

Starken Korrelationen auf der Spur

Mit der Quanten-Monte-Carlo-Methode zum Verständnis von Hochtemperatur-Supraleitern und Quantengasen

Catia Lavallo, Marcos Rigol und Alejandro Muramatsu

Die physikalischen Eigenschaften von Festkörpern oder anderen Quantensystemen, die aus vielen Teilchen bestehen, lassen sich im Rahmen der Quantenmechanik verstehen, indem man elementare Anregungen identifiziert, die sich als schwach wechselwirkende Bausteine des Ganzen betrachten lassen. In Systemen, die durch die starke Korrelation der elementaren Bausteine gekennzeichnet sind, wie Hochtemperatur-Supraleiter und verwandte Materialien oder ultrakalte Atome in optischen Gittern, versagen jedoch die bekannten theoretischen Methoden wie Mean-Field- oder Störungstheorien. Quanten-Monte-Carlo-Simulationen erlauben es dagegen, Modelle solcher Systeme „numerisch exakt“ zu behandeln.

Obwohl die Menschheit seit Jahrtausenden Metalle kennt und nutzt, ist es erst mit Hilfe der Quantenmechanik gelungen, ihre Eigenschaften zu verstehen. So lässt sich die Temperaturabhängigkeit der spezifischen Wärme bei tiefen Temperaturen ($c \propto T$) mit der Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion erklären, welche die statistischen Eigenschaften von Elektronen (Fermionen) beschreibt. Bei der Herleitung dieses Zusammenhangs in Vorlesungen der statistischen Mechanik wird angenommen, dass die Elektronen nicht miteinander wechselwirken. De facto sind sie aber geladen, sodass sie durchaus einer sehr starken Coulomb-Wechselwirkung unterworfen sein können. Die Lösung dieses Widerspruchs wird im Allgemeinen nicht in Grundkursvorlesungen behandelt. Es war der geniale Physiker Lev Landau, der vorschlug, dass die für die grundlegenden Eigenschaften in einfachen Metallen verantwortlichen elementaren Anregungen Quasiteilchen sind, welche dieselben Quantenzahlen wie die Elektronen besitzen (d. h. Spin $S = 1/2$ und Ladung $Q = e$), aber bei kleinen Energien bzw. Temperaturen miteinander schwach wechselwirken. Systeme, die solche Quasiteilchen besitzen, werden als Landau-Fermi-Flüssigkeit gekennzeichnet.

Seit der Entdeckung der Hochtemperatur-Supraleiter (HTSL) [1] sind wir mit einer Reihe von Verbindungen konfrontiert, die im Experiment von Fermi-Flüssigkeiten abweichen. Bevor wir diese Anomalien nennen, rufen wir einige Grundeigenschaften der HTSL in Erinnerung: Allen HTSL sind CuO_2 -Schichten gemein, die sich über die chemische Komposition der Umge-

bung dotieren lassen. Je nach Umgebung werden Elektronen in diese Schichten hinzugefügt (hier spricht man von elektron-dotierten Verbindungen) oder aus den CuO_2 -Schichten entfernt (loch-dotierte HTSL). Da letztere die höchsten Sprungtemperaturen aufweisen und die ausgeprägtesten Anomalien zeigen, diskutieren wir im Folgenden nur die Dotierung mit Löchern. Undotiert sind die CuO_2 -Schichten Isolatoren, wobei die magnetischen Momente der Kupfer-Ionen ($S = 1/2$) antiferromagnetisch angeordnet sind.

Durch Dotierung erhält man ein Metall, das supra-leitend werden kann. Die Sprungtemperatur wächst zunächst mit der Dotierung, bis die optimale Dotierung mit dem höchsten Wert der Sprungtemperatur erreicht wird. Die oben erwähnten Anomalien sind am deutlichsten im unterdotierten Bereich zu sehen, d. h. bei Dotierungen, die kleiner als die optimale sind. So nimmt die spezifische Wärme bei Abkühlung nicht wie üblich linear mit der Temperatur ab, sondern viel stärker, was sich phänomenologisch durch die Öffnung einer Energielücke erklären lässt. Auch zeigt die Pauli-Suszeptibilität, welche die Änderung der Magnetisierung durch ein konstantes Magnetfeld beschreibt, eine starke Abnahme bei abnehmender Temperatur im Gegensatz zu einer Fermi-Flüssigkeit, bei der diese Größe temperaturunabhängig ist.

Allgemeine Phasenraum-Argumente, welche nur auf dem Pauli-Ausschlussprinzip beruhen, zeigen jedoch, dass nur singuläre Wechselwirkungen zum Zusammenbruch einer Fermi-Flüssigkeit führen können [2]. Eine solche Situation findet man bei wechselwirkenden Elektronen in einer Dimension, wo eine störungstheoretische Behandlung der Wechselwirkung zu Singularitäten führt [3]. Anstatt einer Fermi-Flüssigkeit bildet sich bei einer repulsiven Wechselwirkung eine „Luttinger-Flüssigkeit“ [4]. Dieser Zustand zeichnet sich dadurch aus, dass das eindimensionale Metall keine Fermi-Kante mehr besitzt und elementare Spinanregungen (*Spinonen*) und Ladungsanregungen (*Holonen*) die Quasielektronen bzw. Quasilöcher der Fermi-Flüssigkeit ersetzen. Man spricht in diesem Zusammenhang von Spin-Ladungs-Trennung, da die Quantenzahlen

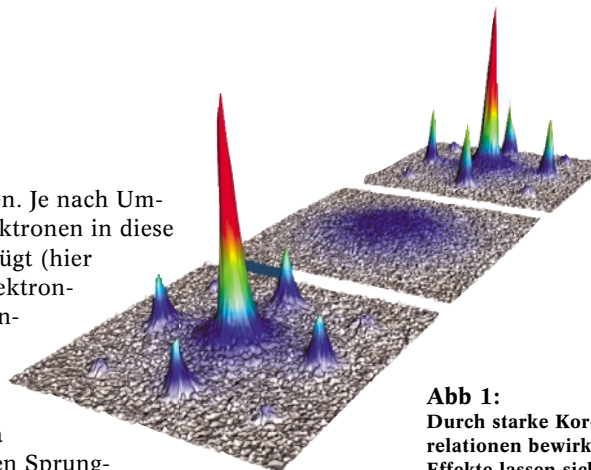


Abb 1: Durch starke Korrelationen bewirkte Effekte lassen sich besonders gut mit Quantengasen realisieren, z. B. der Übergang von einem Bose-Einstein-Kondensat (Mitte) in eine Mott-Isolator-Phase (links und rechts). Quanten-Monte-Carlo-Simulationen erlauben es, die Details der Mott-Phase zu berechnen (Quelle: I. Bloch, Uni Mainz).

