerten können jedoch weiter vernachlässigt werden. Dies zeigten Versuche, die Propagation auf die ersten N Singulärwerte zu beschränken. Ein solches Vorgehen hatte kaum Auswirkungen auf die Erwartungswerte allerdings auch nicht auf das Verhalten der Simulation bezüglich der Vorzeichenproblematik. Zusammengefaßt lässt sich sagen, daß mit größer werdenden Θ und U die sich ergebenden Matrizen $U^d(\sigma)$ und $V^d(\sigma)$ aus den Singulärwertzerlegungen über die Skalarprodukte $\langle v_i^d | \psi_i \rangle$ und Vorzeichen in (4.8) Konfigurationen mit negativem Skalarprodukt der propagierten Wellenfunktionen wahrscheinlicher machen.

Eine mögliche Lösung für das Vorzeichenproblem könnte nun darin bestehen, ein Ensemble von $U^d(\sigma)$ und $V^d(\sigma)$ mit großem Gewicht aus einer beliebigen Testwellenfunktion zu erstellen und in einem weiteren Optimierungsschritt eine Testwelle $\hat{\Psi}_T$ daran anzugelichen, die ein negatives Vorzeichen in (4.8) möglichst oft über die $\langle v_i^d | \hat{\psi}_i \rangle$ kompensiert. Versuche mit Hilfe eines Simulated Annealing Algorithmus (siehe Anhang C) eine solche Wellenfunktion zu finden, brachten allerdings keinen Erfolg. Dabei wurde mit der Testwellenfunktion gestartet über die auch die mitprotokollierten SVD-zerlegten Propagationsoperatoren erzeugt wurden. Ein Move-Versuch bestand nun aus der Anwendung einer ebenen Rotation auf die jeweils gleichen zwei Koordinaten der Einteilchenzustände der Slaterdeterminanten um einen Winkel ϕ . Der Rotationswinkel wurde dabei zufällig aus einem Intervall $]0, a]$, $a < 2\pi$, gewählt. Dabei konnte kein a gefunden werden, für das die Simulation beim Abkühlen gegen eine Slaterdeterminante konvergierte, die mit dem vorgegebenen Propagationsmatrizen ein höheres $\langle \text{sign} \rangle$ produzierte als die ursprüngliche Testwellenfunktion. Die Rechnungen gestalteten sich dabei extrem langwierig, da bei einem Move-Versuch erst alle Vorzeichen mit der neuen Wellenfunktion berechnet werden mußten, so daß der Parameterraum der Simulationen nicht vollständig untersucht werden konnte.

Es stellt sich dabei aber ohnehin die Frage, ob überhaupt eine einzelne Slaterdeterminante gefunden werden kann, die so ein höheres mittleres Vorzeichen gewährleistet, oder ob man schon eine Linearkombination aus mehreren Determinanten braucht. Letztendlich würde dies aber darauf hinaus laufen, daß die numerische Effizienz, mit der der PQMC-Algorithmus implementiert ist, verloren geht.

4.4 Erwartungswerte weiterer Operatoren

Die jetzt folgenden Graphen zu den Verteilungen der einzelnen

$$\langle c_{is}^\dagger c_{js} \rangle \tag{4.9}$$

mit $s \in \{\uparrow, \downarrow\}$ für ausgewählte Paare i, j mit $\|\vec{r}_i - \vec{r}_j\| = r$, stammen aus einem einzelnen Monte-Carlo-Lauf. Sie sollen zeigen, daß die Überlegungen und Beobachtungen in den

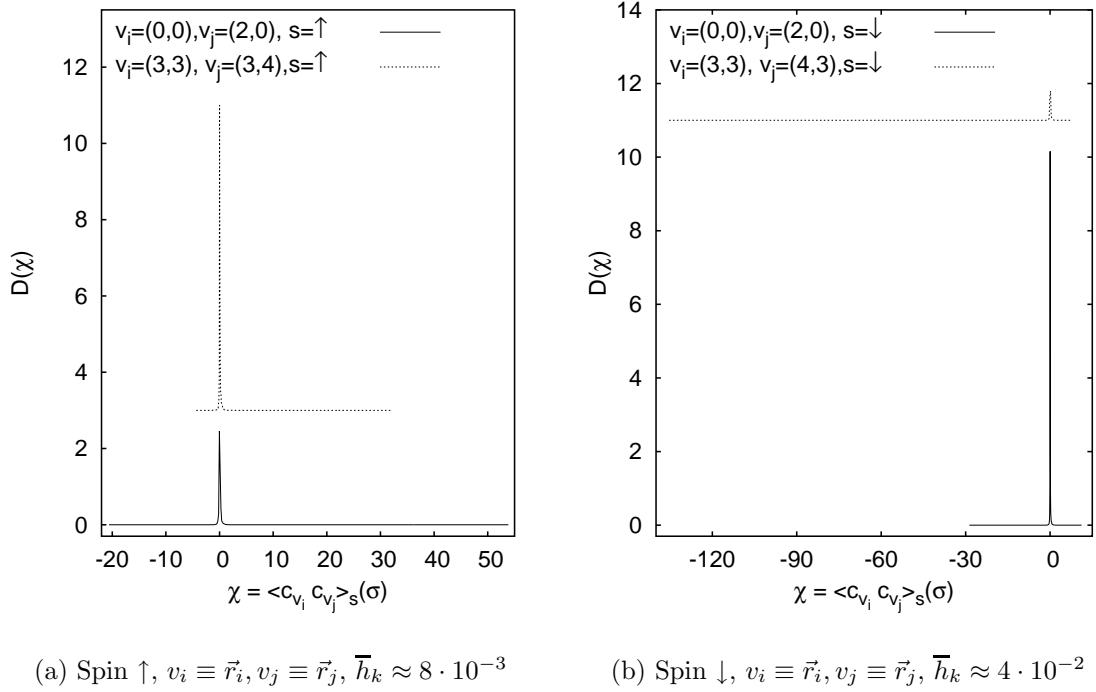


Abbildung 4.14: Exemplarisch für zwei Kombinationen von i und j Verteilung von (4.9) für beide Spinrichtungen über den vollen Wertebereich. Simulationsparameter $L = 16$, $U = 4$, $t = -0.22$, $\langle n \rangle = 0.63$, $\tau = \frac{1}{8}$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices'

vorangegangenen Abschnitten tatsächlich für alle mit der PQMC-Simulation berechenbaren Erwartungswerte gilt. Dieses sind beispielsweise die Spin-Spin-Korrelationsfunktion

$$\chi_s(r) = \frac{1}{L} \sum_i \langle S_i^z S_{i+r}^z \rangle \quad , \quad (4.10)$$

mit den S^z aus (3.8) oder die Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion

$$\chi_c(r) = \frac{1}{L} \sum_i \langle n_i n_{i+r} \rangle \quad , \quad (4.11)$$

mit den n_i , wie sie ebenfalls in (3.8) schon Verwendung fanden.

Denn man stellt fest, daß auch dort schon die Verteilungen der $\langle c_i^\dagger c_j \rangle_s$, $s \in \{\uparrow, \downarrow\}$, bei einanderliegen, die einmal aus allen Beiträgen und einmal nur aus denjenigen, die ein positives Skalarprodukt der propagierten Wellenfunktionen ergeben, gebildet wurden. Dies kann man in den Abb. 4.17 und 4.18 für die Gitter mit $L = 36$ gut nachprüfen. Ein prinzipieller Unterschied zwischen dem Vorzeichenverhalten der Energieerwartungswerte und der Korrelationsfunktionen, wie in der Literatur vermutet [Loh90], kann dann nur über die Beiträge weiter weg von den Maxima bzw. durch die genaue Struktur der

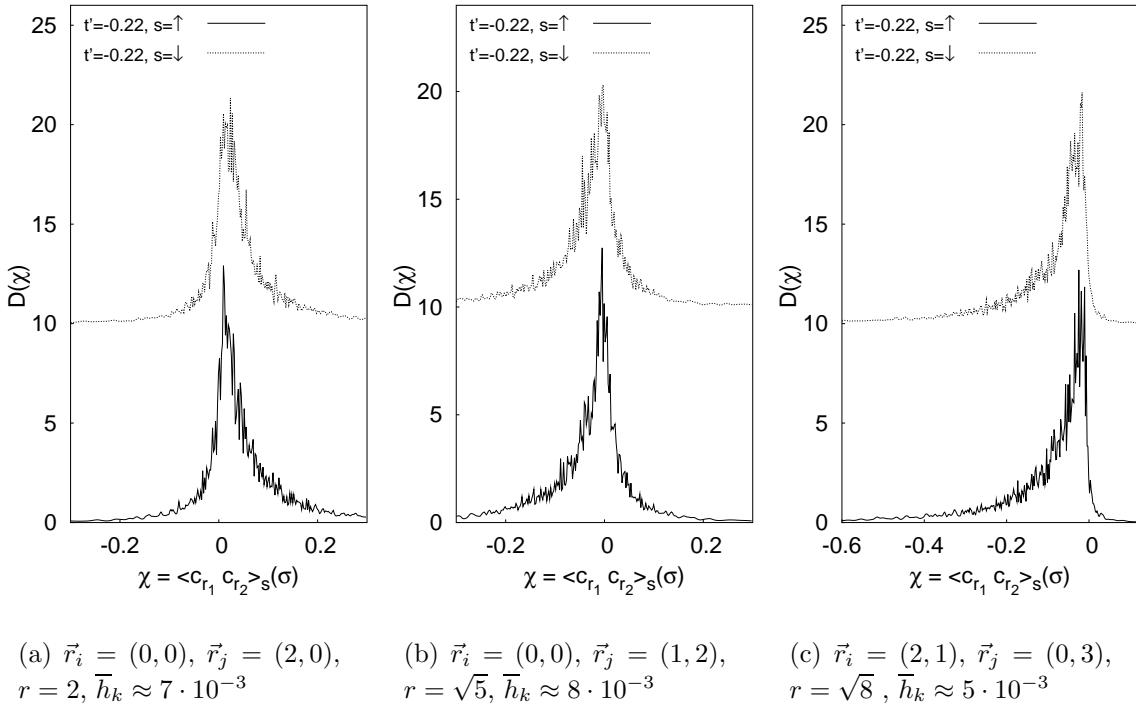
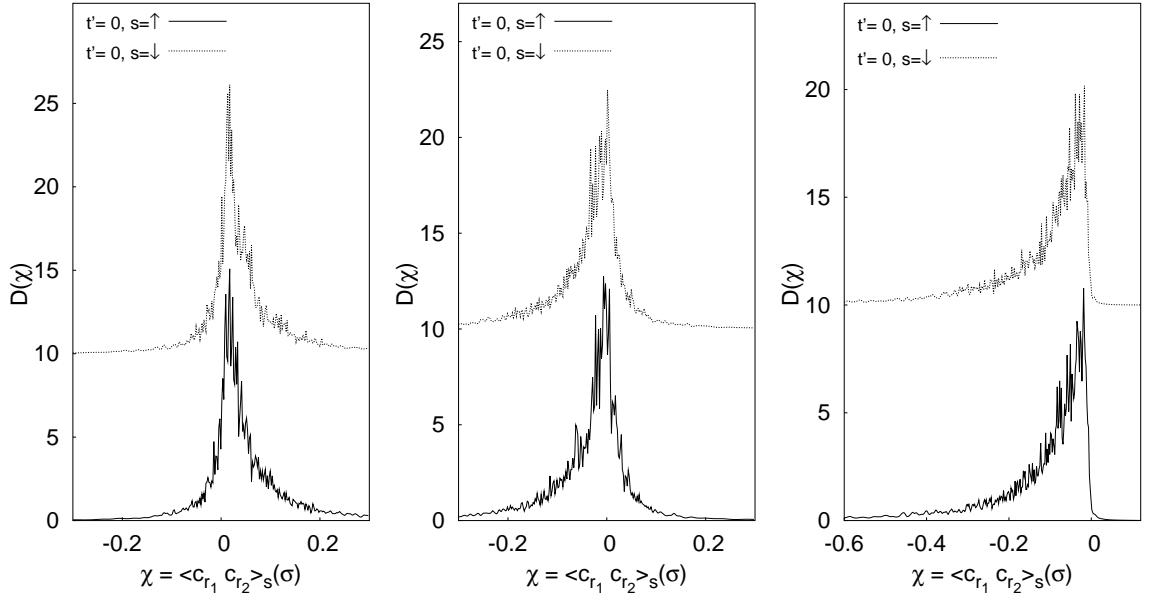


Abbildung 4.15: Verteilungen über ausgewählte $\langle c_i^\dagger c_j \rangle_s$, für einzelne $r = \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|$, Simulationsparameter $L = 16, U = 4, \langle n \rangle = 0.63, t' = -0.22$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices'

Verteilungsmaxima zustande kommen. Ein zusätzlich auftretendes $\langle \text{sign} \rangle$ kann beide Mechanismen noch weiter forcieren.

In den Verteilungen fallen zuallererst wieder besonders die großen Extremwerte auf (siehe Abbildung 4.14). Diese werden, wenn sie nicht ohnehin auf systematischen Fehlern beruhen, nur mit schlechter Statistik erzeugt. Falls die korrekten Erwartungswerte durch eine Mittelwertbildung über diese Ränder bestimmt werden müßten, wäre die numerische Effizienz des PQMC hinfällig. Ein systematischer Unterschied in der Struktur der Verteilungsmaxima zu unterschiedlichen Vorzeichen ist hingegen nicht erkennbar, wie man ebenfalls in den Abb. 4.17 und 4.18 implizit erkennen kann.

Bei dieser Gelegenheit soll noch etwas zur Symmetrie der Verteilungen von $\langle c_i^\dagger c_j \rangle_s$ mit $s = \uparrow$ und $s = \downarrow$ angemerkt sein. Im unzerlegten Hamiltonian 1.3 ist keine der beiden Spinrichtungen ausgezeichnet. Dies bleibt auch im PQMC so, wie man sich wie folgt klarmacht. In den hier gezeigten Simulationen, wo $N_{el} \neq L/2$ galt, war $\Psi_T^\uparrow \equiv \Psi_T^\downarrow$ gesetzt. Für die gewählte Hubbard-Stratonovich-Zerlegung hat das zugehörige Hilfsfeld in (2.16) dann die Eigenschaft, beim Übergang $\sigma_i^j \rightarrow -\sigma_i^j$ für alle i und j die $\langle \sigma \rangle_\downarrow$ zu $\langle \sigma \rangle_\uparrow$ und umgekehrt werden zu lassen. Damit vertauschen auch die $\langle c_i^\dagger c_j \rangle_s$ für verschiedene Spinrichtungen s . Wie man an den Abb. 4.15 bis 4.18 erkennt, wird diese Symmetrie bei



(a) $\vec{r}_i = (0, 0)$, $\vec{r}_j = (2, 0)$,
 $r = 2$, $\bar{h}_k \approx 4 \cdot 10^{-3}$

(b) $\vec{r}_i = (0, 0)$, $\vec{r}_j = (1, 2)$,
 $r = \sqrt{5}$, $\bar{h}_k \approx 4 \cdot 10^{-3}$

(c) $\vec{r}_i = (2, 1)$, $\vec{r}_j = (0, 3)$,
 $r = \sqrt{8}$, $\bar{h}_k \approx 4 \cdot 10^{-3}$

Abbildung 4.16: Verteilungen über ausgewählte $\langle c_i^\dagger c_j \rangle_s$ exemplarisch für einzelne $r = \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|$, Simulationsparamter $L = 16$, $U = 4$, $\langle n \rangle = 0.63$, $t' = 0$. bei insgesamt 64 'Trotter-Slices'

den hier vorgestellten Simulationsläufen auch nicht gebrochen. Die Verteilungen bleiben für beide Spinrichtungen gleich. Dieses Verhalten ist dabei unabhängig von der Größe von $\langle \text{sign} \rangle$, auch beim Auftreten negativer Vorzeichen der Skalarprodukte ändert es sich nicht, wie man an Hand der Verteilungen zum 6×6 -System in den Abbildungen 4.17

Parameter	r	↑		↓	
			sign=1		sign=1
$t = -0.22$	$\sqrt{10}$	-0.024	-0.026	0.014	-0.025
	$\sqrt{13}$	0.040	0.029	0.041	0.030
	$\sqrt{18}$	0.099	0.084	0.070	0.071
$t = 0.$	$\sqrt{10}$	-0.025	-0.022	-0.013	-0.017
	$\sqrt{13}$	0.025	0.024	0.031	0.030
	$\sqrt{18}$	0.105	0.095	0.110	0.103

Tabelle 4.5: Mittelwerte $\langle\langle c_{is}^\dagger c_{js} \rangle\rangle_{MC}$ exemplarisch für einzelne $r = \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|$, Simulationsparamter $L = 36$, $U = 4$, $\langle n \rangle = 0.72$, $\tau = \frac{1}{8}$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices'

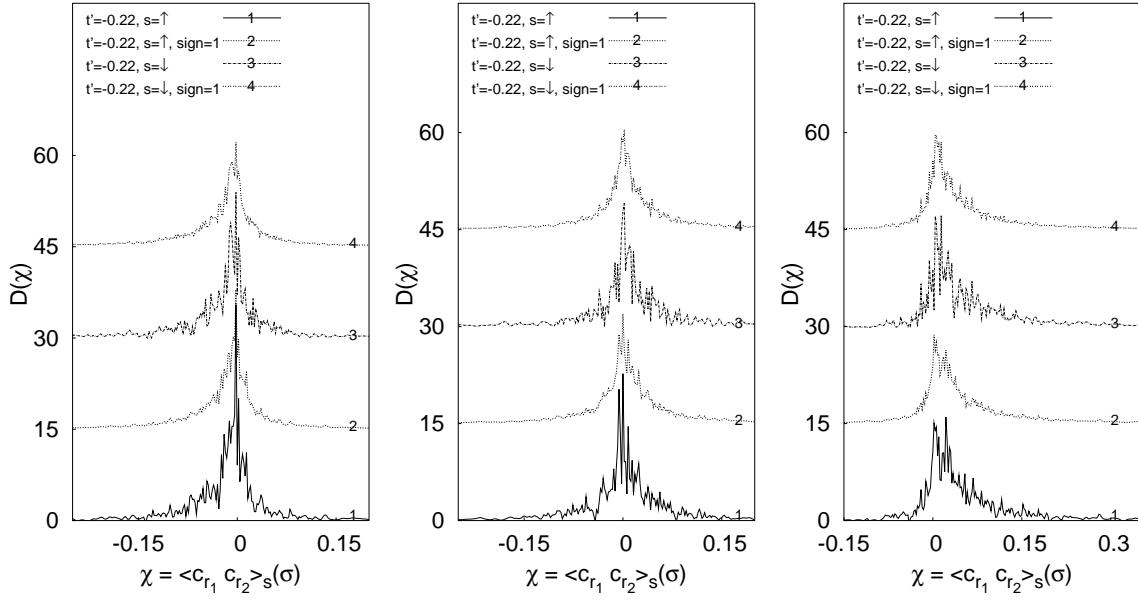


Abbildung 4.17: Verteilungen über ausgewählte $\langle c_i^\dagger c_j \rangle_s$ exemplarisch für einzelne $r = \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|$, Simulationsparameter $L = 36, U = 4, \langle n \rangle = 0.72, t' = -0.22$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices'

und 4.18 erkennen kann. Eine Veränderung der Erwartungswerte über das Aufbrechen dieser Symmetrie bei kleiner werdendem mittleren Vorzeichen liegt im PQMC demnach nicht vor.

Da die jeweils gleichen Beiträge zu unterschiedlichen Hilfsfeldern gehören, werden bei gegebenen \vec{r}_i und \vec{r}_j die beiden Verteilungen für die jeweilige Spinrichtung während des Monte-Carlo-Samplings eher unkorreliert erzeugt. Deren ähnlicher Verlauf ergibt sich erst nachdem die Erwartungswerte für eine Anzahl an Ising-Feldern berechnet wurden. Dies erkennt man unter anderem auch an den Resultaten der empirischen Korrelationsfunktion

$$r = \frac{\sum_{\sigma_i} (c_\uparrow(\sigma_i) - \bar{c}_\uparrow)(c_\downarrow(\sigma_i) - \bar{c}_\downarrow)}{\sqrt{\sum_{\sigma_i} (c_\uparrow(\sigma_i) - \bar{c}_\uparrow)^2 \sum_{\sigma_i} (c_\downarrow(\sigma_i) - \bar{c}_\downarrow)^2}} , \quad (4.12)$$

wobei $\sigma_i = \{\sigma_i^L, \sigma_i^R\}$ wieder eine Konfiguration der Ising-Hilfsfeldes bezeichnet. Weiter gilt $c_s = \langle c_{i,s}^\dagger c_{j,s} \rangle$ und $\bar{c}_s = \langle \langle c_{i,s}^\dagger c_{j,s} \rangle \rangle_{MC}$, $s \in \{\uparrow, \downarrow\}$. In den Simulationen galt $|r| < 0.25$ bei den 4×4 -Systemen und $|r| < 0.1$ bei den 6×6 -Systemen.

Die Verteilungen im 4×4 -System in Abb. 4.15 und 4.16 wurden für die drei größt möglichen Abstände bei kontinuierlichen Randbedingungen gemacht. Für die gegebene Sy-

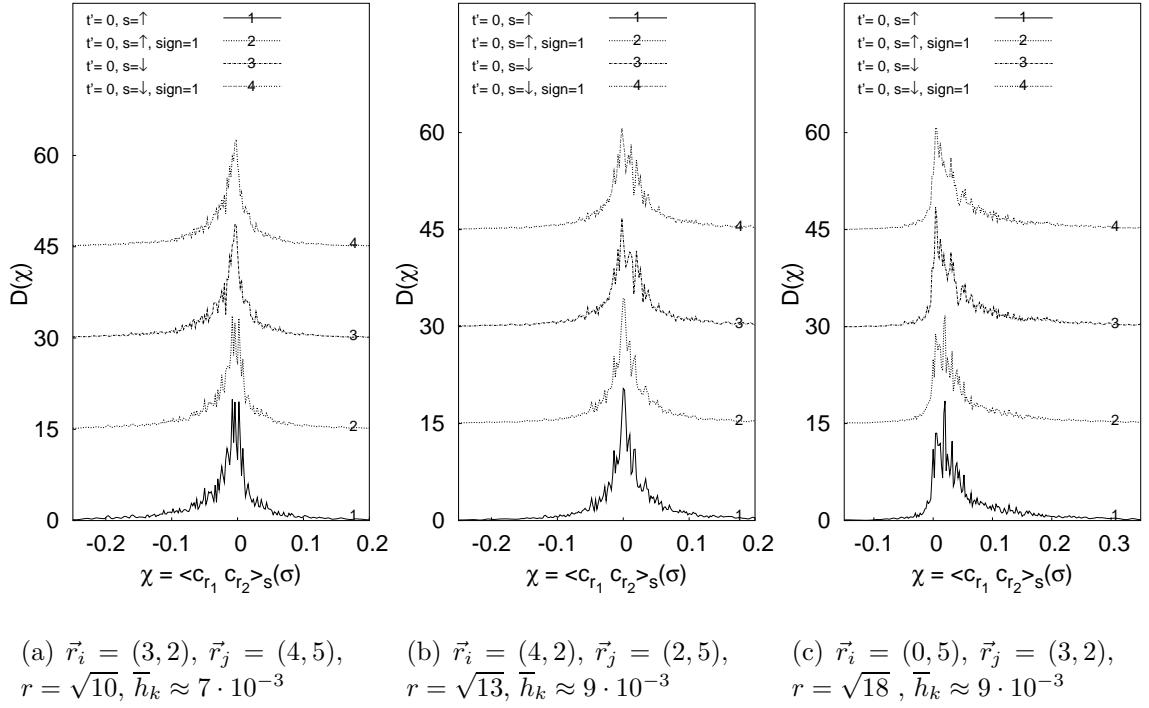


Abbildung 4.18: Verteilungen über ausgewählte $\langle c_i^\dagger c_j \rangle_\uparrow$ exemplarisch für einzelne $r = \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|$, Simulationsparamter $L = 36$, $U = 4$, $\langle n \rangle = 0.72$, $t' = 0$. bei insgesamt 64 'Trotter-Slices'

stemgröße sind dies $r = 2$, $r = \sqrt{5}$ und $r = \sqrt{8}$. Es fällt dabei zuallererst eine signifikante Asymmetrie der Werte um des Verteilungsmaxima herum ins Auge. Am stärksten ausgeprägt ist diese bei $\vec{r}_i = (2, 1)$ und $\vec{r}_j = (0, 3)$ also $r = \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\| = \sqrt{8}$, wie man in den Bildern 4.15(c) und 4.16(c) erkennen kann. Dort liegen die Beiträge für die Verteilungen bis auf wenige Ausnahmen nur im Negativen. Da $r = \sqrt{8}$ der größt mögliche Abstand der c_i und c_j ist, können dafür die stärksten Effekte der endlichen Systemgröße vermutet werden. Warum die Beiträge zur Verteilungen aber nahezu nur auf negative Werte beschränkt sind, erscheint nicht klar. Die Verteilungen zeigen ebenso für $t' \neq 0$ dieselbe Auffälligkeit, verhalten sich also ähnlich wie die Simulationen, wo nur Hopping-Terme zu nächsten Nachbarn berücksichtigt wurden, wie man beim Vergleich der Bilder 4.15 und 4.16 erkennen kann.

Daß es sich beim Eindruck der Asymmetrie in den Verteilungen zu $r = \sqrt{8}$ tatsächlich nur um einen Effekt der endlichen Systemgröße handelt, lassen insbesondere die Bilder Abb. 4.17(c) und 4.18(c) für das 6×6 -System vermuten. Dort erkennt man, daß diese für den jetzt größten Abstand $r = \sqrt{18}$ langsam aufweicht, aber immer noch erkennbar ist. Interessanterweise liegen die Verteilungsmaxima dabei dort gerade im positiven Wertebereich, während sie bei den kleinen Systemen noch im Negativen lagen. In den

Abb. 4.17 und 4.18 sind insgesamt die Verteilungen von $\langle c_i^\dagger c_j \rangle_s(\sigma)$ über ausgewählte Paare i,j mit $\|\vec{r}_i - \vec{r}_j\| = r$ für $r = \sqrt{10}, \sqrt{13}$ und $\sqrt{18}$ zu sehen. Für die beiden kleineren Abstände ist kein so signifikanter Unterschied gegenüber den Verteilungen im kleineren Gitter auszumachen. Man erkennt aber ganz gut, wie das kleiner werdende $\langle \text{sign} \rangle$ die Monte-Carlo-Statistik verschlechtert, ohne jedoch irgendwie die Maxima signifikant zu verschieben.