Dr. Catia Lavallo, Dipl.-Phys. Marcos Rigol und Prof. Dr. Alejandro Muramatsu, Institut für Theoretische Physik III, Universität Stuttgart, Pfaffenwaldring 57, 70550 Stuttgart

für Spin und Ladung, welche sich in einer Fermi-Flüssigkeit ein und derselben elementaren Anregung (dem Quasiteilchen) zuordnen lassen, in einer Luttinger-Flüssigkeit den oben erwähnten neuen elementaren Anregungen zugeordnet werden: $S=1/2$ und $Q=0$ für Spinonen und $S=0$ und $Q=-e$ für Holonen. Heute besteht Konsens darüber, dass die Supraleitung in den CuO_2 -Schichten zustande kommt, sodass man die HTSL als zweidimensionale Systeme betrachten kann. Daher ist unklar, ob sich die Abweichungen bei den HTSL vom Fermi-Flüssigkeitsverhalten durch eine Luttinger-Flüssigkeit erklären lassen. Vielmehr stellt sich die Frage, welche Bedingungen in zwei Dimensionen zu den oben erwähnten Anomalien führen können, und darüber hinaus, ob die Supraleitung bei hohen Temperaturen damit zusammenhängt.

Neben den Hochtemperatur-Supraleitern gibt es eine weitere, faszinierende Entwicklung, die zu neuartigen fermionischen Systemen führen könnte. Sie ist durch die Möglichkeit gegeben, fermionische Atome in einer magnetooptischen Falle einzufangen, ähnlich wie bei der Bose-Einstein-Kondensation mit bosonischen Atomen. Wie bereits mit Bosonen gezeigt [5], kann der stark korrelierte Limes durch die Überlagerung eines optischen Gitters erreicht werden, das aus stehenden Wellen von Laserstrahlen besteht. Es ist sogar denkbar, in solchen Systemen ähnliche Bedingungen wie in den Hochtemperatur-Supraleitern zu erreichen [6].

Wären die Wechselwirkungen vernachlässigbar klein, könnte die Wellenfunktion vieler Fermionen als (antisymmetrisiertes) Produkt von Einteilchenwellenfunktionen beschrieben werden.¹⁾ Solch einen Produktzustand bezeichnet man als unkorreliert. Schwache Wechselwirkungen zwischen den Fermionen ließen sich dann näherungsweise im Rahmen der Störungstheorie berücksichtigen. Bei starken Wechselwirkungen bricht diese Methode aber vollkommen zusammen. Quantensysteme wie die oben diskutierten HTSL oder Quantengase in optischen Gittern, in denen die Wechselwirkung dominiert, nennt man stark korreliert. Um sie theoretisch ohne unkontrollierte Fehler zu behandeln, sind Methoden gefragt, die störungstheoretische Ansätze

vermeiden. Weiterhin möchte man Quantenfluktuationen korrekt beschreiben, da sie in niedrigen Dimensionen womöglich eine überragende Rolle einnehmen können. Daher sind Methoden wünschenswert, die über Mean-Field-Näherungen, welche generell Fluktuationen vernachlässigen, hinaus gehen. Hier bieten sich vor allem numerische Methoden an.

Eine erste, naheliegende Möglichkeit besteht darin, den in Frage kommenden Hamilton-Operator numerisch zu diagonalisieren. Vor allem wenn man sich nur auf den Grundzustand konzentriert, kann man mit Hilfe der Lanczos-Methode (siehe Glossar) in effizienter Weise sogar Spektralfunktionen, welche sich direkt mit spektroskopischen Messungen vergleichen lassen, berechnen [7]. Da aber die Dimension des Hilbert-Raumes exponentiell mit der Anzahl der Gitterplätze N anwächst, ist die mit dieser Methode zugängliche Systemgröße je nach Modell auf $N \sim 10 - 40$ beschränkt. Ist man aber an (Quanten-) Phasenübergängen (z. B. zur Supraleitung oder Antiferromagnetismus) interessiert, sollte man in der Lage sein, möglichst große Systeme zu behandeln, um eine Extrapolation zum thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ zu ermöglichen.

In Anbetracht der oben genannten Schwierigkeiten, den gesamten Hilbert-Raum zu umfassen, bietet das „importance Sampling“, das den Monte-Carlo-Simulationen unterliegt, einen Ausweg (für klassische Systeme, siehe Infokasten im Artikel von Kurt Binder). Dieselbe Idee lässt sich aber auch anwenden, falls es gelingt, das zu behandelnde quantenmechanische Vielteilchensystem möglichst exakt auf ein klassisches System abzubilden, d. h. so, dass die dabei auftretenden systematischen Fehler in einer kontrollierbaren Weise verringert werden können. Ein Beispiel einer solchen Abbildung sind die so genannten Weltlinien (siehe Infokasten).

Im Folgenden werden wir uns nur auf Verfahren konzentrieren, die „numerisch exakt“ sind, d. h. deren systematische Fehler sich kontrollieren lassen. Am Beispiel zweier Gittermodelle, deren physikalische Eigenschaften trotz ihrer Einfachheit in vieler Hinsicht unbekannt sind, werden wir neue algorithmische Entwicklungen und Resultate für stark korrelierte Systeme diskutieren.

1) Die Antisymmetrisierung sorgt dafür, dass das Pauli-Verbot erfüllt ist, das keine zwei Fermionen im gleichen Zustand erlaubt.

Glossar

► **Lanczos-Methode:** Diese Methode erlaubt es, den Grundzustand eines Vielteilchensystems im Prinzip exakt zu bestimmen. Da die Dimension des Hilbert-Raumes exponentiell mit der Anzahl der Freiheitsgrade (Spins, Teilchen, usw.) anwächst, funktioniert diese Methode nur bei relativ kleinen Systemen (z. B. etwa 40 Gitterplätze bei $S=1/2$ -Spinsystemen) [7].

► **Determinanten-Algorithmus:** Diese Klasse von Algorithmen wird bei Simulationen von Fermionen eingesetzt, falls es möglich ist, den ursprünglichen Hamilton-Operator in eine bilineare Form der Operatoren für Fermionen umzuwandeln. Dann kann die Spur (im Fall endlicher Temperaturen) oder der Erwartungswert im Grundzustand als Determinante ausgedrückt werden, die i. A. von Hilfsfeldern abhängt, welche bei der Umwandlung eingeführt wurden. Die Monte-Carlo-Simulation besteht darin, den Konfigurationsraum der Hilfsfelder zu durchlaufen, wobei

die Determinanten die Gewichte der Hilfsfelder darstellen [12].

► **Maximum-Entropy-Methode:** Dieses Bildrekonstruktionsverfahren liefert das wahrscheinlichste Bild bei einem unvollständigen Satz von Daten. Die fehlende Information wird durch einen entropischen Term berücksichtigt, der allgemeine Informationen (d. h. diejenigen Informationen, die vor Erhalt der Daten über das System bekannt sind, wie z. B. Summenregel) über das betrachtete System beinhaltet. Beispielsweise ist die Korrelationsfunktion in imaginärer Zeit $G(\tau)$ mit der entsprechenden Spektralfunktion für reelle Frequenzen $A(\omega)$ wie folgt verknüpft:

$$G(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{a(\omega) \exp(-\tau\omega)}{1 \pm \exp(-\beta\omega)},$$

mit + (–) für den Fall von Fermionen (Bosonen). Die Extraktion von $A(\omega)$ aus den Daten $G(\tau)$ ist daher äquivalent zu einer inversen Laplace-Transformation. Bei numerisch erhaltenen Daten

ist diese inverse Operation nicht wohldefiniert, da es bei großen Werten von ω aufgrund der endlichen Genauigkeit der Daten in $G(\tau)$ keine eindeutige Lösung für $A(\omega)$ gibt. Dennoch erlaubt es die Maximum-Entropy-Methode, bei Daten hoher Qualität (kleine statistische Fehler $< 0,5\%$) sehr gute Ergebnisse zu erzielen [16].

► **Projektor-Algorithmus:** Hierbei wird der Grundzustand $|\Psi_G\rangle$ aus einer Versuchswellenfunktion $|\Psi_T\rangle$ wie folgt herausprojiziert,

$$|\Psi_G\rangle = \lim_{\theta \rightarrow \infty} \exp(-\theta H/s) |\Psi_T\rangle$$

wobei $\langle \Psi_G | \Psi_T \rangle \neq 0$ gelten soll. Generell wird H durch Einführung von Hilfsfeldern in eine bilineare Form von fermionischen Operatoren umgewandelt, sodass $\langle \Psi_T | \exp(-\theta H) | \Psi_T \rangle$ zu Determinanten führt, welche die Gewichte der verschiedenen Konfigurationen der Hilfsfelder angeben [12].

Dotierte Quantenantiferromagnete

Da die HTSL im Grunde dotierte Quantenantiferromagnete sind, ist es für das Verständnis ihrer physikalischen Eigenschaften entscheidend, das Zusammenspiel von beweglichen Ladungen mit den Spins in einem antiferromagnetischen Hintergrund zu verstehen. Das minimale Modell dazu ist das so genannte t - J -Modell, bei dem die Elektronen von einem Gitterplatz zum nächsten mit einer Amplitude t tunneln können. Falls zwei benachbarte Gitterplätze jeweils mit einem Elektron besetzt sind, wechselwirken die entsprechenden Spins durch eine antiferromagnetische Austauschwechselwirkung J . Weiterhin wird angenommen, dass die Coulomb-Abstoßung lokal sehr groß ist, sodass sich zwei Elektronen mit antiparallelem Spin nicht am selben Platz aufhalten können. Dadurch wird der Hilbert-Raum um einen Zustand pro Gitterplatz reduziert, was vorteilhaft für exakte Diagonalisierungen ist. Dennoch ist es zurzeit nur möglich, Systeme mit $N \sim 30$ Gitterplätzen und einer moderaten Anzahl von Löchern mit der Lanczos-Methode zu behandeln.

Auch in Abwesenheit von Löchern, d. h. für den reinen Antiferromagneten, gelingt es mit der Lanczos-Methode trotz der Reduktion um einen weiteren Zustand nur, Systeme mit $N < 40$ Gitterplätzen zu behandeln. Für Quantenantiferromagnete auf nichtfrustrierten Gittern wurde in den letzten Jahren ein sehr effizienter Quanten-Monte-Carlo-Algorithmus, der sog. *Loop*-Algorithmus, entwickelt [8], der Simulationen von bis zu 10^6 Spins mit $S = 1/2$ erlaubt [9]. In seiner ursprünglichen Form, die wir für die Simulation von dotierten Quantenantiferromagneten einsetzen, wird der Quantenantiferromagnet auf Weltlinien abgebildet, deren Konfigurationen global stochastisch verändert werden. Die Punkte, an denen der Zustand geändert wird, sind durch Schleifen (*Loops*) verbunden, die auch in stochastischer Weise gelegt werden (siehe Infokasten).

Als ersten Schritt, den Einfluss der Quantenfluktuationen des antiferromagnetischen Spinhintergrunds auf die Ladungsdynamik zu untersuchen, betrachten wir den Fall eines einzigen beweglichen Lochs in einem Quantenantiferromagneten. Dieses Problem mag

Weltlinien für quantenmechanische Gittermodelle

Am Beispiel einer Dimension soll gezeigt werden, wie Weltlinien bei einem Gittermodell entstehen. Ein Gittermodell in einer Dimension mit nur Nächster-Nachbar-Wechselwirkungen hat den Hamiltonian $H = \sum_i H_{i,i+1}$. Bei der Berechnung der Zustandssumme wird eine neue Richtung (die Imaginärzeit-Richtung entlang $\beta = 1/k_B T$, wobei k_B die Boltzmann-Konstante und T die absolute Temperatur ist) durch Einschub von vollständigen Sätzen von Zuständen erzeugt:

$$Z = \text{Sp} e^{-\beta H} = \sum_{s_L, \dots, s_1} \langle s_L | e^{-\Delta\tau H} | s_L \rangle \dots \langle s_2 | e^{-\Delta\tau H} | s_1 \rangle \quad (2)$$

wobei $\Delta\tau = \beta/L$ eine Diskretisierung der Richtung β in L „Zeitscheiben“ angibt. Es ist zweckmäßig, den Hamiltonian in solche Beiträge zu teilen, in denen i gerade bzw. ungerade ist: $H = H_g + H_u$, sodass

$$e^{-\Delta\tau H} = e^{-\Delta\tau H_g} e^{-\Delta\tau H_u} + \mathcal{O}(\Delta\tau^2), \quad (3)$$

da i. A. H_g und H_u miteinander nicht kommutieren. Damit entsteht ein systematischer Fehler von $\mathcal{O}(\Delta\tau^2)$, der sich aber durch eine geeignete Wahl von L kontrollieren lässt. Da alle Beiträge zu H_g bzw. H_u miteinander kommutieren, gilt darüber hinaus

$$e^{-\Delta\tau H_g} = \prod_{i \text{ gerade}} e^{-\Delta\tau H_{i,i+1}}, \quad (4)$$

und das Gleiche für ungerades i . Damit wurde das ursprüngliche Problem in Produkte von Termen zerlegt, die jeweils nur die Wechselwirkung zwischen zwei Plätzen enthalten. Erneut können wir vollständige Sätze von Zuständen einschieben, sodass nun insgesamt $2L$ solcher Zustände vorhanden sind. Diese Teilung wird auch als Schachbrett-Zerlegung bezeichnet, da die Schraffierung der Sektoren in Raum und Zeit, in denen die Wechselwirkung der jeweiligen Platzpaare stattfindet, ein Schachbrett ergibt (Abb. i).