Wie eingangs des Kapitels schon angesprochen, sehen sich im 6×6 -System bei vorgegebenen i und j die Verteilungen zu (4.9) einmal aus allen Beiträgen und einmal nur mit Beiträgen von Feldern, für die sich ein positives Vorzeichen des Skalarproduktes der propagierten Wellenfunktion ergibt, recht ähnlich. Dies gilt für beide Spinrichtungen. Die Mittelwerte unterscheiden sich dagegen teilweise, wie man in Tabelle 4.5 erkennen kann. Es können maximale Beiträge in der Größenordnung von 100 für einzelne $c_i^\dagger c_j \rangle_s(\sigma)$ vorkommen, wie für Abbildung 4.14 bereits angesprochen. Die Mittelwerte liegen dagegen in der Größenordnung von $1 \cdot 10^{-1}$. Das Verhältnis von Extremwert und Mittelwert liegt also in der Größenordnung von 1000, kommt somit der Anzahl an tatsächlich gemessenen 20000 Werten schon nahe. Dadurch ist es beim Auftauchen von nur wenigen extremen Beiträgen möglich, daß sich der Erwartungswert signifikant verändert. Wie die Diskussion am Ende von Abschnitt 4.2 ergab, können Simulationen mit sehr viel mehr MCS die Ergebnisse des PQMC konsistenter zu den Resultaten anderer Rechenverfahren machen. Da sich dabei die extremen Beiträge eher herausmitteln, sollten diese tatsächlich nichts wesentliches zum Erwartungswert beitragen.

In den bisher veröffentlichten Rechnung erbrachte ohnehin erst die Mittelwertbildung über mehrere Läufe konsistente Ergebnisse [Hus96a]. Dieses Vorgehen sollte in etwas äquivalent dazu sein, mit größeren MCS-Einstellungen zu arbeiten. Dabei können, wie bereits gezeigt wurde, einige Observablen, wie etwa die Energie des Systems, auch schon bei nur einem einzelnen kürzeren Lauf ein brauchbares Ergebnis liefern. Für die hier vorgestellten Simulationseinstellungen konvergieren die Erwartungswerte für ODLRO dagegen sehr viel langsamer, zumindest bei höherem U . Die Beobachtungen in diesem Kapitel legen nahe, daß die Anzahl der Monte-Carlo-Steps der üblichen Simulationsläufe, die sich letztendlich aus der derzeit verfügbaren Rechnerleistung ergeben, bei weitem nicht ausreicht, konsistente Ergebnisse zu bekommen. Dies gilt auch schon für Simulationseinstellungen, die ein eigentlich numerisch noch handhabbares mittlerem Vorzeichen $\langle \text{sign} \rangle$ produzieren. Letztendlich führt der Tausch von Speicherplatz gegen Rechenzeit beim Übergang von der exakten Darstellung zu den Näherung für das PQMC auch dazu, daß nunmehr die notwendige Rechenzeit trotz 'Importance Sampling' technisch nicht mehr aufgebracht werden kann. Ein kleines mittleres Vorzeichen schränkt den dabei zugänglichen Parameterbereich noch weiter ein.

Kapitel 5

Abstandsverhalten der Paarkorrelationen

5.1 Abstandsabhängige Vertex-Korrelation

Um Aussagen über die Reichweite der elektronischen d-Wellen-Korrelationen machen zu können, berechnet man (2.27) als Funktion des Abstandes r , also

$$C_d^V(r) = \frac{1}{\alpha L} \sum_i (C_d(r) - \overline{C_d}(r)_\uparrow \overline{C_d}(r)_\downarrow) , \quad (5.1)$$

wobei die $C_d(r)$ bzw. $\overline{C_d}(r)$ sich mittels Summation der $C_d(i, j)$ aus (2.23) bzw. $\overline{C_d}(i, j)$ aus (2.26) über die α Paare i, j mit $\|\vec{i} - \vec{j}\| = r$ zu festem i und r ergeben. Über das Verhalten der elektronischen Korrelation bei großen Abständen in den Quantensimulationen, speziell für $t' \neq 0$, sind die veröffentlichten Ergebnisse widersprüchlich [Hus96b][Kaz98][Hua01][Vei96]. In diesem Abschnitt soll untersucht werden, inwieweit die durch die Existenz der starken Ausreißer für die Mittelwertbildung nur schlecht konditionierten Verteilungen dafür verantwortlich sind.

5.1.1 Verteilungen über die Vertex-Korrelation

In Kapitel 4.3.1 wurde bereits nahegelegt, daß die extremen Ausreißer ein Artefakt der im Rahmen der numerischen Näherung orthogonal zueinander stehenden Slaterdeterminanten sind. Wie man an den Verteilungen in Kapitel 4.4 bereits sah, zeigen in den kleinen Systemen schon die Beiträge der einzelnen Erwartungswerte $\langle c_i^\dagger c_j \rangle$ das gleiche Verhalten hinsichtlich des Vorzeichens wie die Einzelbeiträge der Energie- und ODLRO-Messungen. Die zwei Verteilungen über die nach dem Vorzeichen aufgespalteten Einzelbeiträge haben einen sehr ähnlichen Verlauf. Bei einem $\langle \text{sign} \rangle$ in der Größenordnung

von 10^{-1} sollte dann der Mittelwert über alle Beiträge immer noch in etwa in der Nähe der Maxima dieser Verteilungen liegen. Um das Verhalten der Verteilungen über (5.1) hinsichtlich des Vorzeichens des Skalarproduktes der propagierten Wellenfunktionen zu studieren, werden jetzt die Histogramme von

$$\Sigma_d(r) = \frac{1}{\alpha L} \sum_i C_d(r) = \frac{1}{\alpha L} \sum_{i, \|\vec{i} - \vec{j}\| = r} \left\langle \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} \rangle \sum_{\delta, \delta'} \langle c_{i+\delta\downarrow}^\dagger c_{j+\delta'\downarrow} \rangle \right\rangle_{MC} \quad (5.2)$$

und

$$V_C^d(r) = \frac{1}{\alpha L} \sum_i \overline{C}_d(r)_\uparrow \overline{C}_d(r)_\downarrow = \frac{1}{\alpha L} \sum_{i, \|\vec{i} - \vec{j}\| = r} \left\langle \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} \rangle \left\langle \sum_{\delta, \delta'} \langle c_{i+\delta\downarrow}^\dagger c_{j+\delta'\downarrow} \rangle \right\rangle_{MC} \right\rangle_{MC} \quad (5.3)$$

verglichen, wobei die Mittelwertbildung $\langle \dots \rangle_{MC}$ in (2.18) definiert ist. Die Differenz aus (5.2) und (5.3) ist gerade wieder $C_d^V(r)$. Unter anderem wird dabei auch die Veränderung des Erwartungswertes von $C_d^V(r)$ untersucht, wenn der zugelassene Wertebereich für (4.9) bei den Elektronen mit Spin \uparrow und für

$$\sum_{\delta, \delta'} \langle c_{i+\delta\downarrow}^\dagger c_{j+\delta'\downarrow} \rangle(\sigma) \quad (5.4)$$

bei den \downarrow -Spin-Elektronen eingeschränkt wird, noch bevor diese in die Berechnung mit eingehen. Insbesondere soll dadurch geklärt werden, ob ein $C_d^V(r) \neq 0$ durch eine unterschiedliche Verteilung von (5.2) und (5.3) entsteht, oder nur unter Einberechnung von sich unter Umständen nicht herausmittelnden, vermutlichen Ausreißern zustande kommt. Das Ausführen der Summe über die δ und δ' in (5.2) und (5.3) noch bevor die Einzelbeiträge protokolliert werden, hilft, den Umfang der Datensätze kleiner zu halten. Dies führt allerdings dazu, daß die Summe über das Gitter der Beiträge zu (4.9) für Spin \uparrow und Spin \downarrow nicht direkt miteinander verglichen werden können. Der Vollständigkeit halber sind aber in Anhang A die Verteilungen für einige der verwendeten $\sum_{\delta, \delta'} \langle c_{i+\delta\downarrow}^\dagger c_{j+\delta'\downarrow} \rangle$ zu sehen.

5.1.2 Beschränkung des Datenumfangs

Um das Histogramm für den Korrekturterm (5.3) zu berechnen, muß man Datensätze für alle einzelnen $\langle c_i^\dagger c_j \rangle$ aufnehmen, die an deren Berechnung beteiligt sind. Deshalb beschränkt sich diese Arbeit auf die Analyse der Histogramme der jeweils drei größten Abstände, abhängig von der Gittergröße. Dies hat den Vorteil, daß durch die als kontinuierlich gewählten Randbedingungen (siehe Kapitel 2.5.2) schon einige $\langle c_i^\dagger c_j \rangle$ zusammenfallen, was den Umfang der benötigten Daten zusätzlich einschränkt. Bei den kleinen Gittern ist es dann aber auch wirklich notwendig, die Summe über δ und δ'

schon vorher auszuführen, da sonst doch wieder für alle Paare i, j Datensätze angelegt werden müßten.

Die Berechnung der Verteilung zu (5.3) gestaltet sich auch dann noch enorm umfangreich. Es liegen M^2 Summanden vor, wenn M die Anzahl der gemessenen Beiträge für ein (4.9) zu festem i, j und s ist. Dies sind viel zu große Datensätze, um daraus noch effizient Verteilungen mit der Kerndichte-Schätzung machen zu können, da diese durch die Verwendung der Exponentialfunktion vergleichsweise rechenzeitintensiv ist. Deshalb wird in diesem Kapitel weitgehend mit gewöhnlichen Histogrammen argumentiert. Da diese auf sehr vielen Stützstellen beruhen, konnten sie dennoch problemlos als Graph über die Höhe der einzelnen Kanäle gezeichnet werden. Dies ermöglicht es, auch wieder mehr als eine Verteilung in eine Abbildung einzuzeichnen. Die Histogramme für die Vertexkorrektur können dabei allerdings nicht mehr hinsichtlich der Vorzeichen des Skalarproduktes der propagierten Slaterdeterminanten aufgespalten werden, sondern nur nach dem Vorzeichen der einzelnen Summanden, da diese ja ein Produkt aus zwei Meßwerten zu unterschiedlichen Hubbard-Stratonovich-Feldern sind.

5.1.3 Kriterien für das Verwerfen von Einzelbeiträgen

Wie man in Abb. 4.14 bereits sah, sind die einzelnen Verteilungen zu (4.9) und (5.4) alleine schon durch extreme Beiträge gekennzeichnet. Es sollten daher für eine im Wer-

t'	$\ \vec{r}_i - \vec{r}_j\ $	LD [$\times 10^{-3}$]	PQMC [$\times 10^{-3}$]	PQMC sign=1 [$\times 10^{-3}$]	PQMC _b [$\times 10^{-3}$]	PQMC _b sign=1 [$\times 10^{-3}$]
-0.22	2	17 ± 1	17.6 ± 1.1	17.3 ± 0.8	15.9 ± 0.6	15.8 ± 0.4
	$\sqrt{5}$	-2 ± 1	-1.5 ± 0.7	-1.9 ± 0.4	-1.5 ± 0.3	-1.6 ± 0.2
	$\sqrt{8}$	8	8.4 ± 1.7	7.9 ± 1.4	7.6 ± 1.2	7.1 ± 1.1
0	2	-	15.7 ± 0.2	15.7 ± 0.2	14.4 ± 0.2	14.4 ± 0.2
	$\sqrt{5}$	-	-1.3 ± 0.2	-1.3 ± 0.2	-1.3 ± 0.2	-1.2 ± 0.2
	$\sqrt{8}$	-	9.4 ± 1.1	9.4 ± 0.9	8.0 ± 0.7	7.9 ± 0.7

Tabelle 5.1: Erwartungswerte von $C_d^V(r)$ mittels unterschiedlicher Methoden berechnet, sign=1 bedeutet nur Felder mit positivem Skalarprodukt der propagierten Wellenfunktionen mit eingerechnet, bei PQMC_b wurde der zulässige Wertebereich für Beiträge zum Erwartungswert beschränkt (siehe dazu Haupttext), die Werte der Lanczos-Diagonalisierung (LD) wurden mit einem Fehler $\approx 10^{-3}$ aus einem Graphen in [Hus96a] abgelesen, Fehlerrechnung mit 100 Bins (Haupttext), Systemparameter $L = 16$, $U = 4$, $\langle n \rangle = 0.63$ und $\tau = \frac{1}{8}$ über insgesamt 64 'Trotter-Slices'.

tebereich beschränkte Berechnung von $C_d^V(r)$ die Beiträge der (4.9) jeweils separat für jedes Paar i und j erfolgen. Dies macht allerdings eine Automatisierung der Berechnung eines zugelassenen Wertebereiches nötig, da sonst für mehrere hundert Verteilungen Abschneidegrenzen von Hand gesetzt werden müßten.

Kann man an ein Histogramm eine Gaußfunktion der Breite σ anfitten, so ist es möglich, Daten mit Hilfe des 'Chauvinistischen Kriteriums' zu verwerfen. Dabei geht man so vor, daß man alle Daten wegläßt, die weiter als d vom Mittelwert der Verteilung weg sind, wobei gilt

$$(1 - \text{erf}(d/\sigma))N = \frac{1}{2} \quad , \quad (5.5)$$

wenn N die Anzahl der Meßwerte und erf das Gaußsche Fehlerintegral bezeichnet [Bro91]. Dieses ist für die Verteilungen, die mit Hilfe der Dichteschätzung (Kapitel 3.2.3) gemacht wurden, beispielsweise nicht praktikabel. Da die Schätzkerne alle mit gleichem Gewicht eingehen, kann eine obere Abschneidegrenze d' , welches $\sum_i (\Theta(d' - X_i)(1 - \text{erf}((d' - X_i)/d_k(X_i))) + \Theta(X_i - d')(\text{erf}((X_i - d')/d_k(X_i)))) = \frac{1}{2N}$ genügt, wenn Θ die Heavysidefunktion ist und die d_k wie in Kapitel 3.2.3 definiert sind, nur in der Nähe der Maxima der extremsten Beiträge liegen.

Ist keine Korrelation zwischen den einzelnen Beiträgen des Monte-Carlo-Samplings vorhanden, streut dessen Mittelwert um eine Gaußverteilung mit einer Breite $\propto \frac{1}{\sqrt{N}}$ (siehe Anhang C). Ein mögliches Verfahren, systematische Fehler zu erkennen, wäre nun, die protokollierten Daten in einzelne, gleich große Bins aufzuteilen und nachzusehen, welche davon mit ihren Mittelwerten eine signifikante Abweichung von der Normalverteilung verursachen. Dies sollte gerade für diejenigen der Fall sein, die die extremen Werte enthalten. Allerdings hat sich dieses Vorgehen als viel zu aufwendig herausgestellt, um so für jede einzelne Verteilung von (4.9) und (5.4) die vermuteten Ausreißer zu identifizieren.

Legt man stattdessen das zugelassene Intervall auf die in den Abbildungen 4.15-4.18 und A.4-A.7 fest, werden die Werte für $C_d^V(r)$ gemittelt über die Beiträge in diesem Wertebereich sehr klein (Für die Lage des jeweiligen 0-Punktes der y-Achse sei wieder auf die Anmerkung in Abschnitt 3.2.3 verwiesen). Da wie in Kapitel 4 besprochen, die PQMC-Resultate für die Systemgröße 4×4 noch recht gut mit den Ergebnissen anderer Verfahren zur Berechnung der Grundzustandsenergie übereinstimmen, war dies eine offenbar zu harte Einschränkung. Nimmt man die Ausläufer der Verteilungen dagegen noch mit, fallen lediglich $\approx 0.1\%$ der Daten weg. Welchen Umfang die dann tatsächlich verwendeten Verteilungen hatten, ist exemplarisch für einige Paare i, j in Anhang A.4 gezeigt. Die flachen Flanken der dort zu sehenden Verteilung müssen demnach in die Mittelwertbildung mit einbezogen werden. Schwierigkeiten sollten demnach also lediglich die äußersten Ränder der Verteilungen machen, die eben nur von wenigen extremen Beiträgen gebildet werden, welche allerdings sehr große Werte annehmen können. Die Grenzen wurden für die Beiträge mit positivem und negativem Monte-Carlo-Vorzeichen

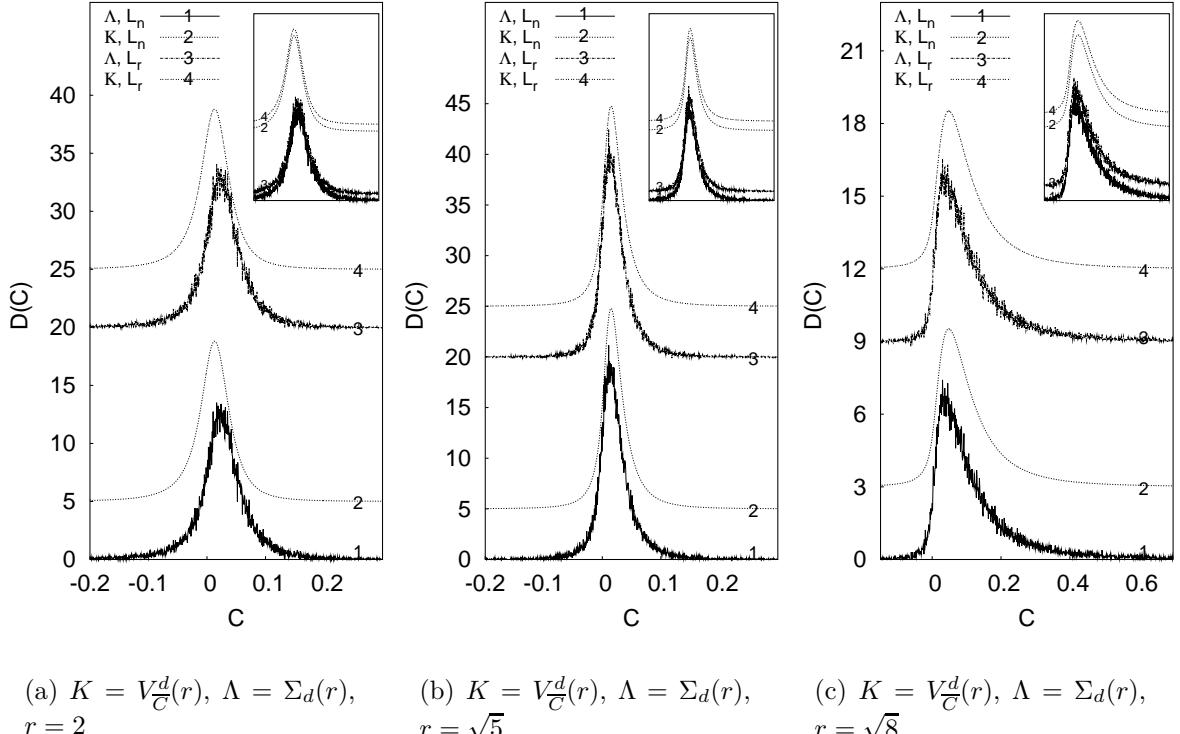


Abbildung 5.1: Verteilungen über (5.2) und (5.3), $C_d^V(r) = K - \Lambda$; L_ξ , $\xi \in \{n, r\}$, unterscheidet normale und eingeschränkte Mittelwertbildung (siehe Haupttext), Inlets vergleichen Observablen hinsichtlich ξ , Systemparameter $L = 16$, $U = 4$, $t' = -0.22$, $\langle n \rangle = 0.63$, $\tau = \frac{1}{8}$ mit insgesamt 64 'Trotter-Slices'.

getrennt festgelegt, um das mittlere Vorzeichen nicht systematisch zu verändern.

5.2 d-Wellen-Korrelation und Vertexkorrektur

5.2.1 Quadratische Systeme mit $L=16$

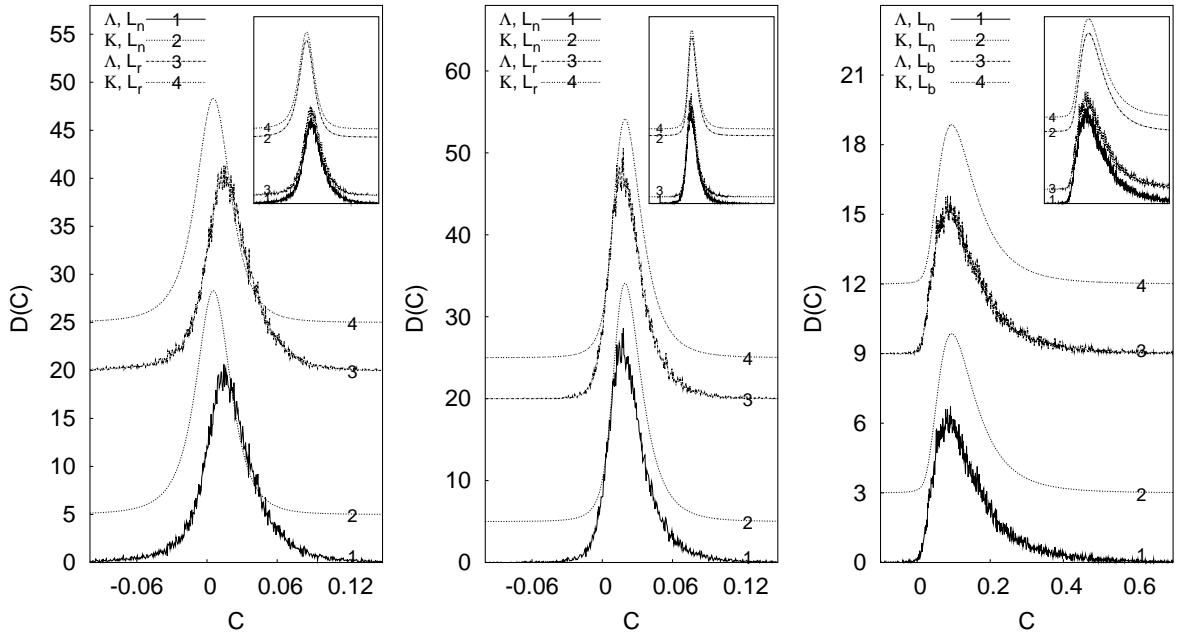
Da der Aufwand der Datenprotokollierung schon im 4×4 -System für einen einzelnen Lauf recht hoch ist (in der Größenordnung 100 MB), konnten nur jeweils 2 Läufe für jede Simulationseinstellung gemacht werden. Dieses Vorgehen lässt es zumindest eher unwahrscheinlich erscheinen, daß Werte einer Simulation diskutiert werden, deren Markov-Prozeß beispielsweise auf Grund ungeeigneter Seed-Werte des Zufallszahlengenerators in numerische Schwierigkeiten gelaufen ist. In jeder Simulation wurden $5 \cdot 10^5$ MCS für das Einlaufen in die Gleichgewichtsverteilung verwendet und anschließend $1 \cdot 10^6$ MCS für die Aufnahme der Meßwerte simuliert. Zwischen zwei Messungen lagen 50 MCS,

Parameter	r	beschränkt	min.	max.
$L = 16$ $U = 4, t' = -0.22$ $\langle n \rangle = 0.63$	2.0	nein	-16.68	11.03
		ja	-1.31	11.03
	$\sqrt{5}$	nein	-14.56	3.88
		ja	-1.04	0.72
	$\sqrt{8}$	nein	-10.86	12.22
		ja	-10.86	3.96
$L = 16$ $U = 4, t' = 0.0$ $\langle n \rangle = 0.63$	2.0	nein	-0.75	0.73
		ja	-0.33	0.22
	$\sqrt{5}$	nein	-0.51	0.28
		ja	-0.07	0.24
	$\sqrt{8}$	nein	-0.49	7.85
		ja	-0.31	1.65

Tabelle 5.2: Minimale und maximale Beiträge zur Mittelwertbildung von (5.2) für die verschiedenen r in den vorgestellten Simulationen. Die Systeme wurden mit $\tau = \frac{1}{8}$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices' simuliert.

was insgesamt 20000 Beiträge ergibt. Dabei wurden keine signifikanten Abweichungen in den jeweiligen Verteilungen für die beiden Läufe festgestellt. Um die Statistik zu verbessern, sind die gezeigten Verteilungen über die beiden Rechnungen gemittelt. Die Simulationen wurden alle für $U = 4$ und $\langle n \rangle = 0.63$ gemacht und es sind Läufe mit $t' = -0.22$ und $t' = 0$ gegenübergestellt. Dabei ergab sich immer ein $\langle \text{sign} \rangle > 0.9$.

Generell bleibt anzumerken, daß die Ermittlung der korrigierten Vertexkorrelationsfunktionen ein numerisch äußerst schwieriges Unterfangen ist. Wie man in den Graphen sieht, sind die Schwankungen im Histogramm über die Beiträge zu (5.3) sehr viel kleiner, als in der Verteilung über diejenigen zu (5.2). Dies liegt wohl daran, daß erstere sich aus M mal mehr Beiträgen zusammensetzen, wenn M die Anzahl der aufgenommenen Werte ist. Dann sollte auch der Fehler von (5.3) um \sqrt{M} kleiner sein. Deshalb wurde dieser in der Fehlerrechnung vernachlässigt. Trotzdem sind die Fehler aus einer Binning-Rechnung mit 100 Bins noch sehr groß, obwohl das Verteilungsmaximum für (5.2) gut ausgeprägt ist. Die Probleme beruhen daher wohl eher darauf, daß auch bei Abwesenheit eines Vorzeichenproblems durch die Differenzbildung bei der Vertexkorrektur die mit den üblichen Rechenzeiten gewonnenen Ergebnisse durch die Randwerte noch stark beeinflußt werden können. Dies unterstreicht auch der signifikante Einfluß der Flanken der Verteilungen von (4.9) und (5.4) auf den Mittelwert, wie er in der Diskussion zur Festlegung der Abschneidegrenzen diskutiert wurde. Bei kleiner werdendem $\langle \text{sign} \rangle$ wird



(a) $K = V_{\overline{C}}^d(r)$, $\Lambda = \Sigma_d(r)$,
 $r = 2$ (b) $K = V_{\overline{C}}^d(r)$, $\Lambda = \Sigma_d(r)$,
 $r = \sqrt{4}$ (c) $K = V_{\overline{C}}^d(r)$, $\Lambda = \Sigma_d(r)$,
 $r = \sqrt{8}$

Abbildung 5.2: Verteilungen über (5.2) und (5.3), $C_d^V(r) = K - \Lambda$; L_ξ , $\xi \in \{n, r\}$, unterscheidet normale und eingeschränkte Mittelwertbildung (siehe Haupttext), Inlets vergleichen Observablen hinsichtlich ξ , Systemparameter $L = 16$, $U = 4$, $t' = 0$, $\langle n \rangle = 0.63$, $\tau = \frac{1}{8}$ mit insgesamt 64 'Trotter-Slices'

diese Problematik dann noch verschärft.