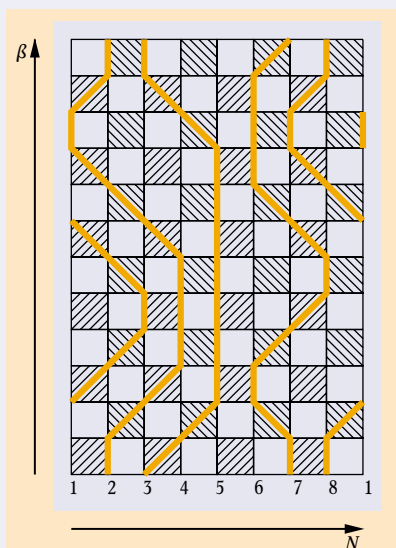


Abb. i: Weltlinien auf einem Schachbrett für eine Kette mit acht Gitterplätzen. Austausch von Spins bzw. Hüpfen von Teilchen kann nur in den schraffierten Kästchen stattfinden.

Nach Einschub der vollständigen Sätze von Zuständen kann man die Zustandssumme als diejenige eines klassischen Systems ansehen, da sie aus einer Summe von C-Zahlen besteht, welche die Gewichte von Konfigurationen einer Variablen auf einem zweidimensionalen Gitter angeben. Um dies deutlicher zu sehen, betrachten wir den Fall des antiferromagnetischen Heisenberg-Modells. Hier können wir die Gitterplätze mit einem Spin-auf als besetzt betrachten und diejenigen mit einem Spin-ab als unbesetzt. Markieren wir die besetzten Plätze mit einem Punkt und verbinden diese Punkte mit Linien, die nicht senkrecht zur Zeitachse verlaufen und die sich auch nicht kreuzen, erhalten wir eine Darstellung der Zustände $|s_1\rangle, \dots, |s_{2L}\rangle$ mit Weltlinien, da sie, wie in der Relativitätstheorie, Trajektorien von „Teilchen“ der Raum-Zeit

beschreiben. Abb. i zeigt ein Beispiel von Weltlinien für eine Kette mit acht Gitterplätzen, periodischen Randbedingungen und $L=6$.

Die Simulation fängt mit einer beliebigen Konfiguration der Weltlinien an. Diese Konfiguration lässt sich durch lokale Änderungen (*moves*) in andere Konfigurationen von Weltlinien umwandeln (Abb. ii). Die neue Konfiguration kann z. B. nach dem Metropolis-Algorithmus (siehe Infokasten im Artikel von Kurt Binder) akzeptiert oder abgelehnt werden, wobei die Gewichte der Konfigurationen durch ein Produkt von Matrixelementen wie in der Gl. (2) gegeben sind.

Dadurch, dass die *moves* lokal sind, wird dieser Algorithmus ineffektiv, wenn die Freiheitsgrade (Spins, Teilchen usw.) über große Gebiete korreliert sind (wie in der Nähe eines Phasenübergangs). Ein entscheidender Fortschritt wurde durch den *Loop*-Algorithmus [8] erreicht. Hier werden

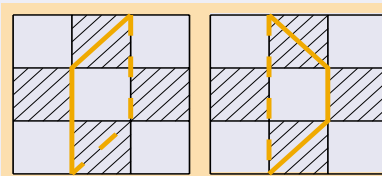


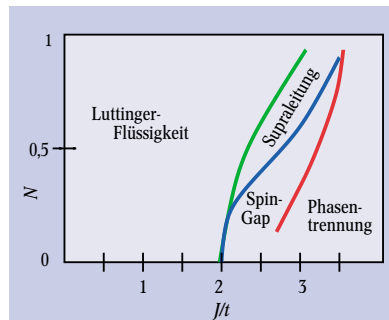
Abb. ii: Mögliche lokale Änderungen (*moves*) der Weltlinien-Konfiguration (volle Linien vor, gebrochene Linien nach dem *move*).

Punkte in der Raum-Zeit durch Schleifen verbunden, welche auch stochastisch bestimmt werden. Ein *move* in diesem Fall entspricht einer Änderung der Zustände aller zur Schleife gehörenden Punkten (z. B. Spin-auf zu Spin-ab oder umgekehrt). Durch solche globalen Änderungen der Konfigurationen wird Ergodizität bei den Simulationen erreicht und Metastabilitäten können vermieden werden.

akademisch erscheinen, entspricht aber einem Photoemissionsexperiment in den undotierten Kupraten [10]. Dabei entfernt ein einfallendes Photon ein Elektron aus dem System und erzeugt somit ein Loch im Antiferromagneten. Kann sich ein Loch in einem solchen System kohärent fortpflanzen und kann man es somit als Quasiteilchen betrachten?

Quantitativ lassen sich diese Fragen durch Betrachtung des Quasiteilchengewichts untersuchen. Diese Größe ist durch $Z(\vec{k}) = |\langle \vec{k}, N-1 | c_{\vec{k}} | N \rangle|$ gegeben, d. h. durch den Überlapp zwischen dem Zustand, der durch Vernichtung eines Elektrons mit Wellenvektor \vec{k} im

Abb. 2: Das Phasendiagramm des eindimensionalen t - J -Modells (Temperatur $T=0$) zeigt ein reichhaltiges Phasenverhalten, abhängig von der Elektronendichte n und der Kopplungskonstante J/t (vgl. Text.)



Grundzustand des Systems mit N Teilchen erzeugt wird (anders gesagt durch die Erzeugung eines Lochs mit diesem Wellenvektor), und einem Eigenzustand des Systems mit demselben Wellenvektor und $N-1$ Teilchen. Ohne Wechselwirkung gilt $Z(\vec{k})=1$, im Allgemeinen und falls ein Quasiteilchen existiert aber $0 < Z(\vec{k}) < 1$. Wichtig bei der Bestimmung des Quasiteilchengewichts ist die Tatsache, dass diese Größe bei endlichen Systemen auch endlich bleibt, da die Orthogonalität der beiden Zustände nur im thermodynamischen Limes erreicht werden kann. Da eine numerische Bestimmung nur in endlichen Systemen durchgeführt werden kann, sollten die dafür verwendeten Methoden in der Lage sein, hinreichend große Systeme zu behandeln, um eine Extrapolation zum thermodynamischen Limes zu erlauben. Für das Quasiteilchengewicht im quadratischen Gitter für Systeme mit bis zu 24×24 Gitterplätzen [11] ergibt die Extrapolation der Daten zum thermodynamischen Limes einen endlichen Wert. Demnach kann sich das Loch kohärent fortpflanzen und die in den eingangs erwähnten Photoemissionsexperimenten beobachtete Dispersion entspricht dem „Band“ des Loches. Für einen quantitativen Vergleich sollten aber weitere Prozesse wie das Hüpfen zu übernächsten Gitterplätzen berücksichtigt werden [10].

Das eindimensionale t - J -Modell

Um den Fall vieler Löcher zu untersuchen, haben wir einen neuen Algorithmus entwickelt, der die Vorteile eines *Loop*-Algorithmus zur effizienten Simulation des Spinhintergrunds mit einem anderen Algorithmus vereint, dem Determinanten-Algorithmus (siehe Glossar) [12]. Dieser kombinierte Hybrid-Loop-Algorithmus erlaubt es zusätzlich zu einer globalen, effektiven Änderung der Spinkonfigurationen, die Dynamik der Löcher für jede Spinkonfiguration exakt zu berechnen. Zunächst haben wir den eindimensionalen Fall untersucht [13], da in zwei Dimensionen das so genannte Vorzeichen-Problem bei endlicher Dotierung zu erwarten ist. Dieses Problem taucht generell bei Simulationen von Fermionen (abgesehen von speziellen Fällen, die leider nicht relevant für dotierte Antiferromagneten

sind) dadurch auf, dass die Wellenfunktionen für Fermionen antisymmetrisch bezüglich des Austausches von zwei Teilchen sind. Daher treten während einer Simulation Beiträge mit wechselnden Vorzeichen auf, welche zu exponentiell wachsenden statistischen Fluktuationen (d. h. statistischen Fehlern) mit einer zunehmenden Anzahl der Gitterplätze oder mit abnehmender Temperatur führen. Dennoch ist das eindimensionale t - J -Modell auch im Hinblick auf die (zweidimensionalen) HTSL interessant, da es ein reiches Phasendiagramm als Funktion der Kopplungskonstanten J/t und der Elektronendichte n [14] besitzt (Abb. 2) und Ähnlichkeiten mit den in den HTSL erwähnten Anomalien vorhanden sind. Bei kleinen Werten von J/t hat man eine für eindimensionale Metalle typische Luttinger-Flüssigkeit. Für größere Werte gibt es einen Bereich, in dem supraleitende Korrelationen dominieren. Bei kleineren Dichten besitzt dieses Modell eine metallische Phase mit einer Energielücke im magnetischen Anregungsspektrum (*Spin-Gap*), analog zu den HTSL im unterdotierten Bereich. Schließlich zeigt das Modell für große Werte von J/t ($J/t > 3-4$) *Phasentrennung*, wobei antiferromagnetisch korrelierte Bereiche räumlich getrennt auftreten von Bereichen, die reich an Löchern sind. Mechanismen, die zur Phasentrennung führen, werden auch bei den HTSL in Verbindung mit *stripes* vermutet [15], wobei antiferromagnetische Bereiche in Form von Streifen vorhanden sein sollen, die durch lochreiche Phasen getrennt sind.

Die ersten Untersuchungen des eindimensionalen t - J -Modells haben sich auf die Spektralfunktion $A(\vec{k}, \omega)$ für Ein-Teilchen-Anregungen konzentriert, d. h. auf die Spektren, welche erhalten werden, wenn ein Elektron entfernt (analog zur Photoemission) bzw. hinzugefügt (analog zur inversen Photoemission) wird. Bei hoher Datenqualität ist es möglich, die in imaginärer Zeit (siehe Infokasten) aus Quanten-Monte-Carlo-Simulationen erhaltenen Ergebnisse auf reelle Frequenzen mittels der Maximum-Entropy-Methode (siehe Glossar) zu übertragen [16]. Diese Operation, welche einer inversen Laplace-Transformation entspricht, ist durch die diskrete Struktur der Daten und die endliche Genauigkeit eines Computers allerdings im Allgemeinen nicht wohldefiniert. Die Maximum-Entropy-Methode kann als ein Bildrekonstruktionsverfahren verstanden werden, das es erlaubt, die wahrscheinlichste Spektralfunktion aus einem (unvollständigen) Satz von Daten zu finden. Abb. 3a zeigt die Spektralfunktion $A(k, \omega)$ für beide Fälle bei $J/t=2$ und einer Dichte $n=0,6$ (24 Elektronen auf 40 Gitterplätzen). Die Energieskala wurde so gewählt, dass die Fermi-Energie bei $\omega=0$ liegt. Somit entspricht der (inverse) Photoemissionsanteil (positiven/negativen Energien). Abb. 3b zeigt die Projektion von $A(k, \omega)$ auf die (ω, k) -Ebene, um die Dispersion der Anregungen zu verdeutlichen. Vor allem im inversen Photoemissionsanteil sind zwei dispergierende Zweige zu sehen, im Gegensatz zu den Erwartungen für ein konventionelles Metall, wo nur ein Band vorkommen sollte. Wie schon oben diskutiert, erwartet man in eindimensionalen Metallen, dass Spin-Ladungstrennung in Spinonen und Holonen stattfindet. In diesem Fall aber zeigt ein Vergleich mit analytischen Ergebnissen aus einem verwandten Modell, nämlich einem t - J -Modell, bei welchem sowohl das Hüpfen als auch die antiferromagnetische Austauschwechselwirkung wie $1/r^2$ abklingen, dass es sich um eine neue Anregung handelt, die Antiholon genannt wird. Diese Anregung wird durch die

Quantenzahlen $Q=2e$ und $S=0$ gekennzeichnet und ist somit *keine* ladungskonjugierte Anregung zu den Holonen [17].