In Abb. 5.1 sind jeweils die Verteilungen zu (5.2) und (5.3) für $\|\vec{r}_i - \vec{r}_j\| = 2, \sqrt{4}$ und $\sqrt{8}$ gegenübergestellt. Einmal unter Hinzunahme aller Beiträge zu den (4.9) bzw. (5.4) und einmal unter Vernachlässigung der Beiträge, die außerhalb gewisser Grenzen lagen, die wie eingangs des Abschnittes beschrieben, festgelegt wurden. Wie man erkennt, ergeben sich die großen $C_d^V(r)$ für $r = 2$ und $r = \sqrt{8}$ auf unterschiedliche Weise. Beim kleineren Abstand sehen sich die Verteilungen für die beiden Summanden qualitativ recht ähnlich, allerdings sind die Mittelwerte gegeneinander verschoben. Beim großen Abstand fällt die positive Flanke der Verteilung über die Beiträge zu (5.2) scheinbar langsamer ab als diejenige zu (5.3). Allerdings ist der Unterschied in den Histogrammen nicht gut zu erkennen. Dies bleibt auch so, wenn diese wie in Abb. 5.3(a) direkt übereinander gelegt werden. Das Maximum des Korrekturterms liegt im Gegensatz zum Mittelwert auf einem etwas höheren Wert als jenes für die volle Vertexkorrelation. Nimmt man nur die relative Verschiebung der Verteilungsmaxima von (5.2) und (5.3) als Maßstab für die Existenz von ODLRO, so kann man mit Ausnahme von $r = \sqrt{8}$ die Ergebnisse der

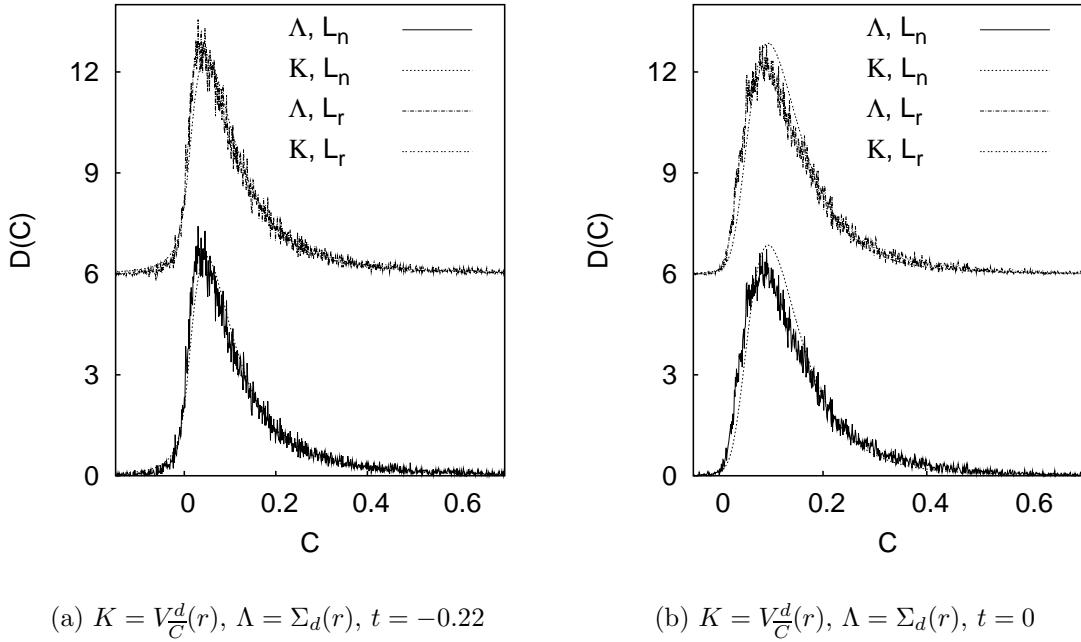


Abbildung 5.3: Verteilungen (5.2) und (5.3) mit $r = \sqrt{8}$ im direkten Vergleich. L_ξ , $\xi \in \{n, r\}$, indiziert normale und beschränkte Mittelwertbildung (siehe Haupttext), Systemparameter $L = 16$, $U = 4$, $\langle n \rangle = 0.63$, $\tau = \frac{1}{8}$ mit insgesamt 64 'Trotter-Slices'

Lanczos-Diagonalisierung qualitativ wiedererkennen.

Der numerische Wert, der sich für die $C_d^V(r)$ aus dem PQMC ergibt, stimmt, wie bereits angedeutet, für alle r gut mit dem entsprechenden Erwartungswert der Lanczos-Diagonalisierung überein [Hus96a]. Dies wird auch in Tabelle 5.1 ungefähr bestätigt. Die Mittelwerte der beschränkten Summation sind dabei durchweg kleiner, liegen aber in etwa innerhalb des Ablesefehlers der Lanczos-Daten. Dabei bleibt es aber fraglich, wie gut die Übereinstimmung zwischen exakter Diagonalisierung und PQMC tatsächlich sein muß. Denn im PQMC sind wegen des endlichen Projektionsfaktors Θ ja sicher noch Anteile von energetisch höheren Zuständen mit im Mittelwert enthalten. Möglicherweise kompensieren sich diese Abweichungen gerade durch die verworfenen Extrembeiträge, was eine scheinbar bessere Übereinstimmung für die nicht aufbereiteten Daten zur Folge hat. Vergleicht man den Verlauf der vollen und der beschnittenen Datensätze an den Maxima der Verteilungen, wie sie in den Insets in Abbildung 5.1 zu sehen sind, so fällt kein signifikanter Unterschied auf. Dabei war es jedoch, wie bereits vorher schon angeführt, wichtig, die eher langsam abfallenden Flanken der Maxima der einzelnen Verteilungen von (4.9) und (5.4) in die Mittelwertbildung mit einzubeziehen.

Auch für $t' = 0$ werden die Erwartungswerte von $C_d^V(r)$ beim Weglassen der Extrem-

beiträge für alle r etwas kleiner. Wie man durch Vergleich der Werte in Tabelle 5.1 weiter sieht, vergrößert ein $t' = -0.22$ nur für $r = 2$ und $r = \sqrt{5}$ die Vertexkorrelation. Bei $r = \sqrt{8}$ dagegen wird diese eher etwas unterdrückt. Dabei fällt auf, daß der Unterschied zwischen den rechten Flanken der Verteilungen zu (5.2) und (5.3) für dieses r etwas signifikanter ist, als im Fall $t' = -0.22$, wie ein Vergleich der Abbildungen 5.3(a) und 5.3(b) zeigt. Dies hat dann auch einen größeren Wert für $C_d^V(r)$ zur Folge. Daran erkennt man noch einmal, wie marginal die Effekte nur zu sein brauchen, um relative Änderungen des Erwartungswertes der korrigierten Vertexkorrelationsfunktion von über 10 % zu bewirken.

In Abb. 5.2 sind wieder die Verteilungen (5.2) und (5.3) für $\|\vec{r}_i - \vec{r}_j\| = 2, \sqrt{4}$ und $\sqrt{8}$ diesmal für $t' = 0$ miteinander verglichen. Diese zeigen qualitativ das gleiche Verhalten wie im Fall $t' \neq 0$. Für die beiden kleineren Abstände haben die beiden Verteilungen jeweils in etwa die gleiche Form; bei einem resultierenden $C_d^V(r)$ ist der Mittelwert von (5.3) jedoch etwas kleiner. Die Breite der Verteilung ist ebenfalls wieder sehr viel größer als die resultierende Differenz für $C_d^V(r)$. Das besondere Verhalten von $C_d^V(r = \sqrt{8})$ bezüglich der Form der Verteilungen und der Lage deren Maxima ist auch hier zu beobachten. Ursächlich dafür sollten die periodischen Randbedingungen sein, da für das größte mögliche r alleine Beiträge von Abständen $\|\vec{r}_i - \vec{r}_j\| = r$ generiert werden, die die Periodizität der Ränder voraussetzen. Das unterstreichen auch die Beobachtungen zu den Verteilungen über die (4.9) in Kapitel 4.4. Wie sich dies in den größeren Systemen äußert, die nicht mehr so stark von Randbedingungen beeinflußt sein sollten, wird im folgenden Abschnitt besprochen.

t'	$\ \vec{r}_i - \vec{r}_j\ $	PQMC [$\times 10^{-3}$]	PQMC sign=1 [$\times 10^{-3}$]	PQMC _b [$\times 10^{-3}$]	PQMC _b sign=1 [$\times 10^{-3}$]
-0.22	$\sqrt{10}$	2.8 ± 5.0	3.2 ± 1.3	2.1 ± 1.0	2.5 ± 0.2
	$\sqrt{13}$	2.4 ± 3.4	-0.2 ± 1.0	2.0 ± 0.9	0.5 ± 0.3
	$\sqrt{18}$	9.8 ± 8.5	4.3 ± 2.5	3.1 ± 2.5	2.0 ± 0.7
0	$\sqrt{10}$	3.5 ± 0.8	2.6 ± 0.3	2.5 ± 0.2	2.0 ± 0.1
	$\sqrt{13}$	2.5 ± 0.6	2.0 ± 0.4	1.6 ± 0.2	1.3 ± 0.2
	$\sqrt{18}$	5.7 ± 1.4	3.9 ± 0.9	3.1 ± 0.9	2.5 ± 0.5

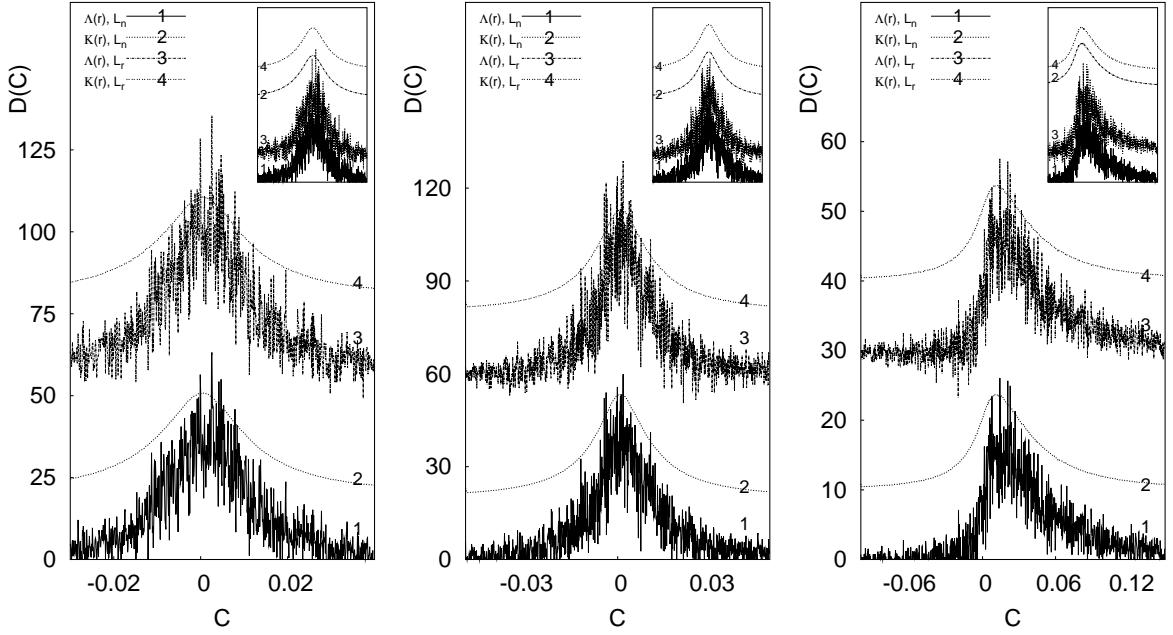
Tabelle 5.3: Erwartungswerte von $C_d^V(r)$ aus dem PQMC, sign=1/-1 bedeutet nur Fehler mit positivem/negativem Skalarprodukt der propagierten Slaterdeterminanten mit eingerechnet, bei PQMC_b wurde der zulässige Wertebereich für Beiträge zum Erwartungswert beschränkt (siehe dazu Haupttext), Fehlerrechnung mit 100 Bins (Haupttext), Systemparameter $L = 36$, $U = 4$, $\langle n \rangle = 0.72$ und $\tau = \frac{1}{8}$ über insgesamt 64 'Trotter-Slices'.

5.2.2 Quadratische Systeme mit $L=36$

Bei den 4×4 -System wird ein auch durch die exakte Diagonalisierung bestätigtes, nicht verschwindendes $C_d^V(r)$ für ausgewählte r gefunden. Es stellt sich nun die Frage, ob dies seine Ursache in den wegen der kleinen Systemgröße zweifellos noch stark begrenzten überhaupt möglichen Abständen hat, also ein so genannter 'Finite-Size'-Effekt ist, oder auch für größere L bestehen bleibt. Daher wird zunächst zum 6×6 -System übergegangen, wobei wieder mit derselben Anzahl an MCS gerechnet wurde wie bei den kleineren Systemen. Es lagen also ebenfalls 20000 Meßpunkte vor, die alle 50 MCS aufgenommen wurden.

Betrachtet man die gemittelten Verteilungen der $C_d^V(r)$ für die drei größten Abstände $r = \sqrt{10}$, $\sqrt{13}$ und $\sqrt{18}$ aus wiederum nur 2 Simulationsläufen im Gitter mit $L = 36$, so erkennt man in den Abb. 5.4(a)-5.4(c) schon alleine an den Histogrammen die größeren numerischen Schwierigkeiten, die mit der Bestimmung der Differenz von (5.2) und (5.3) verbunden sind. Da dabei $\langle \text{sign} \rangle \approx 0.29$ galt, kann dies nicht allein auf das Vorzeichenproblem zurückgeführt werden. Die vermutlichen Maxima der resultierenden Verteilungen liegen hier jedoch wieder in der Größenordnung der Werte, die auch bei Rechnungen mit Hilfe anderer Verfahren bei allerdings kleinerem U ermittelt wurden [Hus96a]. Dies gilt auch bereits, wenn man nur Beiträge mit positivem bzw. nur negativem Monte-Carlo-Vorzeichen betrachtet, wie man in den Abb. 5.5(a)-5.5(c) erkennt. Das Vorzeichen kann demnach nur als schwache Störung für (5.2) bzw. (5.3) angesehen werden. Daß es dabei über die Differenzbildung die Ergebnisse gezielt Richtung d-Wellen-Korrelation treibt, ist beim Vergleich innerhalb der Verteilungspaare für Beiträge mit jeweils unterschiedlichem Vorzeichen des Skalarproduktes der propagierten Slaterdeterminanten in Abb. 5.5 eher zu verneinen. Lediglich bei $r = \sqrt{18}$ deutet sich ein signifikanter Unterschied in den Verteilungen von (5.2) für das jeweilig Vorzeichen des Skalarproduktes an, wie Abbildung 5.5(c) zeigt. Letztendlich haben aber die beiden Verteilungen über (5.2) und (5.3) bei Hinzunahme der Vorzeichen einen sehr ähnlichen Verlauf, wie 5.4(c) zeigt. Es bleibt auch zu fragen, ob die Abweichung tatsächlich das physikalische Verhalten wiedergibt oder nur Ausdruck des eher allmählichen Abklingens von 'Finite-Size'-Effekten ist, die das $C_d^V(r = \sqrt{18})$ offenbar immer noch kennzeichnen.

Auch eine qualitative Analyse über die relative Lage der Maxima der Verteilungen über die Beiträge zu (5.2) und (5.3) gelingt nicht mehr. Die einzige Aussage, die dazu wohl machbar wäre, ist, daß $C_d^V(r) \approx \mathcal{O}(10^{-3})$ gilt. Denn eine Größenordnung mehr läßt sich im 4×4 -Gitter für $r = 2$ noch gut an einer relativen Verschiebung der Verteilungsmaxima erkennen, wie die Ergebnisse im vorhergehenden Abschnitt zeigen. Diese Größenordnung kann man allerdings auch schon aus den Mittelwerten in Tabelle 5.3 ersehen, die weiter unten noch genauer diskutiert wird. Die Beschränkung des zulässigen Wertebereiches für (4.9) bei den \uparrow -Elektronen bzw. (5.4) bei den Elektronen mit Spin \downarrow geschah wieder durch Verwerfen von 0.1 % der betragsmäßig größten Werte. Dies hat

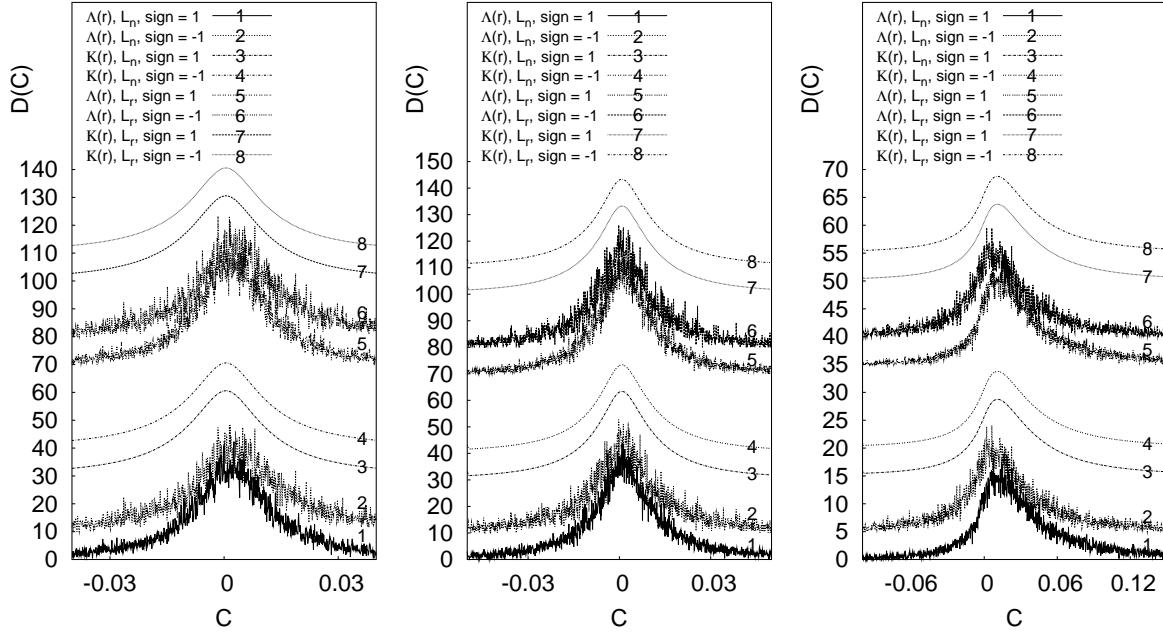


(a) $K = V_C^d(r)$, $\Lambda = \Sigma_d(r)$,
 $r = \sqrt{10}$ (b) $K = V_{\overline{C}}^d(r)$, $\Lambda = \Sigma_d(r)$,
 $r = \sqrt{13}$ (c) $K = V_{\overline{C}}^d(r)$, $\Lambda = \Sigma_d(r)$,
 $r = \sqrt{18}$

Abbildung 5.4: Verteilungen über (5.2) und (5.3), $C_d^V(r) = K - \Lambda$; L_ξ , $\xi \in \{n, r\}$, unterscheidet normale und eingeschränkte Mittelwertbildung (siehe Haupttext), Inlets vergleichen Observablen hinsichtlich ξ , Systemparameter $L = 36$, $U = 4$, $t' = -0.22$, $\langle n \rangle = 0.72$, $\tau = \frac{1}{8}$ mit insgesamt 64 'Trotter-Slices'

wiederum keine sichtbaren Auswirkungen auf die Maxima der Verteilungen, wie man insbesondere an den Inlets in Abbildung 5.4 sieht. Dennoch werden die extremsten Beiträge zu (5.2) erheblich kleiner, wie man Tabelle 5.4 entnimmt. Das mittlere Vorzeichen $\langle \text{sign} \rangle$ der im Wertebereich beschränkten Verteilung unterscheidet sich dabei nur unwesentlich von demjenigen des vollen Datensatzes. Das Festlegen der Ausreißer geschah ja auch getrennt für die Beiträge bei jeweils anderem Vorzeichen des Skalarproduktes zwischen den durch das jeweilige Hubbard-Stratonovich propagierten Testwellenfunktionen. Es ist allerdings möglich, daß man dadurch auch gerade systematische Fehler ignoriert, die bei nur einem der Vorzeichen auftreten.

Dies mag einer der Gründe sein, daß das Weglassen der extremen Beiträge nur bedingt einen stabilisierenden Einfluß auf die Mittelwerte hat, wie man in Tabelle 5.3 sieht. Die Fehler, die analog dem Vorgehen bei den 4×4 -Systemen berechnet wurden, sind dann zwar durchweg kleiner, aber immer noch sehr hoch. Sowohl das Ignorieren der Extremwerte als auch die Beschränkung der Mittelwerte auf Beiträge mit nur positivem Skalarprodukt der propagierten Slaterdeterminanten kann den Erwartungswert von $C_d^V(r)$



(a) $K = V_C^d(r), \Lambda = \Sigma_d(r), r = \sqrt{10}$, (b) $K = V_C^d(r), \Lambda = \Sigma_d(r), r = \sqrt{13}$, (c) $K = V_C^d(r), \Lambda = \Sigma_d(r), r = \sqrt{18}$

Abbildung 5.5: Verteilungen über (5.2) und (5.3), aufgespalten nach sign, $C_d^V(r) = K - \Lambda, L_\xi, \xi \in \{n, r\}$, indiziert normale und beschränkte Mittelwertbildung (siehe Haupttext), Systemparameter $L = 36, U = 4, t' = -0.22, \langle n \rangle = 0.72, \tau = \frac{1}{8}$ mit insgesamt 64 'Trotter-Slices'

stark verändern. Dabei unterscheiden sich die Werte letzterer Mittelwertbildung von der korrekten Monte-Carlo-Rechnung sowohl bei Hinzunahme aller Beiträge als auch bei den verkleinerten Datensätzen teilweise erheblich, was bei den großen Meßfehlern aber nicht verwundern darf. Die Abweichungen kommen dabei allerdings nicht durch unterschiedliche Lagen der Verteilungsmaxima zustande, wie insbesondere Abbildung 5.5 verdeutlicht. Neben den kleiner werdenden Fehlern, werden bei einer Beschränkung der zulässigen Wertemenge auch die Ergebnisse der Mittelwertbildung unter Mitnahme des Vorzeichens des Skalarproduktes der propagierten Wellenfunktionen laut (2.17) und durch Mittelung nur über Beiträge, wo dieses positives Vorzeichen hat, etwas konsistenter. Was gemäß Tabelle 5.3 für ein Verwerfen der extremen Werte spricht.

Die Rechnung wurde wiederum auch für $t = 0$ durchgeführt, deren Histogramme in den Abbildungen 5.6 und 5.7 zu sehen sind. Dabei fällt qualitativ kein Unterschied zu den Histogrammen mit $t' \neq 0$ auf. Lediglich beim Vergleich der Verteilungen zu $r = \sqrt{18}$ für unterschiedliches Vorzeichen des Skalarproduktes der propagierten Slaterdeterminanten in Abbildung 5.7(c) liegen die Verteilungsmaxima jetzt ganz eindeutig an verschiedenen

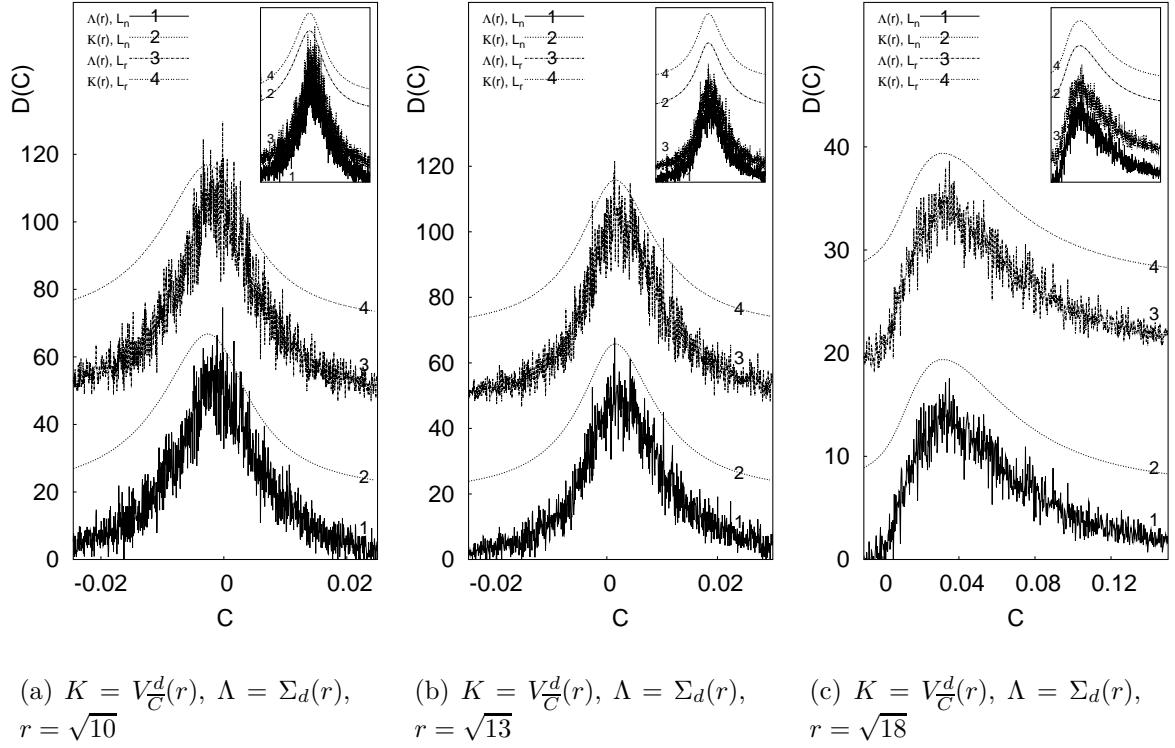
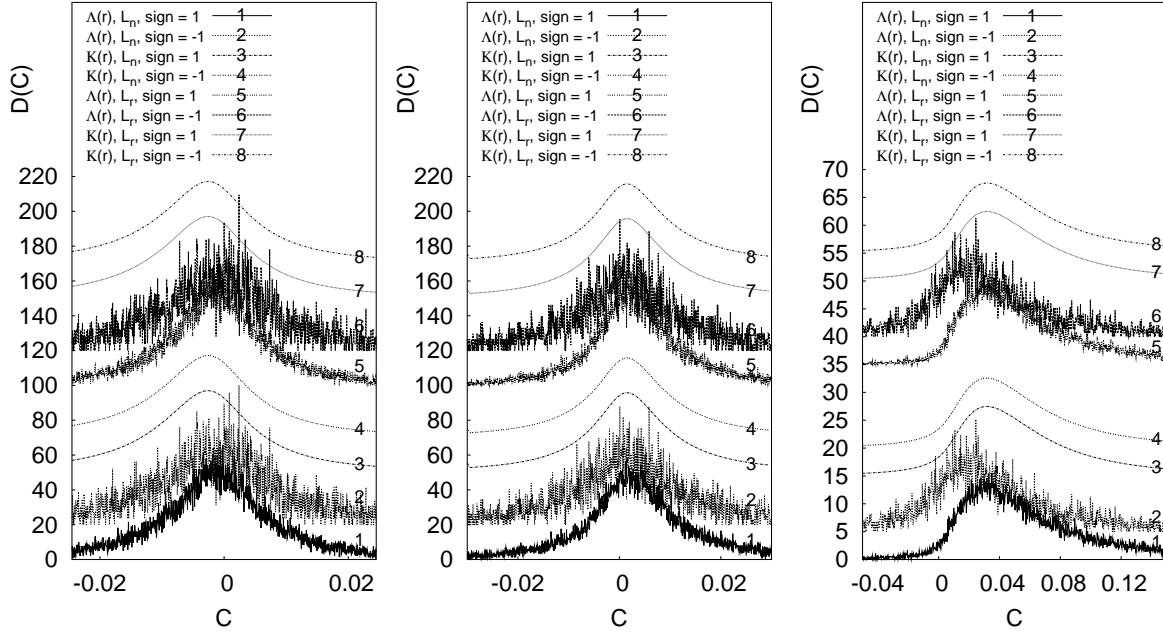


Abbildung 5.6: Verteilungen über (5.2) und (5.3), $C_d^V(r) = K - \Lambda$, L_ξ , $\xi \in \{n, r\}$, unterscheidet normale und eingeschränkte Mittelwertbildung (siehe Haupttext), Inlets vergleichen Observablen hinsichtlich ξ , Simulationsparameter $L = 36$, $U = 4$, $t' = 0$, $\langle n \rangle = 0.72$, $\tau = \frac{1}{8}$ mit insgesamt 64 'Trotter-Slices'

Positionen. Dies kann aber daran liegen, dass die Verteilung mit negativem Vorzeichen mit noch schlechterer Statistik erzeugt wurde als in der Simulation mit $t' = -0.22$, da hier $\langle \text{sign} \rangle \approx 0.6$ galt, welches beim Einschalten des Hoppings zu den übernächsten Gitterplätzen auf ≈ 0.3 abfällt. Das höhere mittlere Vorzeichen macht sich für die Mittelwertbildung dagegen eher positiv bemerkbar. So liegen die Werte für die vier verschiedenen Mittelungsmethoden alle in etwa in der gleichen Größenordnung, wie man der Tabelle 5.3 entnehmen kann. Vergleicht man die Werte der beiden t' für $r = \sqrt{10}$ und $r = \sqrt{13}$, so deutet sich eine höhere d-Wellen-Korrelation für die Simulationen mit $t' = 0$ an. Dies widerspricht dem Ergebnis aus den 4×4 -Systemen, wo das Anschalten des Hoppings zu den übernächsten Nachbarn noch zu einer Erhöhung der Vertexkorrelation führte. Der Trend kann wegen der großen Fehler aber auch leicht angezweifelt werden da er zudem auch stark von der gewählten Mittelwertbildung abhängt. Außerdem geht er für $r = \sqrt{18}$ scheinbar schon wieder verloren. Es entsteht der Eindruck, daß man letztendlich das Verhalten der Simulationen an den Rändern der Verteilung vergleicht, was, wie ausgeführt, numerisch nicht unproblematisch ist.