Analytische Ergebnisse sind nur bei $J/t=2$ und mit der oben beschriebenen Wechselwirkung möglich [18]. Jenseits von $J/t=2$ erlauben es Simulationen, exakte Ergebnisse für hinreichend große Systeme bei beliebiger Dotierung zu erhalten. Abb. 3c zeigt $A(k,\omega)$ für $J/t=0,5$, einen Wert, der im experimentell zugänglichen Bereich bei Kupferoxidverbindungen liegt. Da die Antiholonen unverändert existieren, werden sie als generische Anregungen des t - J -Modells angesehen. Die analytisch berechneten Dispersionen von Spinonen, Holonen und Antiholonen basieren auf der Annahme, dass die bei $J/t=2$ erhaltenen Dispersionen nur durch Reskalierung auf andere Werte von J/t erweitert werden können. Diese Annahme setzt voraus, dass die analytisch erhaltenen Beziehungen, welche die neuen Anregungen als frei bei $J/t=2$ kennzeichnen, im gesamten Parameterbereich weiter gültig bleiben. Physikalisch entspricht dies der Annahme, dass Spinonen, Holonen und Antiholonen im gesamten Parameterbereich als die Elementaranregungen des Systems angesehen werden können. Dies wird von den numerischen Simulationen stark unterstützt. Wie bereits erwähnt, wird den Antiholonen die Ladung $Q=2e$ zugeordnet. Darüber hinaus sind die numerischen Daten nur konsistent, wenn die Antiholonen die doppelte Masse der Holonen haben. Da diese Quantenzahlen denen eines Cooper-Paars entsprechen, stellt sich die Frage, ob Antiholonen mit Supraleitung in Verbindung stehen. Dies wird zurzeit untersucht. Falls diese Anregungen tatsächlich eine entscheidende Rolle

bei der Entstehung der supraleitenden Korrelationen im eindimensionalen t - J -Modell spielen, würden weitere Frage folgen, zum Beispiel, ob sie vorgeformte Cooper-Paare darstellen, wie sie bei den HTSL vermutet werden können, nachdem Vortex-ähnliche Anregungen oberhalb T_c beobachtet wurden [19].

Lokale Quantenkritikalität bei Fermionen in optischen Gittern

Stark korrelierte Quantensysteme sind nicht auf Festkörper beschränkt, sondern auch in Atomgasen zu finden. So gelang es beispielsweise kürzlich in einem System aus ultrakalten Atomen, den Übergang von einem Bose-Einstein-Kondensat in eine Mott-Isolator-Phase nachzuweisen (Abb. 1) [5]. Als Mott-Isolator bezeichnet man einen Isolator, der nicht aufgrund der Besetzung aller in einem Band (welches durch die Anwesenheit eines Gitterpotentials zustande kommt) zur Verfügung stehenden Zustände entsteht, wie etwa bei herkömmlichen Halbleitern, sondern dadurch, dass die Wechselwirkung eine Lokalisierung der Teilchen favorisiert [20]. Dies kann man am einfachsten auf einem periodischen Gitter anhand des wohlbekannten Hubbard-Modells sehen, bei dem die Teilchen (Bosonen oder Fermionen) von einem Gitterplatz zum nächsten mit einer Amplitude t tunneln können und eine paarweise Abstoßung U erfahren, wenn sie sich am selben Gitterplatz befinden. Für $U \gg t$ und bei einer kommensurablen Dichte (d. h. die Anzahl der Teilchen N_p gleicht einem ganzzahligen Vielfachen der Anzahl der Gitterplätze N) ist es energetisch günstiger, die Besetzung jedes

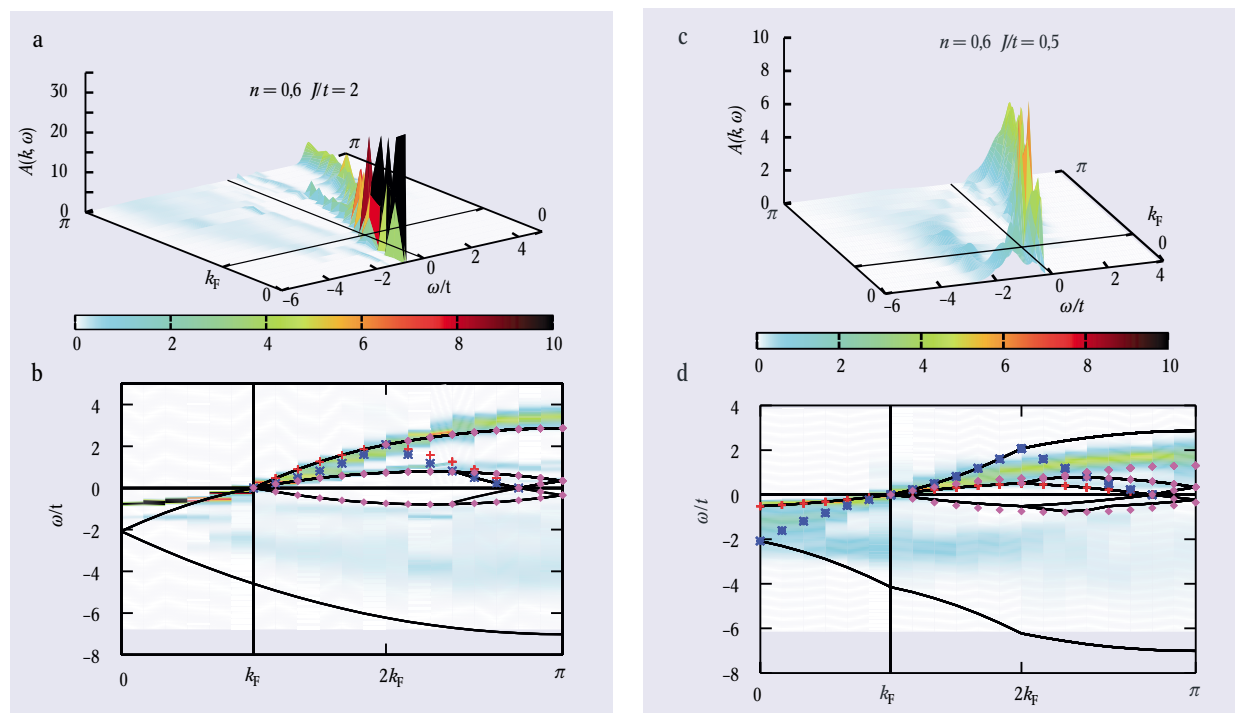


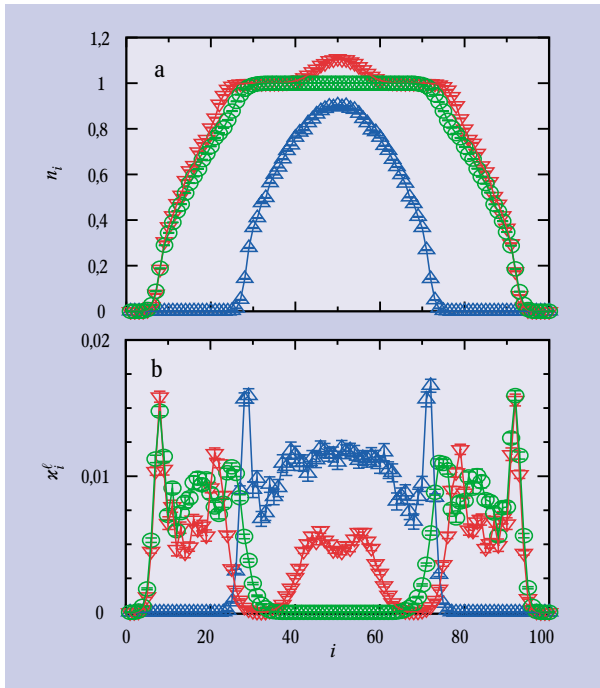
Abb. 3:

Mit der *Maximum-Entropy-Methode* lassen sich im eindimensionalen t - J -Modell die wahrscheinlichsten Spektralfunktionen $A(k,\omega)$ aus einem (unvollständigen) Satz von Daten finden. Zu sehen sind die Spektralfunktionen für $J=2t$ und Dichte $n=0,6$ (a) bzw. für $J=0,5t$ und $n=0,6$ (c). In b und d ist die dazugehörige Projektion der Intensitäten auf die (ω,k) -Ebene gezeigt. $\omega=0$ kennzeichnet die Fermi-Energie. Die diskreten Symbole (Kreuze: Spinonen, Sterne: Holonen, Rauten: Antiholonen) stellen die Anregungen in einem verwandten Modell (t - J -Modell mit $1/r^2$ -Wechselwirkung) dar, wo Teile der Spektralfunktion analytisch berechnet werden können (allerdings nur bei $J/t=2$). Dennoch

lassen sich die Anregungen des $1/r^2$ - t - J -Modells den beobachtbaren Merkmalen der mit Quanten-Monte-Carlo-Simulationen errechneten Spektralfunktion des t - J -Modells mit Nächsten-Nachbarn-Wechselwirkungen zuordnen. Dies ist ein starker Hinweis darauf, dass alle drei Anregungen (Spinon, Holon und Antiholon) in letzterem Modell vorhanden sind. Bei anderen Werten von J können die Ergebnisse aus Quanten-Monte-Carlo-Simulationen für das t - J -Modell mit Nächsten-Nachbarn-Wechselwirkungen nur durch eine Reskalierung von J gut beschrieben werden (d). Dies weist wiederum darauf hin, dass Antiholonen generische Anregungen im simulierten Modell sind.

Gitterplatzes bei N_p/N zu halten, sodass Hüpfprozesse unterdrückt werden. Ultrakalte Atome erfahren bei sehr tiefen Temperaturen (im Nanokelvinbereich) nur eine Kontaktwechselwirkung. Eingefangen in einem optischen Gitter (d. h. ein periodisches Potential, das durch eine stehende Lichtwelle erzeugt wird), bilden sie daher die beste Realisierung des Hubbard-Modells, im Gegensatz zu den Systemen in der Festkörperphysik, bei denen das Hubbard-Modell nur den kurzreichweitigen Anteil der Coulomb-Wechselwirkung berücksichtigt.

Abb. 4:
 ► a) Dichteprofile für (▲) $N_f=30$ Fermionen, $U=6t$ und $V_2=15t$, (●) $N_f=70$ Fermionen, $U=6t$ und $V_2=6,25t$, und (▼) $N_f=74$ Fermionen, $U=6t$ und $V_2=7t$ in einem System mit 100 Gitterplätzen.
 ► b) Die lokale Kompressibilität χ_i^ℓ verschwindet in den isolierenden Gebieten.



Die erwähnten Experimente haben gezeigt, dass sich Effekte, die durch starke Korrelationen hervorgerufen werden, besonders gut mit Quantengasen realisieren lassen. Im Gegensatz zu den in der Festkörperphysik gängigen Systemen befinden sich ultrakalte Atome jedoch immer unter dem Einfluss eines Fallenpotentials, sodass die Teilchendichte ortsabhängig ist. Einerseits ermöglicht dies überhaupt erst einen Mott-Isolator, ohne die Dichte an einen mit dem Gitter kommensurablen Wert fein anpassen zu müssen, wie es in einem homogenen System notwendig ist (siehe Diskussion oben). Andererseits bedeutet dies aber, dass sich der Mott-Isolator im Allgemeinen nicht über das ganze System erstreckt, sondern nur in Teilgebieten des Systems entsteht. Quanten-Monte-Carlo-Simulationen erlauben es, solche Gebiete als Funktion der Teilchenzahl und Stärke der Wechselwirkung quantitativ zu bestimmen [21].

Da Mott-Isolatoren in Domänen auftreten, stellt sich die Frage, wie sich solche Gebiete quantitativ bestimmen lassen und ob der Übergang in ein solches Gebiet als Phasenübergang aufzufassen ist. Wir sind diesen Fragen für das eindimensionale Hubbard-Modell und Fermionen mit zwei Spinzuständen nachgegangen, die sich in einer Falle mit einem Potential $V_\alpha(x_i) = x_i^\ell$ befinden (hier bezeichnet i die Gitterplätze, α ist eine gerade ganze Zahl. Für die Simulation haben wir den sog. Projektor-Algorithmus angewandt (siehe Glossar), der den Grundzustand des Systems aus einer Versuchswellenfunktion herausprojiziert. Dieser Algorithmus liefert auch „numerisch exakte“ Ergebnisse. Wie Abb. 4a für $\alpha=2$ zeigt, führt das Fallenpotential zu einem inhomogenen Dichteprofil.

Je nach Stärke von V_2 und Anzahl der Teilchen ergeben sich für einen gegebenen Wert der Wechselwirkung ($U/t=6$ in diesem Fall) folgende Situationen: i) ein näherungsweise parabolisches Dichteprofil, das einem metallischen Zustand entspricht, ii) ein Plateau mit Dichte $n=1$, das einem Mott-Isolator entspricht, umgeben von Bereichen mit abnehmender Dichte, d. h. metallischen Gebieten, und iii) eine neue metallische Phase, die sich mitten im Plateau entwickelt.