(a) $K = V_C^d(r), \Lambda = \Sigma_d(r), r = \sqrt{10}$, (b) $K = V_C^d(r), \Lambda = \Sigma_d(r), r = \sqrt{13}$, (c) $K = V_C^d(r), \Lambda = \Sigma_d(r), r = \sqrt{18}$

Abbildung 5.7: Verteilungen über (5.2) und (5.3), aufgespalten nach $\text{sign } C_d^V(r) = K - \Lambda$, $L_\xi, \xi \in \{n, r\}$, unterscheidet normale und eingeschränkte Mittelwertbildung (siehe Haupttext), Systemparameter $L = 36$, $U = 4$, $t' = 0$, $\langle n \rangle = 0.72$, $\tau = \frac{1}{8}$ mit insgesamt 64 'Trotter-Slices'

Es bleibt für das 6×6 -System festzuhalten, daß es nur durch die genauere Analyse der Einzelbeiträge eines einzigen Monte-Carlo-Laufes zum Erwartungswert nicht möglich ist, diesen eindeutiger zu bestimmen. Dies gilt auch schon für Simulationen mit Parametern, die ein noch relativ hohes mittleres Vorzeichen gewährleisten. Selbst wenn man das Vorzeichen der Skalarprodukte, welche das Monte-Carlo-Gewicht bestimmen, ignoriert, gelingt es nicht, Mittelwerte zu bilden, die von den Werten in den Verteilungsmaxima dominiert sind, obwohl dies die Statistik eigentlich verbessern sollte. Dies deutet darauf hin, daß die Anzahl der berechneten MCS noch zu klein ist, um überhaupt konvergente Ergebnisse erzielen zu können. Schlimmstenfalls ist die zu Grunde liegende Phasenraumstruktur so beschaffen, daß die Monte-Carlo-Integration insgesamt nicht mehr angewendet werden kann. Das dies durchaus möglich ist, zeigt die Diskussion in Kapitel 3.3.4. Dabei ist die Breite der Maxima in den 6×6 -Gittern sehr viel kleiner als in den Simulationen mit 4×4 Gitterpunkten, wie ein Vergleich der Abbildung 5.1-5.2 mit Abbildung 5.4-5.7 zeigt. Die Größenordnung 10^{-3} für die Vertexkorrelationsfunktion ist dennoch zu niedrig, um nicht durch das Verhalten der Verteilungsränder beeinflußt zu

Parameter	r	beschränkt	min.	max.
$L = 36$ $U = 4, t' = -0.22$ $\langle n \rangle = 0.63$	$\sqrt{10}$	nein	-15.29	35.94
		ja	-0.33	0.47
	$\sqrt{13}$	nein	-16.46	7.25
		ja	-0.55	0.38
	$\sqrt{18}$	nein	-27.46	25.25
		ja	-1.59	2.06
	$\sqrt{10}$	nein	-4.97	2.99
		ja	-0.47	0.21
$L = 36$ $U = 4, t' = 0.0$ $\langle n \rangle = 0.63$	$\sqrt{13}$	nein	-3.36	4.70
		ja	-0.23	0.31
	$\sqrt{18}$	nein	-6.10	4.60
		ja	-2.33	1.06

Tabelle 5.4: Minimale und maximale Beiträge der $\langle c_i^\dagger c_j \rangle$ zu (5.2) für die verschiedenen r in den vorgestellten Simulationen. Die Systeme wurden mit $\tau = \frac{1}{8}$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices' simuliert.

werden. Auch lässt sie keine qualitative Aussage mehr über ein resultierendes $C_d^V(r)$ für einzelne r mit Hilfe der relativen Lage der Verteilungsmaxima der Beiträge von (5.2) und (5.3) zu.

5.2.3 Quadratische Systeme mit $L=100$

Der Vollständigkeit halber sind hier noch die Verteilungen für diesmal allerdings nur eine einzelne Simulation auf einem Gitter mit 10×10 Punkten gezeigt. Es liegen wieder 20000 Messungen bei insgesamt $1.5 \cdot 10^6$ MCS vor. Da sich dabei ein $\langle \text{sign} \rangle < 0.1$ ergab, wurde auf eine Auswertung der Mittelwerte verzichtet. Die in Abbildung 5.8 zu sehenden Histogramme zeigen nur Verteilungen, die nach dem Vorzeichen des Skalarproduktes, welche das Monte-Carlo-Gewicht festlegt, aufgespalten sind. Wie man dort erkennt, mitteln sich bei der Berechnung des Erwartungswertes die Maxima der beiden Verteilungen in etwa heraus. Dabei liegen diese aber immer noch in der Nähe der Werte, wo sie auch in den kleineren Systemen zu finden waren, wobei dort das mittlere Vorzeichen noch größere Werte annahm. Das besondere Verhalten des größten Abstandes, der hier bei $\sqrt{50}$ liegt, ist im Gegensatz zu den kleineren Gittern überhaupt nicht mehr zu sehen. Demnach ist dies dort zweifelsfrei ein Effekt der relativ kleinen Gittergrößen.

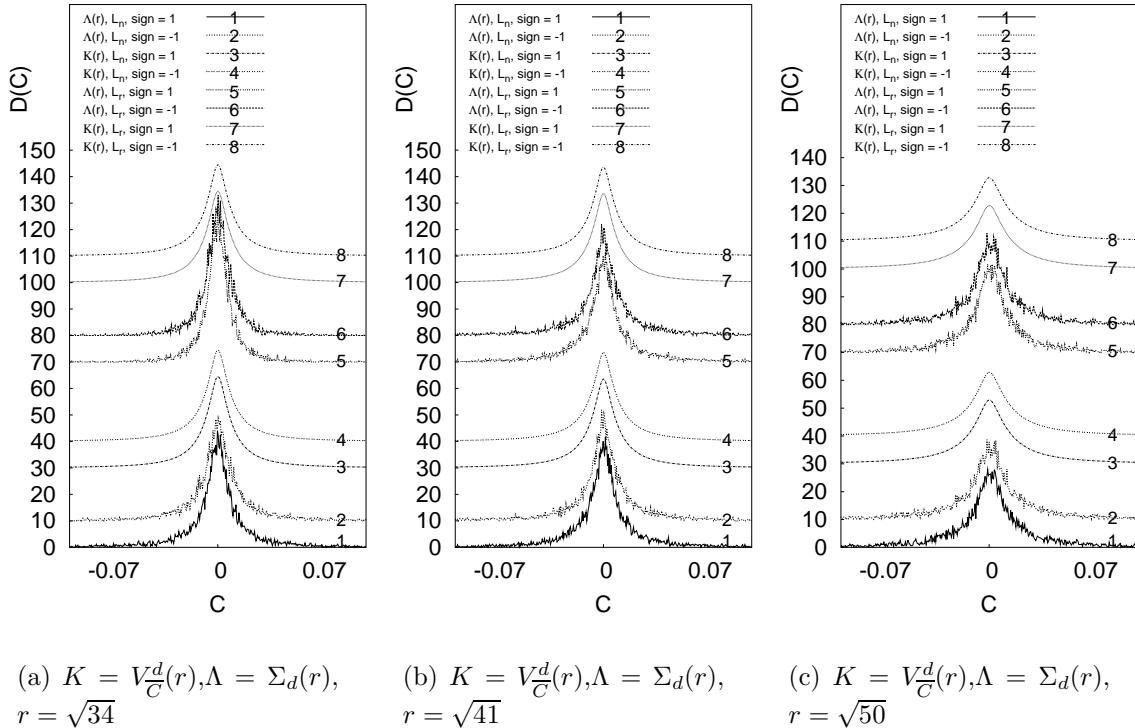


Abbildung 5.8: Verteilungen über (5.2) und (5.3), $C_d^V(r) = K - \Lambda$, L_ξ , $\xi \in \{n, r\}$, unterscheidet normale und eingeschränkte Mittelwertbildung (siehe Haupttext); Simulationsparameter $L = 100$, $U = 4$, $t' = -0.22$, $\langle n \rangle = 0.74$, $\tau = \frac{1}{8}$ mit insgesamt 64 'Trotter-Slices'

Zu erwähnen bleibt, daß, falls durch das verschwindende Vorzeichen der Mittelwert von $C_d^V(r)$ sich im 10×10 -System signifikant verändern sollte, dieser Trend sich vorher in den kleineren Systemen nicht abzeichnet. Allenfalls für den Paarabstand $r = \sqrt{18}$ im 6×6 -System lässt sich ein derartiges Verhalten zweifelsfrei beobachten (Abbildungen 5.5(c) und 5.7(c)), wobei gerade bei diesem Abstand aber auch die größte Anfälligkeit für Effekte durch zu kleine Gittergrößen auftritt. Bei den anderen beiden Abständen im 6×6 -System ist ein Auseinanderlaufen der Verteilungen mit $\text{sign} > 0$ und $\text{sign} < 0$ allenfalls so minimal, daß er im Rauschen untergeht. Geht man umgekehrt davon aus, daß eine Verteilung für ein resultierendes $C_d^V(r)$ auch wieder ihr Maximum in der Nähe der Maxima der einzelnen Verteilungen hat, aus denen sie sich zusammensetzt, so bleibt es auch im 10×10 -System von der Größe 10^{-3} und kleiner. Stellt man diese Größenordnung ins Verhältnis zu den Werten der einzelnen Beiträge der Hubbard-Stratonovich-Felder, so können die abweichenden Schlußfolgerungen in den eingangs des Kapitels zitierten Artikeln nicht verwundern. Dabei haben gerade die extrem großen Beiträge an den Verteilungsändern das Potential, das Ergebnis für $C_d^V(r)$ signifikant zu verändern, gerade auch schon in Simulationen, die ein kleines aber numerisch noch stabil berechenbares

$\langle \text{sign} \rangle$ produzieren.

5.3 s -Wellen-Korrelation mit negativem U

In [Fet98] wurde gezeigt, daß der d-Wellen-Ordnungsparameter des repulsiven $t-t'$ -Hubbard-Modells mit $U = 2$ das gleiche Skalenverhalten bezüglich der Systemgröße besitzt wie der s-Wellen-Ordnungsparameter der attraktiven Modells mit $U \approx -0.3$. Allerdings unterscheiden sich die vergleichbaren Verteilungen der Simulationen mit $U < 0$ durchaus von den bislang gezeigten Verteilungen, wie in diesem Abschnitt noch genauer gezeigt wird. Um die Ergebnisse mit den Rechnungen für $U = 4$ in etwa vergleichbar zu machen, wurde dabei das attraktive Modell mit $U = -0.5$ gerechnet. Dabei wurden insgesamt wieder $1.5 \cdot 10^6$ MCS simuliert, wobei $5 \cdot 10^5$ MCS für das Erreichen des Gleichgewichtszustandes Verwendung fanden.

5.3.1 Erwartungswerte für Energie und ODLRO

Zunächst einmal soll kurz auf die Beiträge der einzelnen Ising-Felder zu E/L eingegangen werden. Wie man in Abbildung 5.9(a) erkennt, zeigt deren Verteilung, wie es auch bei den Simulationen für $U > 0$ der Fall war, ein einzelnes Maxima, das in etwa beim eigentlichen Erwartungswert für E/L liegt. Das Fehlen von Beiträgen, die extrem von diesem Mittelwert abweichen, ist wohl auf den kleinen Betrag von U zurückzuführen. Bei Simulationen mit $U = -6$ traten analog zu den Rechnungen mit positivem U durchaus vereinzelte Beiträge auf, die weit ab vom Verteilungsmaximum lagen.

Die supraleitenden Korrelationen des Hubbard-Modells mit negativem U haben s-Wellen-Charakter [Lok01]. Deshalb ist in Abbildung 5.9(b) auch die Vertexkorrelationsfunktion für die lokale s-Wellen-Symmetrie (2.22) zu sehen. Sie zeigt wie auch schon die Energieverteilung an den Rändern keine größeren Ausreißer. Im Gegensatz zu den Simulationen mit repulsiver Wechselwirkung der Elektronen ist die Verteilung dabei so schmal, daß alle Beiträge auch nach dem Abzug der Vertexkorrektur noch offensichtlich im positiven Wertebereich liegen. Dies ist dabei keine Eigenschaft des Systems bei nur kleiner Wechselwirkung U , sondern konnte auch bei der Kontrollrechnung mit $U = -6$ noch festgestellt werden. So wird eine Berechnung des Mittelwertes mit recht kleinem Fehler möglich; er liegt für die angegebenen Werte (auch die der Energie) durchweg in einer schon nicht mehr angegebenen Stellenzahl. Die Simulationen können also nicht nur auf Grund des Vorzeichenproblems in den attraktiven Hubbard-Modellen numerisch sehr viel stabiler durchgeführt werden.

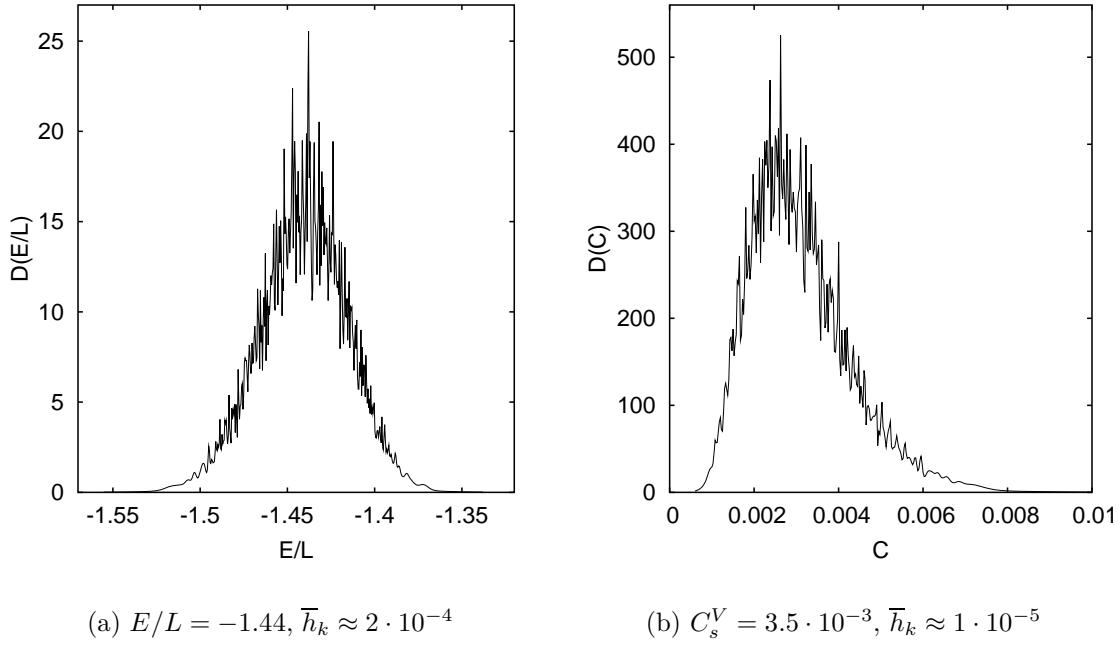


Abbildung 5.9: Beiträge zur Energie, Simulationsparameter $L = 16, U = -0.5, t' = -0.22, \tau = \frac{1}{8}, \langle n \rangle = 0.625$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices'

5.3.2 Abstandsabhängigkeit der s-Wellen-Korrelation

Wie schon bei den Rechnungen mit positivem U sollen auch hier die beiden Verteilungen für die drei größten Abstände von

$$\Sigma_s(r) = \frac{1}{\alpha L} \sum_i C_s(r) = \frac{1}{\alpha L} \sum_{i, \|\vec{i} - \vec{j}\| = r} \left\langle \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} \rangle \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \rangle \right\rangle_{MC} \quad (5.6)$$

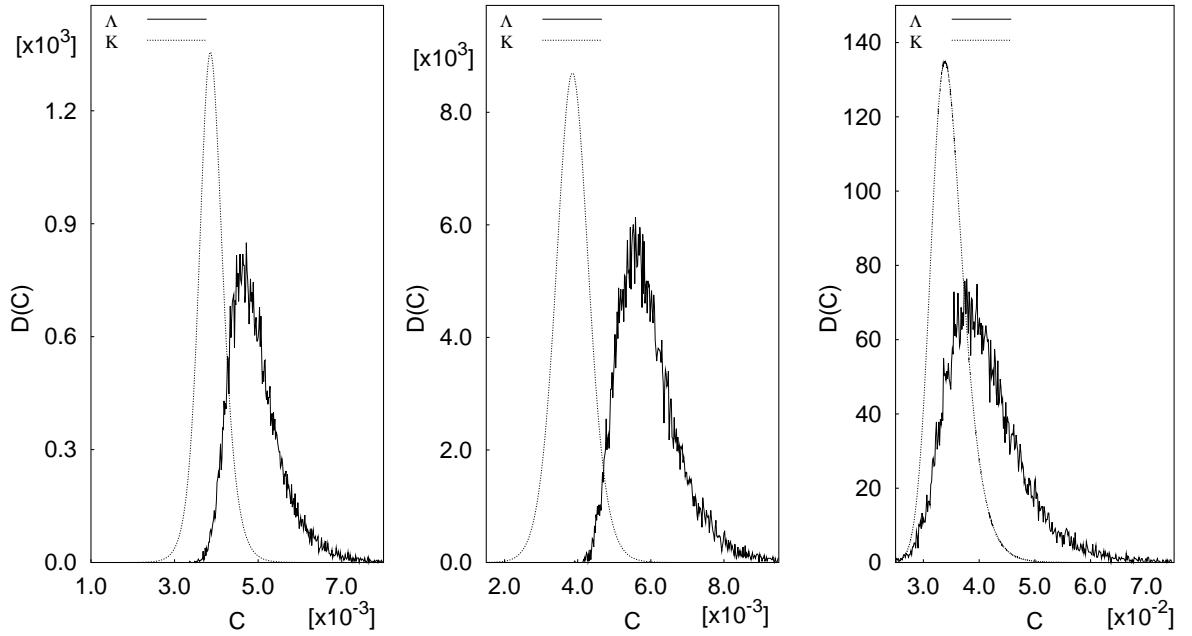
und

$$V_{\overline{C}}^s(r) = \frac{1}{\alpha L} \sum_i \overline{C}_s(r)_\uparrow \overline{C}_s(r)_\downarrow = \frac{1}{\alpha L} \sum_{i, \|\vec{i} - \vec{j}\| = r} \left\langle \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} \rangle \left\langle \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \rangle \right\rangle_{MC} \right\rangle_{MC} \quad (5.7)$$

betrachtet werden. Die Differenz aus beiden ergibt dann analog Gleichung (5.1) die s-Wellen-Vertexkorrelationsfunktion;

$$C_s^V(r) = \frac{1}{\alpha L} \sum_i (C_s(r) - \overline{C}_s(r)_\uparrow \overline{C}_s(r)_\downarrow) \quad . \quad (5.8)$$

Da bei einem $U = -0.5$ und $\langle \text{sign} \rangle = 1$ beim 4×4 -System die extremen Beiträge keinen großen Einfluß haben, werden nur die Verteilungen mit den kompletten Datensätzen



(a) $K = V_{\bar{C}}^s(r)$, $\Lambda = \Sigma_s(r)$,
 $r = 2$ (b) $K = V_{\bar{C}}^s(r)$, $\Lambda = \Sigma_s(r)$,
 $r = \sqrt{5}$ (c) $K = V_{\bar{C}}^s(r)$, $\Lambda = \Sigma_s(r)$,
 $r = \sqrt{8}$

Abbildung 5.10: Verteilungen über (5.6) und (5.7), $C_s^V(r) = K - \Lambda$; Systemparameter $L = 16$, $U = -0.5$, $t' = -0.22$, $\langle n \rangle = 0.63$, $\tau = \frac{1}{8}$ mit insgesamt 64 'Trotter-Slices'.

vorgestellt. Wie man in Abbildung 5.10 erkennt, liegt der Abstand zwischen den beiden Maxima der Verteilungen über (5.6) und (5.7) für die Abstände $r = 2$ und $r = \sqrt{5}$ in der Größenordnung der Verteilungsbreiten. Lediglich der Abstand $r = \sqrt{8}$ erfüllt dies nicht, was, analog zum abweichenden Verhalten bei den Simulationen zum repulsiven Modell, durch die besonderen Randbedingungen für diesen Abstand erklärt werden kann. Die Differenz der Werte, an denen die beiden Maxima zum liegen kommen, ist dann eine gute Schätzung für das jeweils resultierende $C_s^V(r)$.

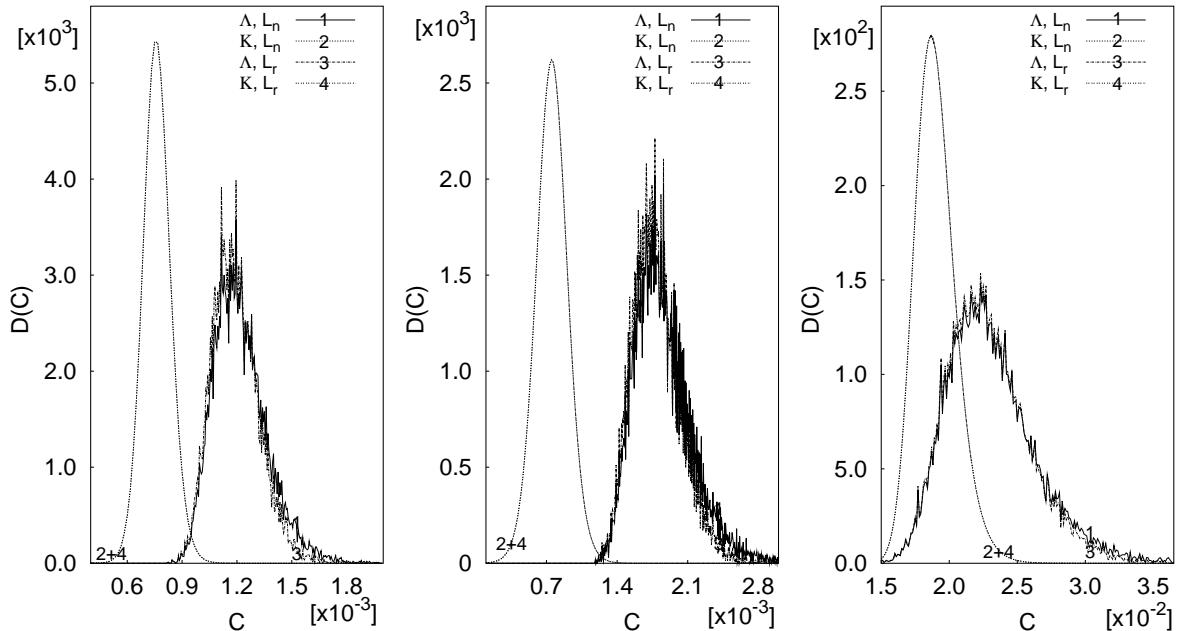
Deren Mittelwerte sind in Tabelle 5.5 zusammengefaßt. Es ergeben sich Werte in der Größenordnung $\mathcal{O}(10^{-3})$ wie sie auch die Rechnungen mit $U = 4$ beim 4×4 -Gitter erbrachten. Allerdings ist die Struktur der Verteilungen über die volle Korrelationsfunktion und die der Vertexkorrektur derart, daß zusammen mit der Abwesenheit negativer Vorzeichen beim Skalarprodukt, welches das Monte-Carlo-Gewicht bildet, numerisch sehr viel bessere Erwartungswerte berechnet werden können.

Geht man zu den 6×6 -Systemen mit schwacher attraktiver Wechselwirkung über, erhält man die in Abb. 5.11 zu sehenden Verteilungen über (5.6) und (5.7). Diese sind wieder analog den Rechnungen mit dem repulsiven Hubbard-Modell für die Abstände $r =$

$ \vec{r}_i - \vec{r}_j $	$C_s^V(r)$
2	$1.0 \cdot 10^{-3}$
$\sqrt{5}$	$2.1 \cdot 10^{-3}$
$\sqrt{8}$	$6.2 \cdot 10^{-3}$

Tabelle 5.5: Erwartungswerte von $C_s^V(r)$, Binning-Fehler haben Größenordnung $\mathcal{O}(10^{-6})$, Systemparameter $L = 16$, $U = -0.5$, $t' = -0.22$, $\langle n \rangle = 0.63$ und $\tau = \frac{1}{8}$ über insgesamt 64 'Trotter-Slices'.

$\sqrt{10}$, $r = \sqrt{13}$ und $r = \sqrt{18}$ berechnet worden. Da sich bei dem größeren System trotz $\langle \text{sign} \rangle = 1$ extreme Beiträge bemerkbar machen, wurden die Verteilungen wieder einmal mit dem vollen und einmal mit einem beschränkten Datensatz (das Vorgehen hierzu wurde in Abschnitt 5.1.3 beschrieben) erstellt. Dabei ergibt sich nur für (5.6) eine erkennbare Veränderung der Verteilung. Die Maxima der jeweiligen Verteilungen



(a) $K = V_{\overline{C}}^s(r)$, $\Lambda = \Sigma_s(r)$,
 $r = \sqrt{10}$ (b) $K = V_{\overline{C}}^s(r)$, $\Lambda = \Sigma_s(r)$,
 $r = \sqrt{13}$ (c) $K = V_{\overline{C}}^s(r)$, $\Lambda = \Sigma_s(r)$,
 $r = \sqrt{18}$

Abbildung 5.11: Verteilungen über (5.6) und (5.7), $C_s^V(r) = K - \Lambda$; L_ξ , $\xi \in \{n, r\}$, unterscheidet normale und eingeschränkte Mittelwertbildung (siehe Haupttext), Systemparameter $L = 36$, $U = -0.5$, $t' = -0.22$, $\langle n \rangle = 0.72$, $\tau = \frac{1}{8}$ mit insgesamt 64 'Trotter-Slices'.

für (5.6) und (5.7) liegen dort wiederum in der Größenordnung der Verteilungsbreiten voneinander entfernt. Dadurch ändert beim attraktiven Hubbard-Modell das Weglassen von maximalen Beiträgen zu (4.9) den Erwartungswert von $C_s^V(r)$ bei weitem nicht so stark, wie es beim repulsiven Modell der Fall war. Die genauen Werte entnimmt man Tabelle 5.6.

Zusammengefaßt läßt sich sagen, daß bei den hier betrachteten kleinen Gittern ($L \leq 36$) die s-Wellen-Korrelation des schwach attraktiven Hubbard-Modells und die d-Wellen-Korrelation des Modells mit $U = 4$ die gleiche Größenordnung besitzen. Allerdings kann die Vertexkorrelationsfunktion in den Simulationen mit $U < 0$ numerisch sehr viel stabiler berechnet werden. Denn im repulsiven Modell besteht der Erwartungswert für ODLRO zum überwiegenden Teil aus Einteilchenkorrelationen. Es kann nicht ausgeschlossen werden, daß so auch schon bei den relativ kleinen Systemgrößen der resultierende Erwartungswert allein auf Grund numerischer Fluktuationen zustandekommt. Das mit der Wechselwirkung und der Systemgröße kleiner werdende $\langle \text{sign} \rangle$ verschärft dabei diese Problematik noch.

Es stellt sich zudem die Frage, ob der dominante Einfluß der Einteilchenkorrektur nicht als Hinweis auf eine überwiegend unkorrelierte Paarung der Elektronen verstanden werden kann. Dies könnte sich oberhalb von T_c dann auch im Auftreten von Fluktuationen der Phase des supraleitenden Ordnungsparameters bemerkbar machen, was die Existenz einer Energielücke bei einer Temperatur $T^* > T_c$, dem sogenannten 'Pseudo-Gap', erklären hilft [Dev00]. Die hier vorgestellte Histogrammtechnik würde es nun möglich machen, über geeignete Ergänzungen zum Hamiltonoperator Mechanismen aufzuspüren, für die auch der Grundzustand des repulsiven Hubbard-Modells einen deutlichen Unterschied in den Verteilungen von (5.2) und (5.3) zeigt. Dies sollte auch schon für kleine Systeme möglich sein, wo dem Vorzeichenproblem noch durch die sorgfältige numerische Analyse der Erwartungswerte beigekommen werden kann.

$ \vec{r}_i - \vec{r}_j $	$C_s^V(r), L_n$	$C_s^V(r), L_r$
$\sqrt{10}$	$4.1 \cdot 10^{-3}$	$3.8 \cdot 10^{-3}$
$\sqrt{13}$	$1.1 \cdot 10^{-3}$	$1.0 \cdot 10^{-3}$
$\sqrt{18}$	$0.5 \cdot 10^{-3}$	$0.4 \cdot 10^{-3}$

Tabelle 5.6: Erwartungswerte von $C_s^V(r)$, Binning-Fehler haben Größenordnung $\mathcal{O}(10^{-5})$, Systemparameter $L = 36$, $U = -0.5$, $t' = -0.22$, $\langle n \rangle = 0.72$ und $\tau = \frac{1}{8}$ über insgesamt 64 'Trotter-Slices'.

5.4 Plateauwerte der d-Wellen-Korrelation

5.4.1 Supraleitende Korrelationen bei $U = 4$

Um die Schwierigkeiten bei der Erstellung von Verteilungen über die Vertexkorrektur loszuwerden, werden in diesem Abschnitt die so genannten Plateauwerte der d-Wellen-Korrelationsfunktion

$$C_d^{P_{r_c}} = \frac{1}{L_c} \sum_{\{i,j\}_c} C_d(i, j) \quad (5.9)$$

diskutiert. $\{i, j\}_c$ bezeichnet dabei alle Paare von Gitterpunkten i und j mit $\|\vec{r}_i - \vec{r}_j\| \geq r_c$. Bei den hier verwendeten quadratischen Systemen mit $L = 144$, $L = 196$ und $L = 256$ sollte wegen ihres exponentiellen Abklingens (siehe Kapitel 2.7.2) der Einfluß der $\overline{C}_d(i, j)$ für den hier auf $r_c = 5$ festgelegten Plateaubereich bereits einigermaßen vernachlässigbar sein. Sie werden deshalb in die weitere Argumentation nicht mehr mit einbezogen. In den einzelnen Simulationen wurden $1.5 \cdot 10^6$ MCS berechnet, wobei $5 \cdot 10^5$ MCS für das Einlaufen in die Gleichgewichtsverteilung verwendet wurden. Die Anzahl an Elektronen wurde für die jeweilige Systemgröße so festgelegt, daß die Füllung immer bei $\langle n \rangle \approx 0.7$ lag (siehe dazu Tabelle 5.7).

Bei allen L galt für das mittlere Vorzeichen $\langle \text{sign} \rangle < 0.1$. Der Fehler der Erwartungswerte ist entsprechend hoch. Wie man in Abbildung 5.12 erkennt, unterscheiden sich die Verteilungen der drei größeren Systeme nur unwesentliche voneinander, sowohl für die Beiträge bei positivem als auch negativem Vorzeichen des Skalarproduktes der propagierten Wellenfunktionen. Diese wie auch alle weiteren Verteilungen wurden wieder mit einem Dichteschätzer erzeugt, für den Ursprung der y-Achse sei auf den letzte Absatz in Kapitel 3.2.3 hingewiesen. Zunächst soll einmal interessieren, inwieweit sich die Ein-

L	PQMC [$\times 10^{-6}$]	PQMC _b [$\times 10^{-6}$]	PQMC sign=1 [$\times 10^{-6}$]	PQMC _b sign=1 [$\times 10^{-6}$]	PQMC sign=-1 [$\times 10^{-6}$]	PQMC _b sign=-1 [$\times 10^{-6}$]	$n_\uparrow = n_\downarrow$
144	-9 ± 59	0.7 ± 25	2.6 ± 0.8	0.8 ± 0.4	5 ± 2	1 ± 4	49
196	-23 ± 77	10 ± 18	0.5 ± 0.8	0.2 ± 0.3	4 ± 3	0.4 ± 0.2	69
256	17 ± 35	40 ± 14	0.0 ± 0.5	0.2 ± 0.2	0.3 ± 0.5	0.0 ± 0.2	90

Tabelle 5.7: Erwartungswerte von $C_d^{P_5}$ mittels unterschiedlicher Methoden berechnet, sign=1/-1 bedeutet nur Felder mit positivem/negativem Skalarprodukt der propagierten Wellenfunktionen mit eingerechnet, bei PQMC_b blieb zulässiger Wertebereich für Beiträge zum Erwartungswert auf $[-1 \cdot 10^{-4}, 1 \cdot 10^{-4}]$ beschränkt, weiter Simulationsparameter $U = 4$, $t' = -0.22$, $\langle n \rangle \approx 0.7$ und $\tau = \frac{1}{8}$ über insgesamt 64 'Trotter-Slices', Fehlerrechnung jeweils mit ≈ 50 Bins

zelbeiträge zur Energie in den Systemen mit $L > 144$ im Vergleich zu einem Systemen unterscheiden, für das das mittlere Vorzeichen noch stabil ist. Dazu ist in Abb. 5.12 noch einmal die Energieverteilung des Systems mit $L = 36$ bei ansonsten gleichen Simulationsparametern mit eingezeichnet. Die Maxima der Verteilungen der größeren Systeme liegen wie man sieht in etwa in der Nähe desjenigen des 6×6 -Systems. Allerdings fällt auf, daß die Flanken der ersten bedeutend schneller abfallen. Dabei verlieren die Systeme am linken Rand, der den Erwartungswert absenkt, einen größeren Wertebereich als am rechten. Dies hat zu Folge, daß die Erwartungswerte mit ≈ -1.05 für die jeweiligen Verteilungen zum Vorzeichen des Skalarproduktes der propagierten Wellenfunktionen größer als im quadratischen System mit $L = 36$ ($E \approx -1.08$) sind. Interessanterweise ergab sich in den PQMC-Rechnungen im Vergleich zu den Ergebnissen der stochastischen Diagonalisierung für $L = 36$ immer ein niedriger Wert. Leider liegen zu den großen Systemen keine Daten mit anderen Grundzustandsverfahren vor. Es ist möglich, daß das Verschwinden einer ausgeprägten linken Flanke in den Energie-Verteilungen der großen Systeme ein artifizielles Verhalten des PQMC bei $L = 36$ wieder korrigiert. Da das Hauptproblem der stochastischen Diagonalisierung eine nicht vollständige Hilbertraumbasis ist, erscheint es plausibler, daß gerade diese Zustände von einem nur im kleinen System genügend lange simulierten PQMC-Monte-Carlo-Lauf gefunden werden. Dabei ist auch nicht erkennbar, daß die eigentlich das korrekte Ergebnis repräsentierende Differenzverteilung aus den entsprechenden Verteilungen in Abb. 5.12(a) und 5.12(b) über das Vorzeichen die Energie weiter absenkt. Bei all den Überlegungen kann demnach nicht ausgeschlossen werden, daß die zur Verfügung stehende Rechenzeit insgesamt immer noch zu kurz ist, um einen stabilen Mittelwert erhalten zu können.

Betrachtet man trotzdem die wiederum nach dem Vorzeichen des Skalarproduktes der propagierten Slaterdeterminanten aufgespaltenen Beiträge zu $C_d^{P_5}$, so erhält man die in Abbildung 5.13 zu sehenden Verteilungen. Die jeweils zwei Verteilungen zu einem L sehen sich wieder qualitativ recht ähnlich. Die unterschiedliche Höhe der jeweiligen Verteilungsmaxima der beiden Verteilungen zum 16×16 -System deuten jedoch wieder darauf hin, daß in den Simulationsläufen noch zu wenige Daten aufgenommen wurden.

Die Beiträge zu allen Maxima liegen vom Betrag in einer Größenordnung $\mathcal{O}(10^{-5})$ wie man weiter in Abbildung 5.13 erkennt. Weiter kann man der Tabelle 5.7 entnehmen, daß auch die Mittelwerte nur bis maximal zu dieser Größenordnung ansteigen. Dabei sind die Ergebnisse bei Beschränkung des Wertebereiches auf Beiträge im Intervall $[-1 \cdot 10^{-4}, 1 \cdot 10^{-4}]$ bei allen Mittelungsmethoden kleiner als bei der Hinzunahme aller Beiträge zur Bildung des Erwartungswertes. Die Ergebnisse sind also auch stark von der Verteilungsändern bestimmt. Diese sind ebenfalls wieder sehr weitläufig, wie Tabelle 5.8 zeigt. Dort sind die Werte in einem Maßstab angegeben, der drei Größenordnungen über demjenigen der Mittelwerte in Tabelle 5.7 liegt. Insgesamt sind die relativen Fehler der Erwartungswerte selbst in den günstigsten Fällen bei ≈ 1 , bleiben aber immer noch in einer Größenordnung $\mathcal{O}(10^{-5})$. Dabei sind die Mittelwerte der jeweils nach

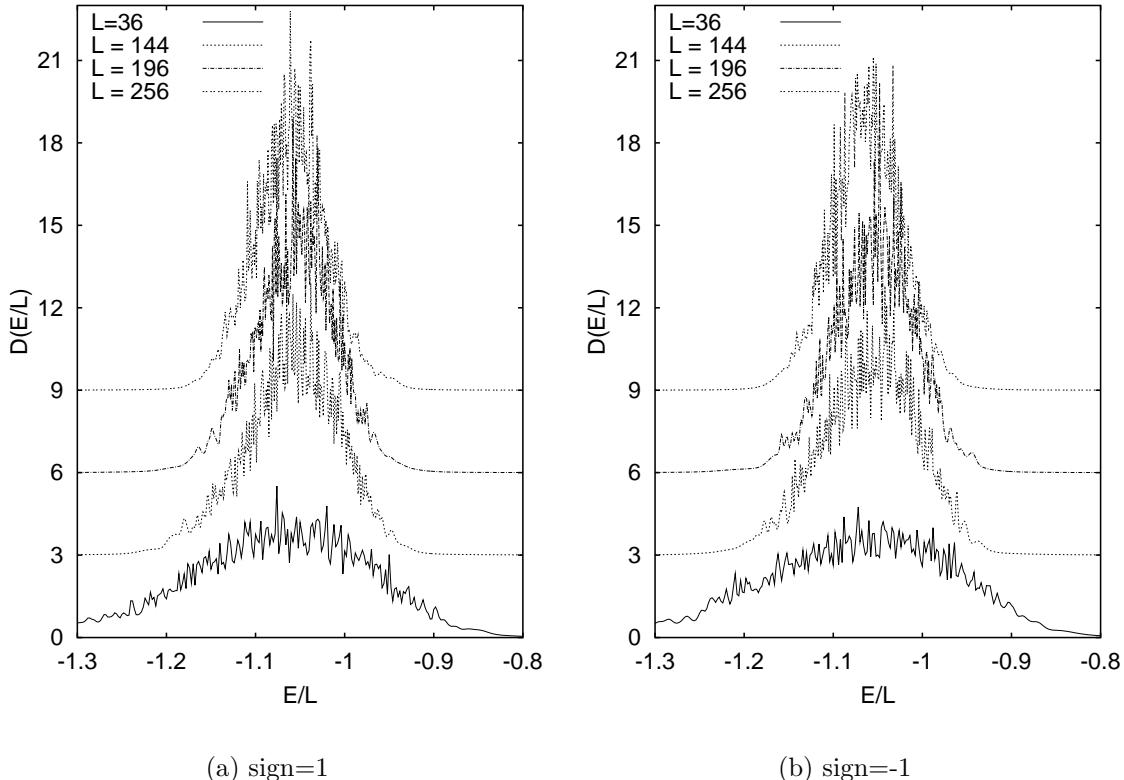


Abbildung 5.12: Verteilungen zu E/L aufgetrennt nach $\text{sign}(\langle \Psi(\sigma^L) | \Psi(\sigma^R) \rangle)$, weitere Systemparameter $U = 4$, $t' = -0.22$, $\langle n \rangle \approx 0.7$, $\tau = \frac{1}{8}$ mit insgesamt 64 'Trotter-Slices', \bar{h}_k zwischen $2 \cdot 10^{-6}$ und $6 \cdot 10^{-6}$.

Vorzeichen des Skalarproduktes der propagierten Slaterdeterminanten aufgespaltenen Beiträge mit Ausnahme des 12×12 -Systems noch einmal eine Größenordnung kleiner als die Ergebnisse bei Hinzunahme der Vorzeichens.

Das Verschwinden der Erwartungswerte der Verteilungen aufgetrennt nach dem Vorzeichen des Skalarproduktes der propagierten Wellenfunktion erschwert die Diskussion um die Brauchbarkeit der Ergebnisse, wenn man das Vorzeichen einfach ignoriert. Denn so sind diese Mittelwerte für sich allein schon mit einem großen numerischen Fehler behaftet, wie man wieder der Tabelle 5.7 entnehmen kann. Weiter bleibt es nun auch fraglich, ob die Vertexkorrektur zu den Beiträgen für das hier berechnete $C_d^{P_{rc}=5}$ schon so viel kleiner ist, um sie vernachlässigen zu können. Leider sind die Simulationen auch beim ignorieren des Vorzeichen nicht stabil genug, um wenigstens dafür brauchbare Mittelwerte zu liefern.

Orientiert man sich für die Korrelationsfunktionen am Verhalten der Energieverteilungen (in den kleinen Systemen war dort kein signifikanter Unterschied feststellbar), so kann man davon ausgehen, daß die Mittelwerte noch immer in der Nähe der sich

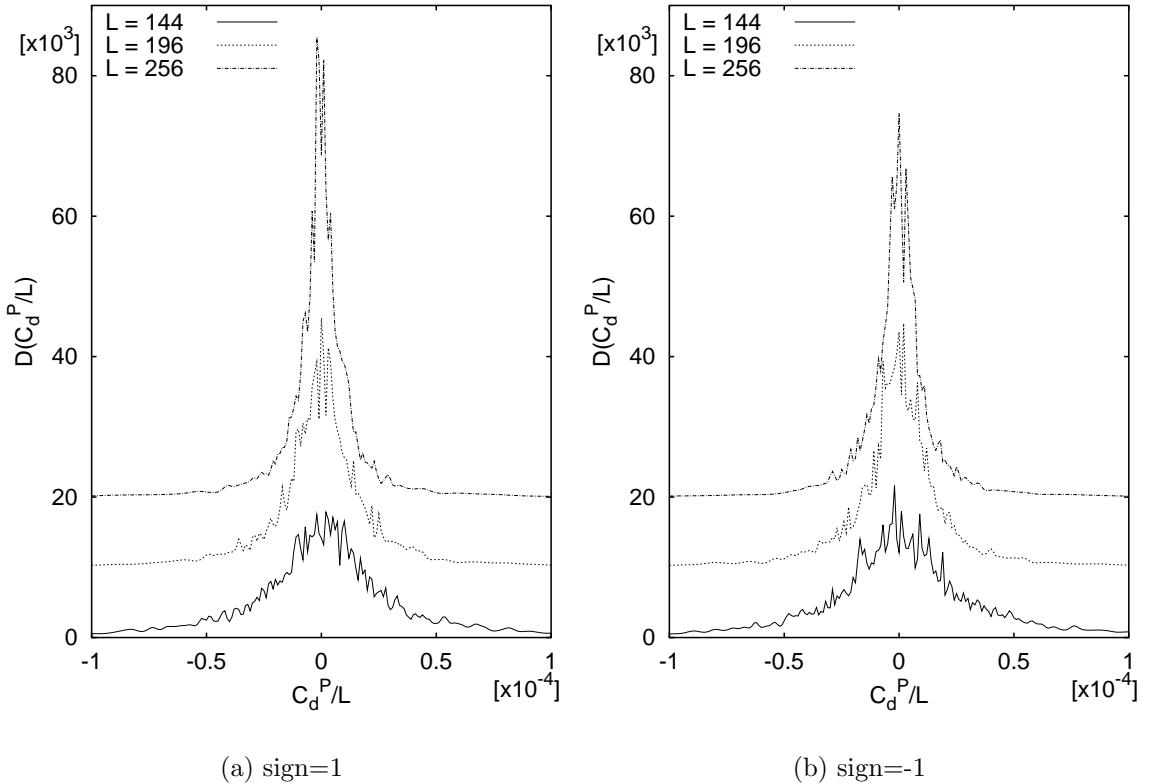


Abbildung 5.13: Verteilungen zu $C_d^{P_5}/L$ aufgetrennt nach $\text{sign}(\langle \Psi(\sigma^L) | \Psi(\sigma^R) \rangle)$, weitere Systemparameter $U = 4$, $t' = -0.22$, $\langle n \rangle \approx 0.7$, $\tau = \frac{1}{8}$ mit insgesamt 64 'Trotter-Slices', \bar{h}_k zwischen $6 \cdot 10^{-4}$ und $9 \cdot 10^{-4}$.

ergebenden Verteilungsmaxima liegen. Dadurch sind die vorgestellten Ergebnisse um mindestens eine Größenordnung kleiner als die Erwartungswerte mit denen bei Simulationen für $U = 2$ in [Hus96a] argumentiert wurde. Dort wurde aus den Werten von $C_d^{P_{rc}}$ in der Größenordnung von $\mathcal{O}(10^{-4})$ noch als Indiz für Vorhandensein eines supraleitenden Grundzustandes des Hubbard-Modells gewertet. Dabei galt allerdings $r_c = 2$. Bei der Wechselwirkung $U = 4$ in den hier vorgestellten PQMC-Rechnungen sind die supraleitenden Korrelationen im d-Kanal jedoch kleiner als in den Simulationen bei $U = 2$. Da man die realen HTSC ohnehin besser mit einem $U = 8$ beschreibt (siehe Diskussion in Kapitel 3.2), liefern die PQMC-Rechnungen also eher keinen brauchbaren Hinweis auf das Vorhandensein supraleitender Korrelationen im Grundzustand des t-t'-Hubbard-Modells. Dieses kann demnach ohne Modifikationen die Physik realer HTSC nicht korrekt reproduzieren.

Man kann das PQMC-Verfahren auch als Simulation eines Ising-Spinsystems mit einer recht komplizierten Wechselwirkung zwischen den Spins bei $T = 1$ auffassen. Dann erinnert die Entwicklung der Verteilungen von $C_d^{P_5}$ mit der Systemgröße L in Abbildung

5.13 an das Hochtemperaturverhalten der Suszeptibilität eines gewöhnlichen zweidimensionalen Ising-Ferromagneten ohne äußeres Feld. Er wird mit dem Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad (5.10)$$

beschrieben. Für die Suszeptibilität gilt dabei

$$\chi = \frac{1}{LT} \sum_{i,j} \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \quad . \quad (5.11)$$

Das System hat bei $T_c \approx 2.3$ einen ferromagnetischen Phasenübergang zweiter Ordnung [Ons44]. In Abbildung 5.14 sind die Verteilungen über eine Suszeptibilität des zweidimensionalen Ising-Ferromagneten bei $T = 9.5$ für die Systemgrößen zu sehen, die auch zur Berechnung von $C_d^{P_5}$ herangezogen wurden. Sie unterscheidet sich dabei von (5.11) dadurch, daß nur über die L_c Paare i und j summiert wurde, für die $\|\vec{r}_i - \vec{r}_j\| \geq 5$ galt. Außerdem wurden die $\langle S_i \rangle$ von vorneherein auf 0 gesetzt, was bei der hohen Temperatur allerdings ohnehin der Fall sein sollte. Die Verteilungen wurden dabei aus technischen Gründen mit der gewöhnlichen Histogrammtechnik erstellt und nicht mit einem Kernschätzer. Wie man erkennt, ähneln sich die Graphen in den Bildern 5.13 und 5.14 doch

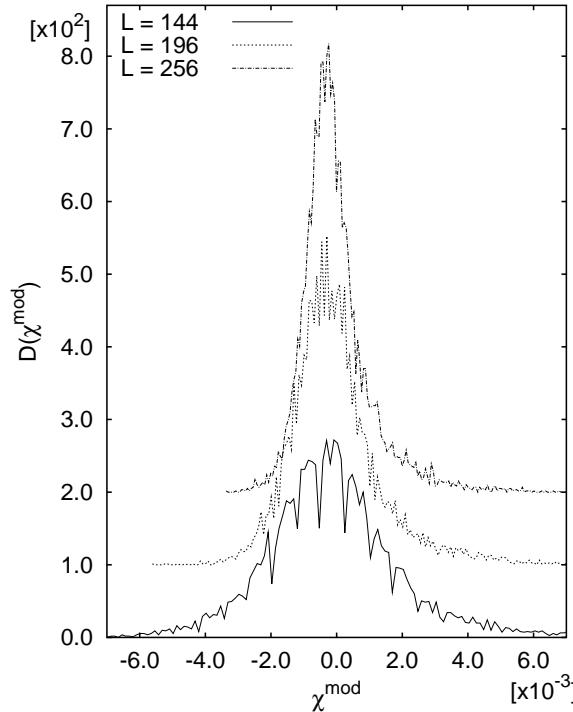


Abbildung 5.14: Verteilungen $\xi^{\text{mod}}/L_c = \frac{1}{TLL_c} \sum_{\|\vec{r}_i - \vec{r}_j\| \geq 5} \langle S_i S_j \rangle$ des 2-dim. Ising-Ferromagneten

sehr. Dies kann als ein weiteres Indiz für die Abwesenheit von ODLRO im Grundzustand des hier betrachteten Hubbard-Modells gewertet werden.

Dabei ist es jedoch möglich, daß das Verschwinden von ODLRO durch das Fehlen der Beiträge verursacht wird, welche die Flanken der Verteilungsmaxima über die Systemenergie abflachen. Das Fehlen dieser Werte in den Systemen mit $L \geq 144$ im Vergleich mit dem kleineren System mit $L = 36$ wurde ja bereits am Anfang dieses Abschnittes angesprochen. Wie man in Abbildung 5.15 sieht, haben diese Beiträge im 6×6 eine C_d^{Pr} -Verteilung, die im Vergleich zur Gesamtverteilung signifikant zu größeren Werten hin verschoben ist. Allerdings mußte der Graph auf Grund der kleinen Systemgröße für Plateauwerte mit $r_c = 2$ berechnet werden. Quantitative Aussagen darüber, inwieweit solche Beiträge (wenn sie bei signifikant erhöhter Rechenzeit vom Monte-Carlo-Prozeß denn auch erreicht werden) die Plateauwerte in den Systemen mit $L > 144$ erhöhen können, sind daraus also nicht zu gewinnen.

Weiter muß man einschränken, daß eine endgültige Aussage zur Existenz von ODLRO in den hier betrachteten Systemen auch vor dem Hintergrund des kleinen $\langle \text{sign} \rangle$ und der daraus resultierenden großen Fehler gesehen werden müssen. Es besteht durchaus die Möglichkeit, daß sich die beiden Verteilungen für jeweils unterschiedliches Vorzeichen des Skalarproduktes exakt herausrechnen sollten. Letztendlich würde dies heißen, daß die im Monte-Carlo-Prozeß erzeugten Konfigurationen mit hohem Gewicht nicht die Physik des Systems repräsentieren. Dann müßten sich diese exakt gegeneinander aufheben, was sich beim Vergleich von Abbildung 5.13(a) mit Abbildung 5.13(b) allerdings nicht erkennen läßt. Dies kann zum einem noch zu kurzen Monte-Carlo-Lauf liegen, es besteht aber auch die Möglichkeit, daß dies an der Rechengenauigkeit scheitert. Die Untersuchungen in Kapitel 3.2.4 legen ja gerade nahe, daß diese bestenfalls in der Größenordnung $\mathcal{O}(10^{-7})$ liegt, was auf die korrekte Auflösung der hier gezeigten Verteilungen schon einen signifikanten Einfluß haben kann.

L	sign	min. $\times [10^{-3}]$	max. $\times [10^{-3}]$
144	1	-3.1	4.4
	-1	-5.0	13.4
196	1	-3.6	1.8
	-1	-30.7	5.2
256	1	-1.8	2.7
	-1	-1.7	1.0

Tabelle 5.8: Minimale und maximale Beiträge zu $C_d^{P_5}$, weitere Simulationsparameter $U = 4$, $t' = -0.22$, $\langle n \rangle \approx 0.7$, $\tau = \frac{1}{8}$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices'

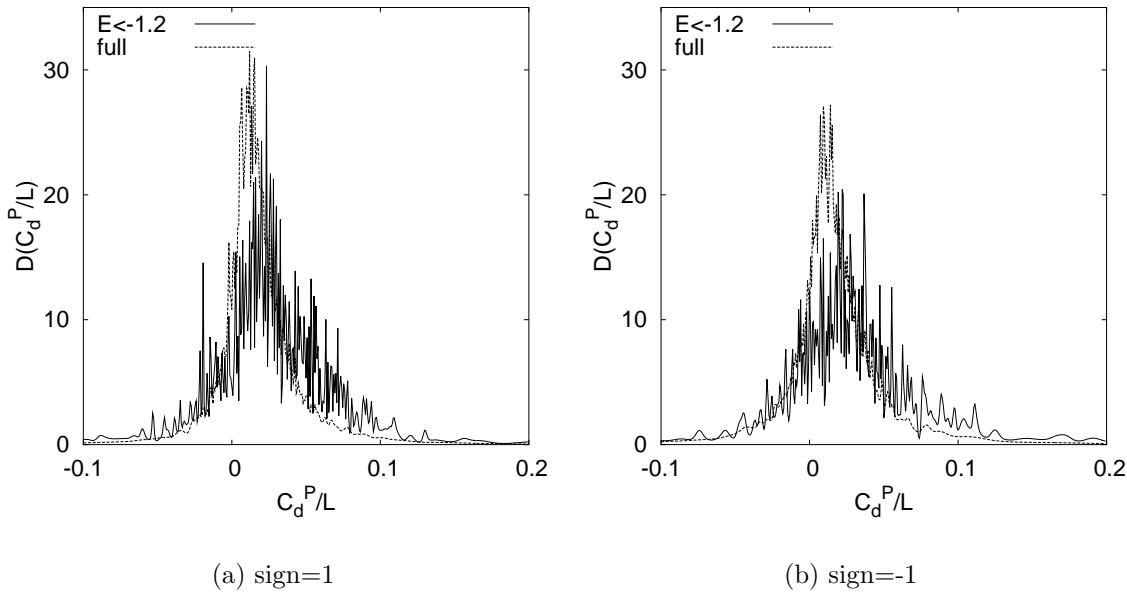


Abbildung 5.15: Verteilungen zu $C_d^{P_2}/L$ aufgetrennt nach $\text{sign}(\langle \Psi(\sigma^L) | \Psi(\sigma^R) \rangle)$, Gegenüberstellung Anteil der Beiträge für Energie kleiner 1.2 und allen Summanden, Systemparameter $L = 16$, $U = 4$, $t' = -0.22$, $\langle n \rangle = 0.72$, $\tau = \frac{1}{8}$ mit insgesamt 64 'Trotter-Slices', $\bar{h}_k \approx 3 \cdot 10^{-3}$ immer

Außerdem wäre ein Szenario denkbar, daß durch die beschränkte Rechengenauigkeit noch vor der Richtigkeit der Beiträge deren korrektes Vorzeichen verloren geht. Damit die Simulation jedoch ein signifikantes Wandern eines Maximums der Differenzverteilung auflösen kann, muß sich dieses zumindest noch innerhalb der Wertebereiches der hier gezeigten Verteilungen befinden, sollte demnach allenfalls die Größenordnung $\mathcal{O}(10^{-4})$ annehmen. Dann ist die Aussage bezüglich des Korrelationen im d-Kanal dahingehend abzuschwächen, daß eine Erhöhung der elektronischen Wechselwirkung U kein Forcieren der supraleitenden Korrelationen erkennen läßt.

5.4.2 Modulationen in den Hopping-Termen

Immer noch Gegenstand der aktuellen Forschung an den HTSC ist die genaue Ladungsverteilung in den CuO-Ebenen. So wurden beispielsweise statische eindimensionale Strukturen in dem System $\text{La}_{1.6-x}\text{Nd}_{0.4}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ bei $x = 0.12$ mit Hilfe der Neutronenbeugung [Tra95] entdeckt. Man spricht von einer als Streifenphase bezeichneten Ordnung des Elektronensystems in den CuO-Ebenen, denn sie besteht aus antiferromagnetischen Streifen zwischen denen sich metallische Streifen ausbilden. Asymmetrien in der Struktur der CuO-Ebenen ermöglichen auch neue Ansätze für Simulationen zu Modellen der Hochtemperatursupraleitung, die ohnehin schon zusätzliche Annahmen

über den physikalischen Aufbau der CuO-Ebenen der HTSC machen [Fei01].

Die Existenz von ODLRO im t - t' -Hubbard-Modell konnte in dieser Arbeit mit Hilfe der PQMC-Rechnung so weit lediglich für die kleinen quadratischen Systeme mit $L = 16$ eindeutig gezeigt werden. Dieses Ergebnis wird auch von den Resultaten der Lanczos-Diagonalisierung gestützt. Auf dieser Größenskala konnten dabei mit Hilfe der Raster-tunnelmikroskopie und -Spektroskopie beispielsweise Inhomogenitäten in den elektronischen Eigenschaften der CuO-Ebenen von optimal dotiertem $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ aufgezeigt werden [Pan01]. Dies gab Anlaß dazu, einmal zu untersuchen, inwiefern es möglich ist, durch Modifikationen in (1.3) das Verhalten der Simulation bei einem 4×4 -Gitter auch beim Übergang zu größeren Systemabmessungen erhalten zu können.

Dazu wurde die Periodizität des Gitters modifiziert, indem das Gitter in 4×4 -Untergitter eingeteilt wurde, wobei die Hopping-Matrixelemente zwischen diesen Untergittern t_{ij}^z gegenüber denjenigen innerhalb eines Untergitters t_{ij}^i modifiziert wurden. Der Einteilchenanteil (2.3) des Hamiltonoperators schreibt sich dann zu

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 = & - t \sum_{\langle i,j \rangle_i, \sigma} [c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + h.c.] + t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle_i, \sigma} [c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + h.c.] \\ & - \alpha t \sum_{\langle i,j \rangle_z, \sigma} [c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + h.c.] + \alpha t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle_z, \sigma} [c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + h.c.] \quad . \end{aligned} \quad (5.12)$$

Dabei unterscheidet $\langle\langle i,j \rangle\rangle_k$, $k \in \{i, z\}$ Nachbarn innerhalb eines Untergitters ($\equiv i$) und benachbarte Randplätze zwischen zwei verschiedenen Untergittern ($\equiv z$). Dies wurde für 12×12 - und 16×16 -Gitter untersucht, indem $t_{ij}^z = \alpha t_{ij}^i$ gesetzt wurde. Bei der Durchsuchung des Parameterraumes von α konnten allerdings keine Werte gefunden werden, die gegenüber den Simulationen mit $\alpha = 1$ eine signifikante Erhöhung der supraleitenden d-Wellen-Korrelation brachten. Lediglich die Systemenergie ließ sich damit verändern, diese nahm bei $\alpha > 1$ zu. Dabei veränderte sich allerdings das Verhältnis E_0/E_{int} gegenüber dem 4×4 -System mit derselben Gesamtenergie.

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde das Vorgehen bei der Berechnung von Grundzustandseigenschaften eines quantenmechanischen Systems mit Hilfe des Projektor-Quanten-Monte-Carlo-Verfahrens (PQMC) am Beispiel des t - t' -Hubbard-Hamiltonoperators vorgestellt. Das eigentliche Ziel der Rechnungen ist die Klärung der Frage, ob der Grundzustand der repulsiven Systeme für geeignete Simulationsparameter 'Off-Diagonal-Long-Range-Order' zeigt. Dies wäre ein starker Hinweis darauf, daß sich dort allein auf Grund der Coulomb-Abstoßung eine supraleitende Phase ausbildet.

Das PQMC ist ein numerisch sehr anspruchsvoller Algorithmus. Durch die Überprüfung analytischer Ergebnisse, die sich aus der Ausnutzung der Teilchen-Loch-Symmetrie des Systems bei $t' = 0$ ergeben, konnte zunächst einmal die Genauigkeit der Fließkomma-rechnungen abgeschätzt werden. Darüber hinaus wurde durch die Implementierung eines Algorithmus, der nur mit rationalen Zahlen arbeitet, gezeigt, daß das Auftreten negativer Vorzeichen des Skalarproduktes der propagierten Wellenfunktionen nicht allein in der Ungenauigkeit der Fließkommanäherungen seine Ursache hat. Das Vorzeichenproblem in den Quanten-Monte-Carlo-Rechnungen kann also nicht nur durch fehlende Rechengenauigkeit erklärt werden. Leider sind die heutzutage üblichen Rechnerarchitekturen nicht geeignet, die Simulationen mit rationalen Zahlen effizient zu implementieren. Dies führte dazu, daß nur wenige Feldkonfigurationen für ein kleines 4×4 -Gitter überhaupt berechnet werden konnten. Dadurch war es letztlich nicht möglich, endgültig zu klären, inwieweit nicht doch auch negative Vorzeichen in den Standardrechnungen auftreten, die auf numerischen Problemen beruhen.

Das PQMC leidet wie alle anderen Quanten-Monte-Carlo-Rechnungen unter dem Vorzeichenproblem. Dabei hat es jedoch die bemerkenswerte Eigenschaft, daß sich die beiden Verteilungen über Beiträge zu jeweils unterschiedlichem Vorzeichen des Skalarproduktes der propagierten Wellenfunktionen nicht signifikant unterscheiden. Dies gilt gerade auch in den Simulationen, welche ein mittleres Vorzeichen in der Größenordnung von 0.1 und höher produzieren. Das jeweilige Maximum der Verteilungen liegt dabei

in den Parameterbereichen wo dieser bekannt ist, in etwa bei dem Ergebniswert, den man aus Rechnungen mit Lanczos- bzw. stochastischer Diagonalisierung erhält. Man gewinnt bei diesen Simulationen den Eindruck, daß die negativen Skalarprodukte der propagierten Slaterdeterminanten, wenn sie ohnehin nicht ein Artefakt der Näherungen sind, so doch nur eine kleine Korrektur an den Erwartungswerten darstellen.

Dagegen existieren mehrere Veröffentlichungen, die über einen signifikanten Unterschied in den Erwartungswerten - einmal unter Mitnahme und einmal beim Weglassen des Vorzeichens - berichten. Zu dieser Problematik konnte in dieser Arbeit gezeigt werden, daß beim PQMC-Verfahren Unterschiede der Mittelwerte zwischen korrekter Mittelwertbildung und beispielsweise die Mittelwertbildung nur über Beiträge, die bei positivem Vorzeichen des Skalarproduktes aufgenommen wurden, im wesentlichen durch Fluktuationen an den Verteilungsranden zustandekommen. Diese werden bei bestimmten Simulationsparametern von Beiträgen gebildet, die sehr groß gegenüber dem eigentlichen Mittelwert sind. So wird ein recht großer Wertebereich an den Rändern von nur wenigen Beiträgen, also mit einer schlechten Statistik, abgedeckt. Dadurch können auch schon bei nicht allzu kleinem mittleren Vorzeichen kleine Schwankungen an den Verteilungsflanken signifikanten Einfluß auf die Erwartungswerte vor allem zu ODLRO haben. Ein konsistentes Vorgehen, wie durch eine gesonderte Behandlung der Verteilungsranden die Ergebnisse besser an die Werte z.B. der Lanczos-Diagonalisierungsrechnungen angepaßt werden können, ließ sich dabei jedoch nicht ermitteln. Dies kann seine Ursache nicht zuletzt auch darin haben, daß sich die Monte-Carlo-Rechnungen insgesamt noch über zu wenige Feldkonfigurationen erstrecken. Da die Problematik bei der Berechnung von ODLRO sehr viel größer ist als beispielsweise bei der Ermittlung der mittleren Energie, kann auch nicht ausgeschlossen werden, daß sich der Grundzustand hinsichtlich der supraleitenden Korrelationen aus energetisch entarteten Zuständen zusammensetzt. Unterschiedliche Simulationen des Projektionsverfahrens finden so dann möglicherweise auch jeweils andere Zustände im zugehörigen Unterraum.

Die anschließende Untersuchung der abstandsabhängigen Vertexkorrelationsfunktion für einzelne Abstände sollte genauer klären, ob endliche Werte für ODLRO durch die Verteilungsmaxima zustande kommen, oder von den wenigen, jedoch betragsmäßig großen Beiträgen an den Verteilungsranden gebildet werden. Dabei stellte sich heraus, daß die Werte für ODLRO bei der Anwendung eines jeden Kriteriums zur Beschränkung des zugelassenen Wertebereiches der Einteilchen-Greensfunktionen stets kleiner werden. Die Verteilungsranden tragen demnach schon einen Teil zu einer nicht verschwindenden ODLRO bei. Jedoch spricht eine signifikanter Unterschied in der Position der jeweiligen Maxima der beiden Verteilungen über die volle Korrelationsfunktion und die davon abzuziehende Korrektur der Einteilchen-Korrelation für gewisse Abstände r in den quadratischen Systemen mit $L = 16$ dafür, daß ODLRO auch über die Beiträge in den Verteilungsmaxima zustandekommt. Mit steigender Systemgröße wird deren Anteil jedoch geringer. Es handelt sich demnach also lediglich um kurzreichweite Korrelationen, die

in der geringen Systemgröße ihre Ursache haben. Das gleichzeitig mit der Anzahl der Gitterpunkte kleiner werdende mittlere Vorzeichen unterdrückt den Einfluß der Verteilungsmaxima zudem noch weiter. Die schlechte Statistik des Projektor-Quanten-Monte-Carlo beim Auftauchen des Vorzeichenproblems beruht nicht zuletzt darauf, daß so nur mehr über die weitläufigen aber nur mit wenigen Werten besetzten Verteilungsflanken gemittelt wird.

Mit Hilfe der Histogrammtechnik konnte darüberhinaus ein signifikanter Unterschied im Verhalten der Simulationen mit attraktiver Wechselwirkung im Vergleich zum repulsiven Hubbard-Modell aufgezeigt werden. Denn während bei $U > 0$ ODLRO im d-Kanal sich zum überwiegenden Teil aus Beiträgen der Vertexkorrektur, also aus zufälligen Einteilchenkorrelationen, zusammensetzt, ist bei einer anziehenden Wechselwirkung zwischen den Elektronen auch ein signifikanter Beitrag von korrelierten Paaren mit s-Wellensymmetrie beobachtbar. Ein Ansatzpunkt zum weiterführen der Arbeit wäre nun, zusätzliche Terme zum untersuchten Hamiltonoperator mit $U > 0$ zu finden, so daß eine d-Wellenkorrelation gemessen werden kann, die sich aus einer Differenz von deutlich unterschiedbaren Verteilungen der vollen Korrelationsfunktion und der zugehörigen Vertexkorrektur zusammensetzt.

Betrachtet man die Vertex-Plateauwerte von quadratischen Systemen mit $L > 144$ Gitterpunkten für große Abstände, so kommt man zu Ergebnis, daß ODLRO bei $U = 4$ mit dem PQMC nicht nachgewiesen werden kann. Dies gilt auch schon für die Mittelwerte, die unter Vernachlässigung des Vorzeichens des Skalarproduktes, welches das Monte-Carlo-Gewicht bestimmt, berechnet werden. Denn bereits die beiden Verteilungen der nach diesem Vorzeichen aufgespaltenen Beiträge können jeweils nur mit einem großen Fehler berechnet werden. Die Entwicklung der Verteilungen bei ansteigender Systemgröße legt sogar nahe, daß sich die supraleitenden Korrelationen mit dem Hochtemperaturverhalten der Suszeptibilität eines Ising-Systems vergleichen lassen, was als Beleg für die Abwesenheit von ODLRO im Grundzustand des hier untersuchten Hubbard-Modells angesehen werden kann. Dabei bleibt allerdings nicht ausgeschlossen, daß auf Grund einer ungünstigen Phasenraumstruktur in den Simulationen gerade die zur supraleitenden Korrelation beitragenden Anteile der Grundzustandswellenfunktion nicht bzw. nur mit sehr schlechter Statistik gefunden werden. Grundsätzlich sollte beim Auftreten von negativen Skalarprodukten zwischen den beiden nachfolgenden Fällen unterschieden werden.

- Das Vorzeichen ist nötig, um die richtigen Erwartungswerte im PQMC zu berechnen. Dies ist bei den kleinen Systemen, wo Kontrollwerte aus anderen Grundzustandsrechnungen vorliegen, wohl eher nicht der Fall. Denn ein Vergleich mit den Ergebnissen für den Erwartungswert der Energie mit Resultaten der Lanczos-Diagonalisierungsrechnungen zeigt, daß es allerhöchstens zu kleinen Korrekturen führt, die nicht über die Näherungen hinausgehen dürften, die ohnehin schon in

den Algorithmus hineingesteckt wurden. Bei den Mittelwerten zu ODLRO ist dies nicht ganz so eindeutig, allerdings deutet vieles darauf hin, daß dies wohl eher an der noch zu kurzen Rechenzeit bzw. an der bereits erwähnten Grundzustandertartung liegt. Beim Übergang zu größeren Systemen zeigt sich kein kontinuierliches Auswandern der Differenzverteilungen irgendwelcher hier betrachteter quantenmechanischer Erwartungswerte, die so über das Vorzeichen systematisch verändert würden. Allerdings ist es möglich, daß das Monte-Carlo-Sampling dort die für die physikalischen Eigenschaften bedeutenden Hubbard-Stratonovich-Felder systematisch nicht findet, weil es stattdessen nur immer Konfigurationen mit hohem Gewicht aber unterschiedlichem Vorzeichen gegeneinander aufrechnet.

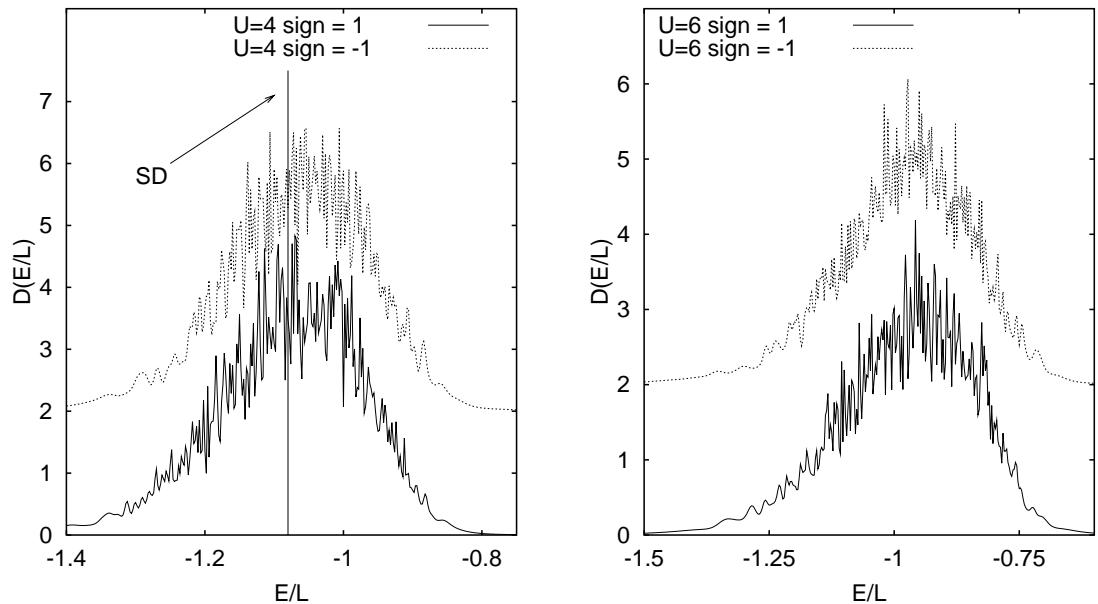
- Das Vorzeichen im PQMC ist ein Artefakt der Näherungen, wofür einige Hinweise in der hier vorliegenden Arbeit zusammengetragen worden sind. Dies kann wie vorgeschlagen durch eine ungehinderte Propagation der Wellenfunktion über eine Nodengrenze verursacht werden oder einfach auch (zumindest für einige Feldkonfigurationen) durch eine numerisch zu ungenaue Determinantenberechnung zu stande kommen. In diesem Falle wäre es wichtig zu wissen, ob sich die Ergebnisse auch bei einer exakten Kenntnis des Skalarproduktes aus einer Differenz zweier Mittelwerte zu unterschiedlichem Vorzeichen zusammensetzen. Für die Systeme mit $L \leq 64$ liegt diese Situation wohl eher nicht vor, wie die Ergebnisse dieser Arbeit zeigen. Geht man zudem davon aus, daß Differenzwerte immer noch in der Nähe der beiden Verteilungsmaxima zu unterschiedlichem Vorzeichen liegen, so kann man davon ausgehen, daß ODLRO in den Systemen mit $L > 64$, $U > 4$ wohl eher verschwindet.

Dabei kann allerdings nicht ausgeschlossen werden, daß das Vorzeichen gerade in den größeren Systemen sich durch eine Überlagerung der beiden Ursachenszenarien zusammensetzt. Bevor dieses genauer untersucht werden kann, sollte die verfügbare Rechenzeit wohl noch einmal um mehrere Zehnerpotenzen ansteigen, da nur so Effekte durch zu kurze Monte-Carlo-Läufe mit Sicherheit auszuschließen sind. Bei dem Kontrolllauf in Kapitel 4 für das System mit $L = 16$ und $U = 4$ wurden ja die Fehler bei einer Verfünffachung der Rechenzeit beispielsweise nur in etwa um ein Viertel kleiner. Für größere L dürfte sich die Situation noch weitaus schwieriger gestalten. Es bleibt dann allerdings zu Fragen, ob das PQMC dann noch als numerisch effizienter Algorithmus betrachtet werden kann. Nicht zuletzt diese Problematik führte dazu, daß die in dieser Arbeit vorgestellten Ansätze, die durchaus interessante Eigenschaft des PQMC, identische Verteilungen über die Beiträge zu den quantenmechanischen Erwartungswerten für das jeweilige Vorzeichen des Skalarproduktes der propagierten Wellenfunktion zu produzieren, auszunutzen, nicht dazu beitragen konnten, die Existenz von ODLRO im Grundzustand des $t-t'$ -Hubbard-Modells auch für größere Systeme bzw. bei höheren Wechselwirkungen zweifelsfrei nachzuweisen oder zu widerlegen.

Anhang A

Weitere Histogramme

A.1 Verteilungen zur Energie

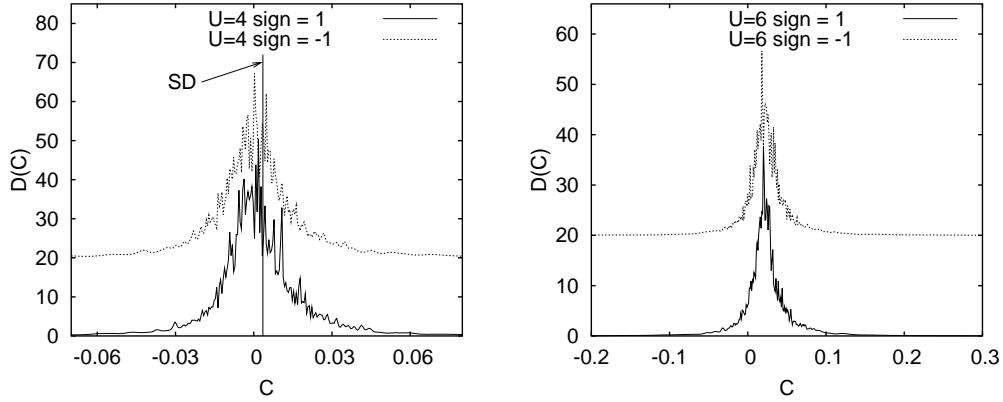


(a) $U=4$, Ausschnitt aus Intervall $(-5, 0)$, SD ist Erwartungswert der stochastischen Diagonalisierungsrechnung, $\langle \text{sign} \rangle \approx 0.27$, $\bar{h}_k \approx 2 \cdot 10^{-3}$

(b) $U=6$, Ausschnitt aus Intervall $(-4, 2)$, $\langle \text{sign} \rangle \approx -0.01$, $\bar{h}_k \approx 3 \cdot 10^{-3}$

Abbildung A.1: Beiträge zur Energie, Simulationsparameter $L = 36$, $t' = -0.22$, $\tau = \frac{1}{8}$, $\langle n \rangle = 0.72$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices', $\text{sign} = \text{sign}(\langle \Psi_P(\sigma^L) | \Psi_P(\sigma^R) \rangle)$

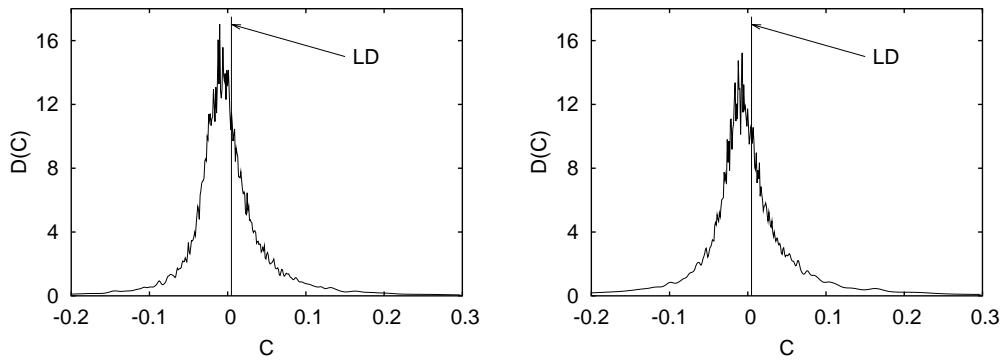
A.2 Verteilungen zu ODLRO



(a) $U=4$, Ausschnitt Intervall $(-1,4)$, $\langle \text{sign} \rangle \approx 0.29$, SD Erwartungswert der stochastischen Diagonalisierungsrechnung, Fehler PQMC-Vertexkorrektur $\approx 4 \cdot 10^{-4}$, $\bar{h}_k \approx 2 \cdot 10^{-3}$

(b) $U=6$, , Auschnitt aus Intervall $(-2.5,1.5)$, $\langle \text{sign} \rangle \approx 0.013$, $\bar{h}_k \approx 2 \cdot 10^{-3}$

Abbildung A.2: Beiträge zur d-Wellen-Korrelation, Simulationsparameter $L = 36$, $t' = -0.22$, $\tau = \frac{1}{8}$, $\langle n \rangle = 0.72$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices', $\text{sign} = \text{sign}(\langle \Psi_P(\sigma^L) | \Psi_P(\sigma^R) \rangle)$



(a) $U=6$, $\text{sign}=1$, $\langle \text{sign} \rangle \approx 0.40$

(b) $U=6$, $\text{sign}=-1$, $\langle \text{sign} \rangle \approx 0.40$

Abbildung A.3: Beiträge zur d-Wellen-Korrelation, Systemparameter $L = 16$, $\tau = \frac{1}{8}$, $\langle n \rangle = 0.625$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices', Lauf mit 80000 Messungen bei $5 \cdot 10^6$ MCS, LD kennzeichnet den Erwartungswert einer Lanczos-Diagonalisierungsrechnung. Fehler der PQMC-Vertexkorrektur, um die die Verteilungen verschoben sind $\approx 9 \cdot 10^{-5}$, $\bar{h}_k \approx 6 \cdot 10^{-3}$

A.3 Gemittelte Spin- \downarrow -Erwartungswerte

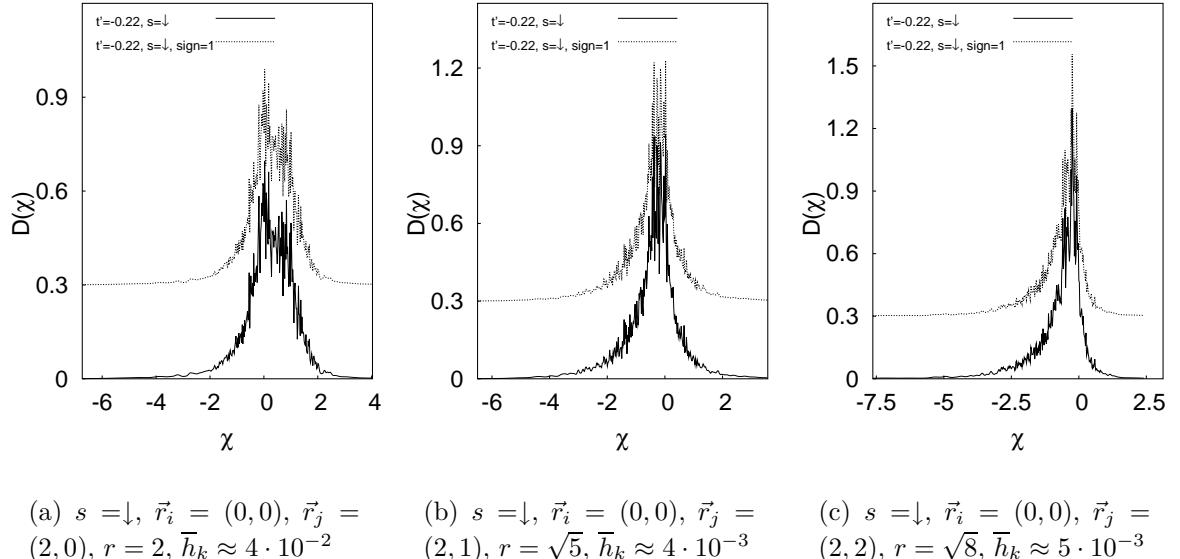


Abbildung A.4: $\chi = \sum_{\delta\delta'} \langle c_{i+\delta}^\dagger c_{j+\delta'} \rangle_\downarrow$ exemplarisch für einzelne $r = \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|$, Simulationsparameter $L = 16, U = 4, \langle n \rangle = 0.63, t' = -0.22$ und $\tau = \frac{1}{8}$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices'.

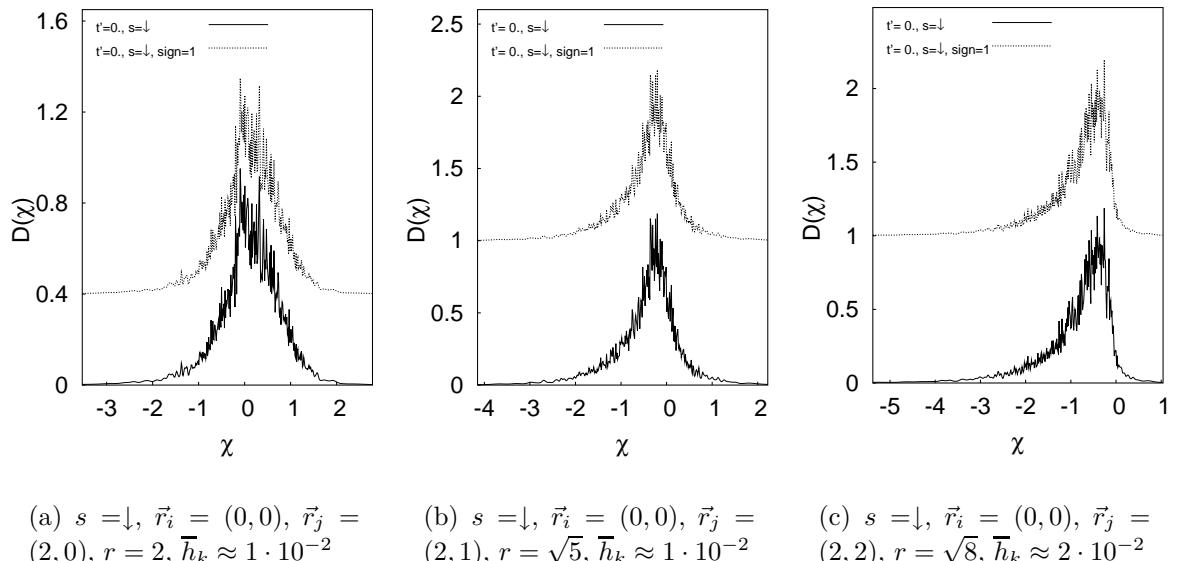


Abbildung A.5: $\chi = \sum_{\delta\delta'} \langle c_{i+\delta}^\dagger c_{j+\delta'} \rangle_\downarrow$ exemplarisch für einzelne $r = \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|$, Simulationsparameter $L = 16, U = 4, \langle n \rangle = 0.63, t' = 0$. und $\tau = \frac{1}{8}$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices'

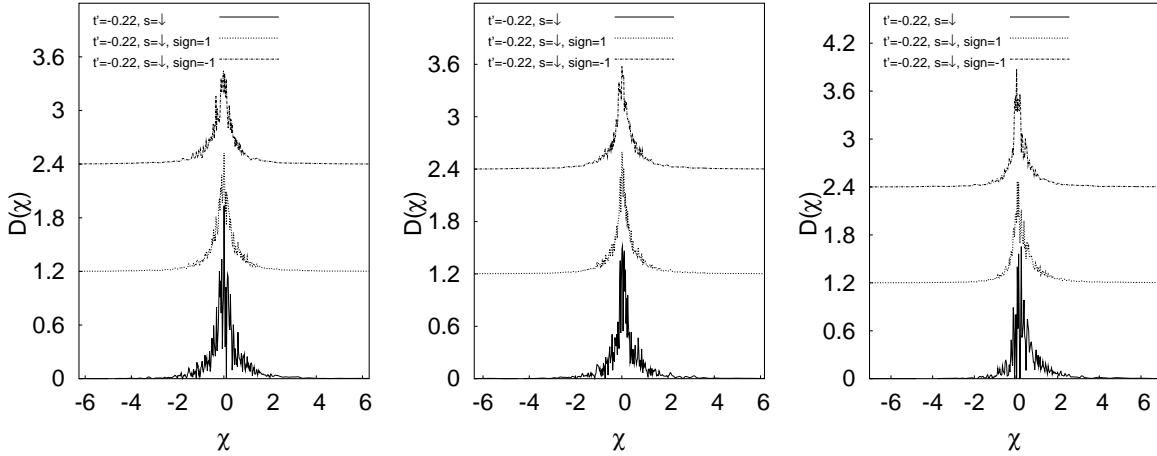
(a) $s = \downarrow$, $\vec{r}_i = (0, 0)$, $\vec{r}_j = (3, 1)$, $r = \sqrt{10}$, $\bar{h}_k \approx 9 \cdot 10^{-2}$ (b) $s = \downarrow$, $\vec{r}_i = (0, 0)$, $\vec{r}_j = (3, 2)$, $r = \sqrt{13}$, $\bar{h}_k \approx 1 \cdot 10^{-2}$ (c) $s = \downarrow$, $\vec{r}_i = (0, 0)$, $\vec{r}_j = (3, 3)$, $r = \sqrt{18}$, $\bar{h}_k \approx 1 \cdot 10^{-1}$

Abbildung A.6: $\chi = \sum_{\delta\delta'} \langle c_{i+\delta}^\dagger c_{j+\delta'} \rangle_\downarrow$ exemplarisch für einzelne $r = \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|$, Simulationsparameter $L = 36, U = 4, \langle n \rangle = 0.72, t' = -0.22$ und $\tau = \frac{1}{8}$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices'

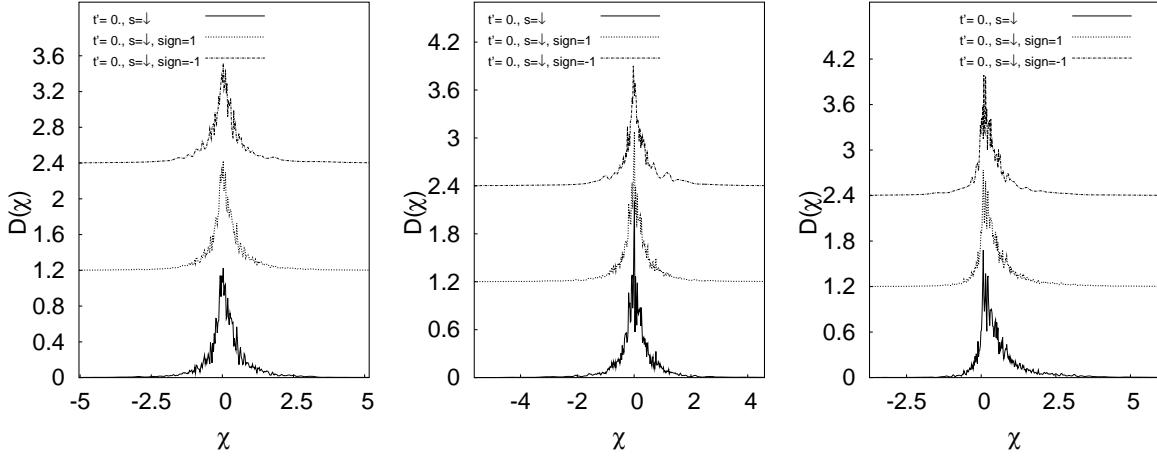
(a) $s = \downarrow$, $\vec{r}_i = (0, 0)$, $\vec{r}_j = (3, 1)$, $r = \sqrt{10}$, $\bar{h}_k \approx 5 \cdot 10^{-2}$ (b) $s = \downarrow$, $\vec{r}_i = (0, 0)$, $\vec{r}_j = (3, 2)$, $r = \sqrt{13}$, $\bar{h}_k \approx 4 \cdot 10^{-2}$ (c) $s = \downarrow$, $\vec{r}_i = (0, 0)$, $\vec{r}_j = (3, 3)$, $r = \sqrt{18}$, $\bar{h}_k \approx 4 \cdot 10^{-2}$

Abbildung A.7: $\chi = \sum_{\delta\delta'} \langle c_{i+\delta}^\dagger c_{j+\delta'} \rangle_\downarrow$ exemplarisch für einzelne $r = \|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|$, Simulationsparameter $L = 36, U = 4, \langle n \rangle = 0.72, t' = 0$ und $\tau = \frac{1}{8}$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices'

A.4 Histogramme mit Flanken

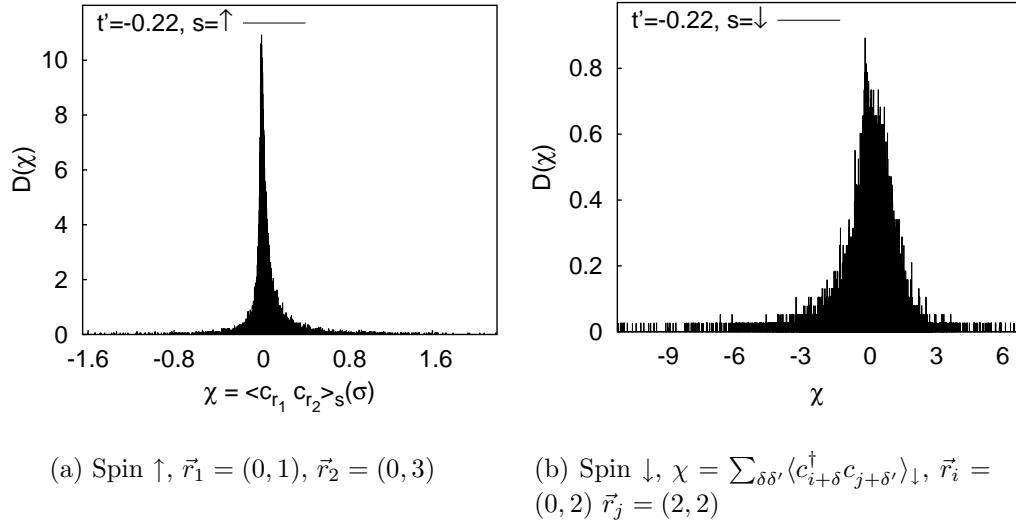


Abbildung A.8: Histogramme zu (4.9) für \uparrow -Elektronen und (5.4) für \downarrow -Elektronen über Wertebereich der Mittelwertbildung, Simulationsparameter $L = 16$, $U = 4$, $\langle n \rangle = 0.63$ und $\tau = \frac{1}{8}$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices'.

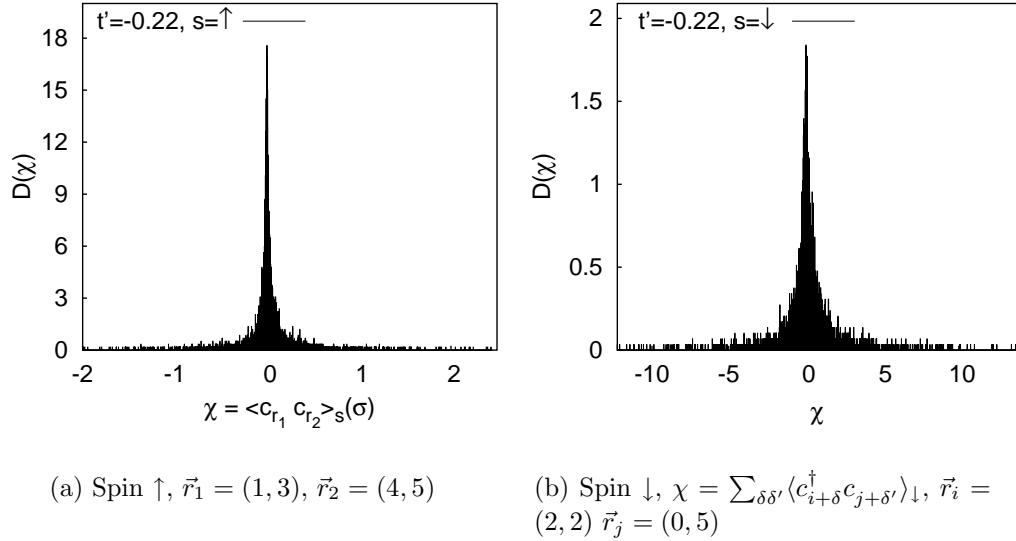


Abbildung A.9: Histogramme zu (4.9) für \uparrow -Elektronen und (5.4) für \downarrow -Elektronen über Wertebereich der beschränkten Mittelwertbildung, Simulationsparameter $L = 36$, $U = 4$, $\langle n \rangle = 0.72$ und $\tau = \frac{1}{8}$ bei insgesamt 64 'Trotter-Slices'.

Anhang B

Matrixrechnungen mit Slaterdeterminanten

B.1 Skalarprodukt zweier Slaterdeterminanten

Eine Slaterdeterminante von N ununterscheidbaren Fermionen wird durch die Anwendung des Projektionsoperators

$$\mathcal{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\mathcal{P}} (-)^{\mathcal{P}} x_{\mathcal{P}(1)} \otimes \dots \otimes x_{\mathcal{P}(N)} \quad (\text{B.1})$$

auf den Zustand $\sqrt{N!}x_1 \otimes \dots \otimes x_N$ im N -Teilchen-Hilbertraum konstruiert. Der Operator ist als Projektor idempotent $\mathcal{A}^2 = \mathcal{A}$ und hermitesch $\mathcal{A}^\dagger = \mathcal{A}$ [Nol98]. Daher gilt für das Skalarprodukt zweier Slaterdeterminanten

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{A} \sqrt{N!}x_1 \otimes \dots \otimes x_N | \mathcal{A} \sqrt{N!}y_1 \otimes \dots \otimes y_N \rangle &= N! \langle x_1 \otimes \dots \otimes x_N | \mathcal{A}^\dagger \mathcal{A} | y_1 \otimes \dots \otimes y_N \rangle \\ &= N! \langle x_1 \otimes \dots \otimes x_N | \mathcal{A}^2 | y_1 \otimes \dots \otimes y_N \rangle = N! \langle x_1 \otimes \dots \otimes x_N | \mathcal{A} | y_1 \otimes \dots \otimes y_N \rangle \\ &= \sum_{\mathcal{P}} (-)^{\mathcal{P}} \langle x_1 | y_{\mathcal{P}(1)} \rangle \dots \langle x_N | y_{\mathcal{P}(N)} \rangle = \det(\mathbf{D}) \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

mit der Matrix \mathbf{D} aus den Skalarprodukten der Einteilchen-Zustände, also $D_{ij} = \langle x_i | y_j \rangle$.

B.2 Erwartungswerte im PQMC

Der Notation des Hubbard-Modells im Ortsraum in zweiter Quantisierung liegen die Wannier-Funktionen als Orthonormalbasis zu Grunde, deren Erzeuger die c_i^\dagger sind. Die 'equal-times' Einteilchengreensfunktion $\langle \sigma | c_i c_j^\dagger | \sigma' \rangle$ bei festem σ, σ' ist dabei gleich dem Vakuumerwartungswert

$$\langle \Phi'_0 \Phi'_1 \dots \Phi'_N | \Phi_0^\dagger \Phi_1^\dagger \dots \Phi_N^\dagger \rangle \quad . \quad (\text{B.3})$$

Dabei sind die Φ_i als

$$\Phi_0^{(\prime)\dagger} = \sum_k \delta_{ik} c_k^\dagger \quad \text{und} \quad \Phi_i^{(\prime)\dagger} = \sum_k x_i^k c_k^\dagger \quad , \quad (\text{B.4})$$

gegeben, wobei die Einteilchenzustände der propagierten Slaterdeterminante mit $x_i = (x_i^1, \dots, x_i^N)$ notiert sind. Dies ist aber genau das Skalarprodukt (B.2) zwischen zwei Slaterdeterminanten von $N+1$ ununterscheidbaren Fermionen. Mit $D_{kl} = \langle 0 | \Phi'_k \Phi_l^\dagger | 0 \rangle$ und der Notation aus Kapitel 2.6 schreibt sich (B.3) also zu

$$\langle \sigma | c_i c_j^\dagger | \sigma' \rangle = \det \begin{pmatrix} \langle 0 | \Phi'_0 \Phi_0^\dagger | 0 \rangle & \langle 0 | \Phi'_0 \Phi_1^\dagger | 0 \rangle & \cdots & \langle 0 | \Phi'_0 \Phi_N^\dagger | 0 \rangle \\ \langle 0 | \Phi'_1 \Phi_0^\dagger | 0 \rangle & & & \\ \vdots & & D_{kl} & \\ \langle 0 | \Phi'_N \Phi_0^\dagger | 0 \rangle & & & \end{pmatrix} . \quad (\text{B.5})$$

Die Laplacesche Entwicklung von (B.5) nach der ersten Zeile und die anschließende Entwicklung der Terme nach der ersten Spalte, die Untermatrizen der Form $\mathbf{D}^{(lk)}$ enthalten¹, ergibt

$$\begin{aligned} \langle \sigma | c_i c_j^\dagger | \sigma' \rangle &= (\langle 0 | \Phi'_0 \Phi_0^\dagger | 0 \rangle - \sum_{kl} \langle 0 | \Phi'_0 \Phi_k^\dagger | 0 \rangle (\mathbf{D}^{-1})_{kl} \langle 0 | \Phi'_l \Phi_0^\dagger | 0 \rangle) \det(\mathbf{D}) \\ &= (\delta_{ij} - \sum_{kl} x_k^i (\mathbf{D}^{-1})_{kl} x_l^j) \langle \sigma | \sigma' \rangle \quad . \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Dabei wurde benutzt, daß auf Grund der Cramerschen Regel für die inverse Matrix \mathbf{D}^{-1}

$$\det(\mathbf{D}^{(lk)}) = \det(\mathbf{D}) (\mathbf{D}^{-1})_{kl} \quad (\text{B.7})$$

gilt. Die einzelnen Erwartungswerte für die reduzierten Dichtematrizen schreiben sich dann mit (B.6) zu

$$\frac{\langle \sigma | c_i^\dagger c_j | \sigma' \rangle}{\langle \sigma | \sigma' \rangle} = \frac{\langle \sigma | \delta_{ij} - c_j c_i^\dagger | \sigma' \rangle}{\langle \sigma | \sigma' \rangle} = \sum_{kl} x_k^i (\mathbf{D}^{-1})_{kl} x_l^j \quad . \quad (\text{B.8})$$

B.3 Erwartungswerte für ODLRO

Für den Nachweis von ODLRO in Kapitel 2.7.2 müssen zudem Matrixelemente der Form

$$\langle \sigma | c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow} c_{l\uparrow} | \sigma' \rangle / \langle \sigma | \sigma' \rangle \quad (\text{B.9})$$

berechnet werden. Durch die Entkopplung der Elektronen hat man es mit einem effektiven Einteilchen-Problem zu tun. Korrelationsfunktionen höherer Ordnung, wie sie in

¹Diese Matrizen entstehen durch Streichung der l -ten Zeile und k -ten Spalte von \mathbf{D}

der Berechnung der reduzierten Dichtematrizen für ODLRO vorkommen, schreiben sich daher mit dem Wickschen Theorem zu

$$\langle \sigma | c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow} c_{l\uparrow} | \sigma' \rangle / \langle \sigma | \sigma' \rangle = \left(\langle \sigma | c_{i\uparrow}^\dagger c_{l\uparrow} | \sigma' \rangle \langle \sigma | c_{j\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow} | \sigma' \rangle \right) / \langle \sigma | \sigma' \rangle . \quad (\text{B.10})$$

Dabei wurde schon benutzt, daß Einteilchen-Terme mit unterschiedlicher Spinquantenzahl von Erzeuger und Vernichter verschwinden. Das Wicksche Theorem ist hier direkt anwendbar, da $\langle \sigma |$ und $| \sigma' \rangle$ mittels einer geeigneten Transformation der $c_{i\uparrow(\downarrow)}^{(\dagger)}$ als rechtes bzw. linkes Vakuum betrachtet werden können [Bla96].

Anhang C

Das Monte Carlo Verfahren

C.1 'Importance Sampling'

Die Beschreibung des 'Importance Sampling' mittels Monte Carlo soll sich auf endliche Summen beschränken. Die Ising-Hilfsfelder des Quanten-Monte-Carlo haben ja gerade eine endliche Zahl an Freiheitsgraden, was auch den Konfigurationsraum $\{\sigma_i\}$ endlich macht. Ziel ist es dann, eine Summe der Form

$$\sum_{\{\sigma_i\}} w(\sigma_i) f(\sigma_i) \quad (\text{C.1})$$

zu berechnen. Dabei entspricht $w(\sigma_i)$ den Anforderungen an eine Wahrscheinlichkeitsverteilung und wird auch als Monte-Carlo-Gewicht bezeichnet.

Das prinzipielle Vorgehen dabei ist, daß man einen 'Random Walk' im Zustandsraum in der Zeit t unternimmt, der so angelegt ist, daß $w_{\sigma_i}(t) = w(\sigma_i)$ für $t > t_e$ gilt. Dabei bezeichnet t_e die Zeit, die die Simulation braucht, um in seine stabile Gleichgewichtsverteilung einzulaufen. Die Summe (C.1) berechnet sich dann als das arithmetische Mittel $\sum_{t>t_e} f(\sigma(t))$. Dies ist in gewissem Sinne genau das umgekehrte Vorgehen wie in der statistischen Physik, wo man das zeitliche Mittel durch das Scharmittel ersetzt. Man erkennt daran schon, daß Eigenschaften wie die Ergodizität des 'Random Walk' im Zustandsraumes auch hier vorausgesetzt werden müssen [Met53].

C.2 Markov-Ketten

Wir gehen davon aus, daß der endliche Zustandsraum des zu Grunde liegenden Systems durch die Variablen $\{\sigma_i\}$ festgelegt ist. Der 'Random Walk' wird durch den sukzessiven systematischen Übergang von einem σ_{alt} des Zustandsraumes (z.B. durch Umklappen

eines einzelnen, zufällig gewählten Spins eines Isingfeldes) zu einem σ_{neu} erzeugt. Dabei wird ein Zustand σ_j beim k -ten Schritt mit einer Wahrscheinlichkeit p_{ij} angenommen, die nur vom Zustand σ_j des $(k-1)$ -ten Schrittes abhängt. Man erhält so eine (homogene) Markov-Kette mit der Übergangsmatrix $\mathbf{P} = (p_{ij})$, $p_{ij} \geq 0$.

Sei nun $|\{\sigma_i\}| = l$. Betrachtet man den Vektor $a_n = (a_{n1}, \dots, a_{nl})$ der Wahrscheinlichkeiten, im n -ten Schritt die Konfiguration σ_i , $i = 1, \dots, l$ zu erzeugen, so gilt

$$a_n^\top = a_0^\top P^n \quad , \quad (\text{C.2})$$

wenn a_0 die Wahrscheinlichkeitsverteilung am Beginn des Monte-Carlo-Samplings ist. Existiert ein m , so daß für alle i, j die $(\mathbf{P}^m)_{ij} > 0$ gilt, heißt \mathbf{P} quasi positiv. Dies ist Voraussetzung dafür, daß der Markov-Prozeß ergodisch ist und man kann zeigen, daß dann zu jedem j ein von i unabhängiger Grenzwert $\pi_j = \lim_{m \rightarrow \infty} (\mathbf{P}^m)_{ij}$ existiert, mit $\sum_j \pi_j = 1, \pi_j > 0$ [Ros71]. Dies ist gleichbedeutend damit, daß der Vektor $\pi = (\pi_1, \dots, \pi_l)$ der eindeutig bestimmte linksseitige Eigenvektor der Matrix \mathbf{P} zum Eigenwert 1 ist, also

$$\pi_j = \sum_{i=1}^l \pi_i p_{ij} \quad . \quad (\text{C.3})$$

Das Wahrscheinlichkeitsmaß π wird dann auch als Gleichgewichtsverteilung der Markov-Kette bezeichnet.

Mit dem Perron-Frobenius-Theorem kann man darüber hinaus noch Aussagen über die Konvergenzeigenschaften der Grenzwertbildung machen. Das Theorem besagt, daß für alle anderen Eigenwerte ξ_i von \mathbf{P} , $i = 2 \dots l$, $|\xi_i| < 1$ gilt. Sind alle Eigenwerte von \mathbf{P} zueinander verschieden, gilt zudem $\sup_{i=2, \dots, l} |a_{ni} - \pi_i| = \mathcal{O}(|\xi_2|^n)$ [Beh00]. Dies kann verwendet werden, um das t_e aus C.1 abzuschätzen.

C.3 Metropolis-Algorithmus

Der Zweck des Metropolis-Algorithmus ist es nun, die Markov-Kette so zu konstruieren, daß die Gleichgewichtsverteilung π gerade dem $w(\sigma_i)$ in (C.1) entspricht. Dies wird dadurch erreicht, daß bei der Konstruktion der Kette zusätzlich zur Ergodizität das Prinzip des lokalen Gleichgewichts (besser bekannt als 'Detailed Balance')

$$w_j p_{ji} = w_i p_{ij} \quad (\text{C.4})$$

eingehalten wird. Dann ist der Vektor $w = (w_1, \dots, w_l)$ eben gerade die eindeutig bestimmte Gleichgewichtsverteilung der Markov-Kette, da man durch beidseitige Summation über i in (C.4) gerade (C.3) erhält.

Man beginnt nun bei der Konstruktion der Übergangsmatrix \mathbf{P} zuerst mit einer Matrix \mathbf{Q} , welche sich implizit durch die Einführung der 'Move'-Versuche (z.B. wieder das

Umklappen eines einzelnen Spins eines Isingfeldes) definiert. Ist N die Anzahl der Möglichkeiten, bei vorgegebener Konfiguration σ_i einen solchen Versuch auszuführen und wird jeder Versuch mit der gleichen Wahrscheinlichkeit erzeugt, so gilt

$$q_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{N} & \text{falls Move } \sigma_i \rightarrow \sigma_j \text{ existiert} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}. \quad (\text{C.5})$$

Hat man mehrere verschiedene 'Trial-Moves' implementiert, die zudem mit unterschiedlicher Wahrscheinlichkeit ausgeführt werden, kann die Matrix \mathbf{Q} auch komplizierter aufgebaut sein. Vorausgesetzt wird bei diesem Vorgehen, daß \mathbf{Q} dabei quasi positiv ist. Darüber hinaus hat ein symmetrisch aufgebautes \mathbf{Q} , also

$$q_{ij} = q_{ji}, \quad (\text{C.6})$$

einen zusätzlichen Vorteil, wie man in den Umformungen zu (C.7) noch sehen wird.

Nun werden die Übergangswahrscheinlichkeiten in \mathbf{Q} so umgewichtet, daß zusätzlich auch (C.4) erfüllt ist. Dies erreicht man mittels Metropolis dadurch, daß die eigentliche Übergansmatrix \mathbf{P} sich zu

$$p_{ij} = q_{ij} \times \min \left\{ 1, \frac{w_j q_{ji}}{w_i q_{ij}} \right\} =^{(\text{C.6})} q_{ij} \times \min \left\{ 1, \frac{w_j}{w_i} \right\} \quad (\text{C.7})$$

berechnet. Da die Quasi-Positivität dabei erhalten bleibt, ist der Markov-Prozeß ergodisch und hat dann, wie bereits gezeigt, die Verteilung w als Gleichgewichtsverteilung. Das Metropolis-Verfahren eignet sich für die Computer-Simulation deshalb so gut, weil im jeweiligen Markov-Schritt nur $\frac{w_j}{w_i}$ bekannt sein muß und nicht die ganze Matrix \mathbf{P} behandelt zu werden braucht.

C.4 Fehler der Monte-Carlo-Rechnung

Falls die Parameter der Konfigurationen, über die man summiert, aus einem Ensemble unabhängiger Wahrscheinlichkeitsverteilungen stammen, kann der Fehler der gewichteten Summation mit Hilfe des zentralen Grenzwertsatzes zu $\mathcal{O}(\frac{1}{\sqrt{N}})$ abgeschätzt werden. Dies ist z.B. bei der Summation über zufällig bestimmte Phasenraumzustände, dem so genannten 'Simple Sampling', der Fall. Die Abschätzung behält ihre Gültigkeit, wenn die Korrelation zwischen je zwei gemessenen Beiträgen zu einer Observablen innerhalb der Markov-Kette verschwindet. Deshalb läßt man nicht jeden erzeugten Zustand der Kette zur Summe beitragen, sondern erzeugt immer eine von der Observablen abhängige Anzahl n_w an 'Moves' zwischen je zwei so genannten Messungen. Ist die Anzahl der nötigen n_w zu groß bzw. deren Bestimmung für alle nötigen Observablen zu aufwendig, kann man durch eine Binning-Fehlerrechnung die Korrelation nachträglich aus den Daten herausrechnen. Wesentlich dabei ist gerade, daß der Fehler nicht von der Dimension des Konfigurationsraumes abhängt, was das Monte-Carlo-Verfahren für Summen der Form (C.1) besonders geeignet macht [Low70].

C.5 Simulated Annealing

Läuft der Markov-Prozeß gegen eine temperaturabhängige Wahrscheinlichkeitsverteilung P , wie etwa der Boltzmann-Verteilung, kann man das 'Simulated Annealing' durchführen. Dazu wird die Simulation bei einer, durch die Energieskala des konkreten Systems festgelegten, hohen Anfangstemperatur gestartet und diese während des Markov-Prozesses sukzessive abgesenkt. Das Abkühlsschema ist dabei wiederum von den Eigenschaften des jeweils zu simulierenden Systems abhängig. Die hohe Anfangstemperatur gewährleistet, daß von Beginn an Konfigurationen mit akzeptablem Gewicht erzeugt werden. Man kann die Simulation auch physikalisch als zeitliche Entwicklung unter der Mastergleichung

$$\frac{dP_i}{dt} = \sum_j P_j p_{ji} - \sum_j P_i p_{ij} \quad (\text{C.8})$$

auffassen. 'Detailed Balance' sorgt dann im Gleichgewicht dafür, daß $\frac{dP_i}{dt} = 0$ gilt. Anzumerken dabei bleibt, daß nur bei Observablen $\langle \mathcal{O} \rangle$, die keiner eigenen intrinsischen Dynamik gehorchen, und deshalb

$$\frac{d\langle \mathcal{O} \rangle}{dt} = i\hbar[\mathcal{O}, H] = 0 \quad (\text{C.9})$$

gilt, die Kinetik des Systems unter der Mastergleichung physikalisch motiviert werden kann [Bin92].

Literaturverzeichnis

- [And91] P. W. Anderson and R. Schrieffer, *A Dialogue on the Theory of High T_c* , Physics Today, **44** 54 June (1991)
- [Ann96] J. Annott, N. Goldenfeld, and A. J. Legett, *Experimental constraints on the pairing state of the cuprate superconductors: an emerging concensus* in Physical Properties of High Temperature Superconductors V, D. M. Ginsberg (Hrsg.), World Scientific Singapore (1996)
- [Arr96] L. Arrachea, A. A. Aligia, and E. Gagliano, *Anomalous Flux Quantization in a Hubbard Ring with Correlated Hopping*, Phys. Rev. Lett. **23** 4396 (1996)
- [Ass90] F. F. Assaad, *Reinvestigation of the sign problem in the two-dimensional Hubbard model*, Z. Phys. **80** 325 (1990)
- [Ass98] F. F. Assaad, *SU(2)-spin Invariant Auxiliary Field Quantum Monte Carlo Algorithm for Hubbard models* in High performance computing in science and engineering 1998. , E. Krause and W. Jäger (Editors), Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New-York (1998)
- [Bac91] Silvia B. Bacci, Eduardo R. Gagliano, and Richard M. Martin, *Derivation of a one-band Hubbard model for CuO planar materials*, Phys. Rev. **B 44** 7504 (1991)
- [Bae95] D. Baeriswyl, D. K. Campbell, J. M. P. Carmelo, F. Guinen (Hrsg.), *The Hubbard Model*, Plenum Press, New York and London (1995)
- [Bat93] Ghassan George Batrouni, Philippe de Forerand, *Fermion sign problem: Decoupling transformation and simulation algorithm*, Phys. Rev. **B 48** 589 (1993)
- [Beh00] E. Behrends, *Introduction to Markov Chains*, Friedr. Vieweg& Sohn Verlagsgesellschaft mbH, Braunschweig/Wiesbaden (2000)
- [Bin92] K. Binder, D. W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*, 2. überarbeitete Auflage, Springer-Verlag Heidelberg,(1992)

- [Bin95] K. Binder (Hrsg.), *The Monte Carlo Method in Condensed Matter Physics*, Topics in Applied Physics 71, Springer (1995)
- [Bor92] D. Bormann, T. Schneider, M. Frick, *Quantum size effects in the attractive Hubbard model*, Z. Phys. **B87** 1 (1992)
- [Bla96] J.-P. Blaizot, G. Ripka, *Quantum Theory of Finite Systems*, The MIT Press, Cambridge Massachusetts, (1986)
- [Bla81] R. Blankenbecler, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, *Monte Carlo calculations of coupled boson-fermion systems I*, Phys. Rev. **D24** 2278 (1981)
- [Bro91] I. N. Bronstein, K. A. Semendjajew, *Taschenbuch der Mathematik*, Teubner Verlagsgesellschaft, Stuttgart - Leipzig, (1991)
- [Dev00] P. Devillard and J. Ranninger, *Pseudogap Phase in High-T_c Superconductors*, Phys. Rev. Lett. **84** (2000)
- [Eme87] V. J. Emery, *Theory of High-T_c Superconductivity in Oxides*, Phys. Rev. Lett. **58** 2794 (1987)
- [Erc92] E. Ercolessi, G. Morandi and F. Ortolani, *Global and gauge symmetries of the Hubbard model*, Mod. Phys. Lett. **B6**, 77 (1992)
- [Erc97] E. Ercolessi, G. Morandi and P. Pieri, *An Introduction to the Hubbard Model* in Lecture Notes in Phys. Vol. 478: Strongly Correlated Magnetic and Superconducting Systems, G. Sierra, M. A. Martin-Delgado (Hrsg.), Springer, Berlin (1997)
- [Fah91] S. Fahy and D. R. Hamann, *Diffusive behavior of states in the Hubbard-Stratonovich transformation*, Phys. Rev. **B43** 765 (1991)
- [Fei01] W. Feil, *Numerische Simulationen zum 'High-T_c-Glass'*, Diplomarbeit, Universität Regensburg, (2001)
- [Fei96] L. F. Feiner, J. H. Jefferson and R. Raimondi, *Effective single-band models for the high-T_c cuprates. I. Coulomb interactions*, Phys. Rev. **B 53** 8751 (1996)
- [Fet71] A. L. Fetter und J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle-Systems*, McGraw-Hill New York, (1971)
- [Fet98] W. Fettes, *Supraleitung im tt'-Hubbard Modell und in BCS-reduzierten Hubbard-Modellen*, Dissertation, Universität Regensburg, (1998)
- [Fri90] M. Frick, *Numerische Simulationen von Modellen für Hoch-Temperatur-Supraleiter*, Dissertation, Universität Heidelberg, (1990)

- [Gol89] G. H. Golub, C. F. Van Loan, *Matrix Computations, second edition*, The Johns Hopkins University Press, Baltimore and London (1989)
- [Gut63] M. C. Gutzwiller, *Effect of Correlation on the Ferromagnetism of Transition Metals*, Phys. Rev. Lett. **10** 159 (1963)
- [Ham90] D. R. Hamann and S. B. Fahy, *Energy measurement in auxiliary-field many-electron calculations*, Phys. Rev. **B41** 11352 (1990)
- [Ham93] D. R. Hamann and S. Fahy, *Long-range interactions in auxiliary-field many-electron calculations*, Phys. Rev. **B47** 1717 (1993)
- [Hat94] N. Hatano, *Data Analysis for the Quantum Monte Carlo Simulations*, J. Phys. Soc. Jpn. **63** 1691 (1994)
- [Hir83] J. E. Hirsch, *Discrete Hubbard-Stratonovich transformation for fermion lattice models*, Phys. Rev. **B28** 4059 (1983)
- [Hir85] J. E. Hirsch, *Two-dimensional Hubbard model: Numerical simulation study*, Phys. Rev. **B31** 4403 (1985)
- [Hir87] H. Q. Lin and J. E. Hirsch, *Two-dimensional Hubbard model with nearest-and next-nearest-neighbor hopping*, Phys. Rev. **B35** 3359 (1987)
- [Hov53] L. Van Hove, *The Occurrence of Singularities in the Elastic Frequency Distribution of a Crystal*, Phys. Rev. **89** 1189 (1953)
- [Hua01] Z. B. Huang and H. Q. Lin, J. E. Gubernatis, *Quantum Monte Carlo study of Spin, Charge, and Pairing correlations in the t-t'-U Hubbard model*, Phys. Rev. **B64**, 205101 (2001)
- [Hub63] J. Hubbard, *Electron Correlations in Narrow Energy Bands*, Proc. Roy. Soc. **A276** 238 (1963)
- [Hub64a] J. Hubbard, *Electron Correlations in Narrow Energy Bands II. The degenerate band case*, Proc. Roy. Soc. **A277** 237 (1964)
- [Hub64b] J. Hubbard, *Electron Correlations in Narrow Energy Bands III. An improved solution*, Proc. Roy. Soc. **A281** 401 (1964)
- [Hus96a] T. Hußlein, *Supraleitung im Hubbard-Modell: Eine Untersuchung von stark korrelierten Elektronensystemen mit Quanten-Monte-Carlo-Methoden*, Dissertation, Universität Regensburg, (1996)

- [Hus96b] T. Husslein, I. Morgenstern, D. M. Newns, P. C. Pattnaik, J. M. Singer, and H. G. Mattutis, *Quantum Monte Carlo evidence for d-wave pairing in the two-dimensional Hubbard model at a van Hove singularity*, Phys. Rev. **B54**, 16179 (1996)
- [Hyb89] Mark S. Hybertsen and Michael Schlüter, Niels E. Christensen, *Calculation of Coulomb-interaction parameters for La₂CuO₄ using a constrained-density-functional approach*, Phys. Rev. **B39**, 9028 (1989)
- [Kan63] J. Kanamori, *Electron Correlations and Ferromagnetism of Transition Metals*, Prog. Theor. Phys. **30**, 275 (1963)
- [Kaz98] Kazuhiko Kuroki and Hideo Aoki, *A Consistent Description of the Pairing Symmetry in Hole and Electron Doped Cuprates Within the Two-Dimensional Hubbard Model*, J. Phys. Soc. Jpn. **67** 1533 (1998)
- [Lie68] E. H. Lieb, F. Y. Wu, *Absence of Mott Transition in an Exact Solution of Short Range, One-Band-Model in One Dimension*, Phys. Rev. Lett. **20** 1445 (1968)
- [Lin91] W. von der Linden, *Quanten-Monte-Carlo-Simulationen in der Festkörperphysik*, Phys. Blätter, **47** 747 (1991)
- [Lin92] W. von der Linden, *A Quantum Monte Carlo approach to many-body physics*, Phys. Rep. **220** 53 (1992)
- [Loh89] E. Y. Loh(Jr.), J. E. Gubernatis, *Stable numerical simulations of models of interacting electrons* in Electronic Phase Transitions, W. Hanke und Y. V. Kopaev (Hrsg.), north-holland, Amsterdam, (1989)
- [Loh90] E. Y. Loh(Jr.), J. E. Gubernatis, R. T. Scalletar, S. R. White, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, *Sign problem in the numerical simulation of many-electron systems* Phys. Rev. **B41**, 9301 (1990)
- [Lok01] Vadim M. Loktev, Rachel M. Quick, and Sergei G. Sharapov, *Phase fluctuations and pseudogap phenomena*, Phys. Rep. **349**, 1 (2001)
- [Low70] G. G. Lowry (Editor), *Markov chains and Monte Carlo calculations in polymer science*, Marcel Dekker Inc. New York (1970)
- [Mat96] H.-G. Matuttis, *Determinanten Quanten Monte Carlo und analytische Fortsetzung für das Hubbard Modell*, Dissertation, Universität Regensburg, (1995)
- [Mat01] Hans-Georg Mattutis and Nobuyasu Ito, *Some Findings on the Monus-Sign Problem for the Hubbard Model in the Projector Quantum Monte Carlo Method*, J. Phys. Soc. Jpn. **70** 1519 (1992)

- [Mat04] Hans-Georg MATTUTIS and Nobuyasu ITO, *Non-existence of d-wave-superconductivity in the Quantum Monte Carlo Simulation of the Hubbard model*, preprint
- [Met53] N. Metropolis, A. Arianna, W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth and A. H. Teller, *Equation of State Calculations by Fast Computing Machines*, J. Chem. Phys. **21** 1087 (1953)
- [Mic90] R. Micnas, J. Ranninger, *Superconductivity in narrow-band systems with local nonretarded attractive interactions*, Rev. Mod. Phys. 62 113 (1990)
- [Mot49] N. Mott, *The Basis of the Electron Theory, with Special Reference to the Transition Metals*, Proc. Phys. Soc. **A62** 416 (1949)
- [New95] D. M. Newns, C. C. Tsuei, and P. C. Pattnaik, *Van Hove Scenario for d-wave superconductivity in cuprates*, Phys. Rev. **B52** 13611 (1995)
- [Nie95] H. T. Nieh, G. Su, B-H. Zhao, *Off-diagonal long-range order: Meissner effect and flux quantization*, Phys. Rev. **B51** 3760, (1995)
- [Nol91] W. Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik Band 7 Viel-Teilchen-Theorie*, 5. Auflage , Springer (2002)
- [Nol98] Wolfgang Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 5 Quantenmechanik Teil 2*, 3. Auflage Verlag Vieweg, Braunschweig, Wiesbaden, (1998)
- [Ons44] Lars Onsager, *Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition*, Phys. Rev. **65** 117 (1944)
- [Pan01] S. H. Pan, J. O'Neil, R. L. Badzey, C. Chamon, H. Ding, J. R. Englebrecht, H. Esiaki, S. Uchida, K.-W. Ng, E. W. Hudson, K. M. Lang and J. C. Davis, *Microscopic electronic inhomogeneity in the high- T_c -superconductor $\text{Bi}-2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$* , Nature 413 282 (2001)
- [Pen56] O. Penrose und L. Onsager, *Bose-Einstein Condensation and Liquid Helium*, Phys. Rev. **104** 576 (1956)
- [Rae87] H. de Raedt, *Product Formula Algorithms for solving the time dependent Schrödinger Equation*, Comp. Phys. Rep. **7** 1 (1987)
- [Rae93] H. de Raedt and M. Frick, *Stochastic diagonalization* , Phys. Rep. **231** 107 (1993)
- [Rae96] H. de Raedt, *Quantum Theory*, in Proceedings of the Euroconference on Computer Simulation and Molecular Dynamics of Condensed Matter Systems, K. Binder und G. Ciccotti (Hrsg.), Italian Physical Society, (1996)

- [Rin80] P. Ring, P. Schuck, *The nuclear many-body problem*, Springer-Verlag New York, (1980)
- [Ros71] M. Rosenblatt, *Markov Processes. Structure and Asymptotic Behavior*, Springer-Verlag Heidelberg (1971)
- [Sca95] D. J. Scalapino, *The case for $d_{x^2-y^2}$ pairing in the cuprate superconductors*, Phys. Rep. **250** 331 (1995)
- [Sca81] D. J. Scalapino, R. L. Sugar, *Monte Carlo calculations of coupled boson-fermion systems II*, Phys. Rev. **B24** 4295 (1981)
- [Sch00] T. Schneider, J. M. Singer, *Phase Transition Approach to High Temperature Superconductivity*, Imperial College Press (2000)
- [Sew90] G. L. Sewell, *Off-Diagonal Long Range Order and the Meissner Effect*, J. Stat. Phys. **61** 415 (1990)
- [Sil86] B. W. Silvermann, *Density Estimation for Statistics and Data Analysis*, Chapman and Hall New York (1986)
- [Sin95] J. M. Singer, *Monte Carlo Simulationen zu stark korrelierten Systemen*, Dissertation, Universität Regensburg, (1995)
- [Son95] J. Song and J. F. Annett, *Electron-phonon coupling and d-wave superconductivity in the cuprates*, Phys. Rev. **B 51** 3840 (1995)
- [Sor89] S. Sorella, S. Baroni, R. Car, M. Parrinello, *A Novel Technique for the Simulation of Interacting Fermion Systems*, Europhys. Lett. **8** 663 (1989)
- [Suz86] M. Suzuki (Hrsg.), *Quantum Monte Carlo Methods in Equilibrium and Non-equilibrium Systems*, Solid-State Sciences 74, Springer (1986)
- [Suz90] M. Suzuki (Hrsg.), *Fractal Decomposition of exponential Operators with applications to Many-body Theories and Monte Carlo Simulations*, Phys. Lett. **A146**,6 319 (1990)
- [Tho60] D. J. Thouless, *Stability conditions and nuclear rotations in the Hartree-Fock theory*, Nucl. Phys. **21** 225, (1960)
- [Tor04] <http://www.swox.com/gmp/gmp-man-4.1.4.pdf>
- [Tra95] J. M. Tranquada, B. J. Sternlieb, J. D. Axe, Y. Nakamura, S. Uchida, *Evidence for stripe correlations of spins and holes in copper oxide superconductors*, nature **375** 561 (1995)

- [Tsu00] C. C. Tsuei and J. R. Kirtley, *Pairing symmetry in cuprate superconductors*, Rev. Mod. Phys. **72** 969 (2000)
- [Vei96] A. F. Veilleux, A.-M. Daré, L. Chen, Y. M. Vilk, A.-M. S. Tremblay, *Magnetic and pair correlations of the Hubbard model with next-nearest-neighbor hopping*, Phys. Rev. **B52**, 16255 (1995)
- [Whi89] S. R. White, D. J. Scalapino, and R. L. Sugar, *Attractive and repulsive pairing interaction vertices for the two-dimensional Hubbard model*, Phys. Rev. **B 39** 839 (1989)
- [Whi89B] S. R. White, D. J. Scalapino, and R. L. Sugar, E. Y. Loh, J. E. Gubernatis, R. T. Scalettar, *Numerical study of the two-dimensional Hubbard model*, Phys. Rev. **B 40** 506 (1989)
- [Yan62] C. N. Yang, *Concept of Off-Diagonal Long-Range Order and the quantum Phases of Liquid He and of Superconductors*, Rev. Mod. Phys. **34** 694 (1962)
- [Yan90] C. N. Yang and S. C. Zhang, *SO_4 symmetry in a Hubbard model*, Mod. Phys. Lett. **B4**, 759 (1990)
- [Zha96] Shiwei Zhang, J. Carlson and J. E. Gubernatis, *Constrained path Monte Carlo method for fermion ground states*, Phys. Rev. **B55** 7464 (1996)
- [Zha96] J. Carlson, J. E. Gubernatis and G. Ortiz, Shiwei Zhang, *Issues and observations on applications of the constrained-path Monte Carlo method to many-fermion systems*, Phys. Rev. **B59** 12788 (1999)

Danksagung

Zu guter letzt möchte ich an dieser Stelle all denjenigen danken, die das Zustandekommen dieser Arbeit letztendlich erst ermöglicht haben.

- Allen voran gestellt sei mein Doktorvater Prof. Dr. Ingo Morgenstern, der mir während zahlreicher Diskussion immer wieder wichtige Anstöße gab, mit neuen Aspekten einem der wohl beharrlichsten Probleme der numerischen Festkörperphysik beizukommen.
- Des weiteren ist Associate Prof. Dr. Hans-Georg Matuttis für die Darlegung seiner Beobachtungen zum Vorzeichenproblem und die Zusammenarbeit im Rahmen der Untersuchungen zum Vergleich der Update-Algorithmen zu nennen.
- Prof. Dr. Uwe Krey nahm sich des öfteren die Zeit, mir bei meinen Fragen zur Festkörpertheorie weiterzuhelfen.
- Dr. Johannes Schneider überließ mir selbstlos die Quellcodes seiner Übungsblätter und auch die eine oder andere Frage zur Simulationstechnik konnte per E-Mail geklärt werden. Darüber hinaus war er immer für eine wissenschaftliche Diskussion bei seinen leider viel zu seltenen Besuchen an der Universität Regensburg zu haben. Meine Vorgänger Dr. Thomas Hußlein und vor allem Dr. Werner Fettes machten sich die Mühe, mir einige ihrer früheren Programme und Ergebnisse, sowie nützliche Anmerkungen dazu, noch einmal aus ihren Archiven hervorzuholen und mir zukommen zu lassen.
- Aus der Arbeitsgruppe seien vor allem Dr. Markus Puchta, Anja Ebersbach und Markus Zizler erwähnt, auf die bei vielen Dingen immer Verlaß war, auch über das Dienstliche hinaus. Dr. Jörg Kaidel und mein Bruder Thomas Feil ermöglichten mir auch einen Einblick in das (Forschungs-)Geschehen an anderen Lehrstühlen.
- Kerstin Reindl, Claudia Rathgeb, Anja Ebersbach, Martin Ransberger und Andrea Bartmann machten sich die Mühe, die Arbeit Korrektur zu lesen und stellten damit an so mancher Stelle erst die Zuordenbarkeit des Textes zur deutschen Sprache sicher. Andreas Ettner gab mir gerade in der Anfangszeit wertvolle Nachhilfe

bei den mathematischeren Aspekten der Festkörperphysik und der Monte-Carlo-Algorithmen.

- Die EDV-Referenten Dr. Fritz Wünsch und Rudolf Holzer halfen bei dem ein oder anderen Computer-Problem und stellten ganz unbürokratisch durch Backup gesicherten Festplattenplatz bereit, was einen Doktoranden doch bedeutend ruhiger schlafen lässt.
- 'Last but not least' sei noch den zahlreichen Wegbegleitern während der letzten Jahre gedankt, die mir ein privates Umfeld gaben, das mich auch so manche wissenschaftliche Durststrecke überwinden half, allen voran meinen Eltern und meiner Freundin Andrea.