An dieser Stelle soll betont werden, dass die Be-

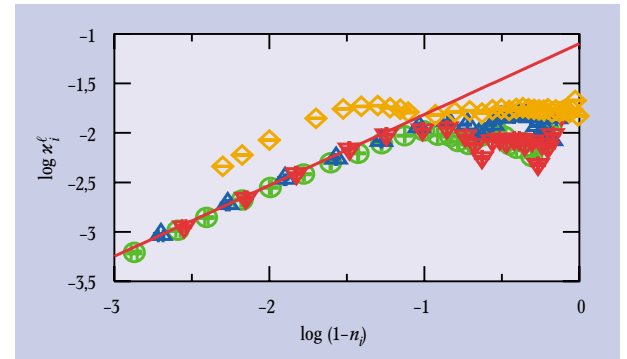


Abb. 5:
 Lokale Kompressibilität χ_i^ℓ vs. $\delta=1-n_i$ im Limes $\delta \rightarrow 0$ für (▲) $N_f=70$ Fermionen, $U=8t$ und $V_2=6,25t$; (▼) $N_f=70$, $U=6t$ und $V_2=6,25t$; (●) $N_f=72$, $U=6t$ und ein biquadratisches Potential $V_4=6,25t$; (◆) periodisches System mit $U=6t$. Mit Ausnahme des periodischen Systems zeigen Systeme mit verschiedener Stärke der Wechselwirkung und/oder verschiedener Form des Fallenpotentials dasselbe Potenzgesetz, womit zwei Charakteristika eines Phasenübergangs zu sehen sind, nämlich kritisches Verhalten und Universalität.

zeichnungen Metall bzw. Mott-Isolator zunächst nur qualitativer Natur sind, da der Wert der Dichte allein im Prinzip keine eindeutige Zuordnung erlaubt. Da die hier gezeigten Gebiete mikroskopisch sind, ist insbesondere auch unklar, ob sie wohl definierten Phasen entsprechen. Um diese Frage quantitativ zu klären, haben wir die folgende Größe eingeführt [22]:

$$\chi_i^\ell = \sum_{|j| \leq \ell(U)} \chi_{i,i+j}, \quad (1)$$

wobei χ_{ij} die Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion ist. Wir haben eine Längenskala $\ell(U) \approx b\xi(U)$ angenommen, wobei $\xi(U)$ die durch χ_{ij} im homogenen System (d. h. für $V_\alpha=0$) definierte Korrelationslänge bei der Dichte $n=1$ in Abhängigkeit von U ist. Der Faktor b wird so gewählt, dass die erhaltenen Werte von χ_i^ℓ unempfindlich gegenüber b sind. Im Allgemeinen haben wir $b \sim 5-10$. Die Funktion $\chi_{i,j} = \langle (n_i - \langle n_i \rangle)(n_j - \langle n_j \rangle) \rangle$ gibt die Korrelation im Raum der Dichtefluktuationen um den lokalen Mittelwert an (hier bezeichnet $\langle \dots \rangle$ einen Erwartungswert im Grundzustand). Bei einem homogenen Isolator fallen diese Korrelationen beim Abstand ξ exponentiell ab. Weiterhin addieren sich diese Fluktuationen zu Null, da in diesem Fall das System inkompressibel ist. Dies ist analog zur bekannten Schwankungsrelation der statistischen Mechanik, die die Kompressibilität einer Flüssigkeit als Integral von Dichteschwankungen beschreibt. Abb. 4b zeigt die Profile von χ_i^ℓ , wobei die Gebiete mit $n=0$ oder $n=1$ durch eine verschwindende lokale Kompressibilität gekennzeichnet sind. Dies zeigt, dass χ_i^ℓ eine quantitative Bestimmung der metallischen bzw. isolierenden Gebiete als Funktion der Position erlaubt.

Nachdem eine quantitative Bestimmung der metal-

lischen und isolierenden Gebiete möglich ist, konzentrieren wir uns auf die Abhängigkeit von χ_i als Funktion von $\delta \equiv 1 - n$, d. h. in der Nähe des Übergangs von einem metallischen zu einem isolierenden Gebiet, der stattfindet, wenn die lokale Dichte sich dem Wert $n = 1$ nähert. Abb. 5 zeigt diese Abhängigkeit auf einer doppeltlogarithmischen Skala, wobei $\chi_i \sim \delta^\varpi$ mit $\varpi \approx 0,68 - 0,78$ über etwa zwei Größenordnungen variiert. Dies bedeutet aber, dass Divergenzen in der Ableitung von χ_i nach der Dichte n vorhanden sind, ganz analog zum Verhalten eines Ordnungsparameters bei kontinuierlichen Phasenübergängen, wo er im Allgemeinen ein Potenzgesetz als Funktion des Abstandes vom kritischen Punkt zeigt. Darüber hinaus zeigt Abb. 5, dass Ergebnisse für verschiedene Werte von U/t in einem harmonischen Potential und sogar für ein biquadratisches Potential ($\alpha = 4$) auf ein und derselben Kurve kollabieren. Die bei kritischen Phänomenen übliche Universalität ist demnach auch in diesem Fall vorhanden. Anhand dieser zwei Charakteristika von kritischen Phänomenen, nämlich Kritikalität und Universalität, welche die hier definierte lokale Kompressibilität zeigt, gehen wir davon aus, dass χ_i einen Ordnungsparameter darstellt und dass sich der Übergang von einem Gebiet in das andere als Phasenübergang auffassen lässt. Natürlich sind die hier behandelten Systeme endlich, sodass die Potenzgesetze nur über einen endlichen Bereich in δ zu beobachten sind. Dennoch sind die hier betrachteten Systeme groß genug, um die oben besprochenen Charakteristika von kritischen Phänomenen zu zeigen.

Die Existenz von Kritikalität in einem mikroskopischen Bereich scheint jedoch im Widerspruch zu der Tatsache zu stehen, dass kritisches Verhalten mit der Divergenz einer Korrelationslänge im System zu tun hat. Die im Infokasten beschriebene Abbildung eines quantenmechanischen Systems in ein äquivalentes klassisches System zeigt aber, dass die Lineardimension in der Richtung der imaginären Zeit bei Temperatur $T = 0$ unendlich wird. Daher machen es langreichweitige Korrelationen in der imaginären Zeitrichtung prinzipiell möglich, dass ein quantenmechanisches Vielteilchensystem lokal im Raum Kritikalität zeigt. Deswegen handelt es sich hier um Quantenkritikalität.

Zusammenfassung und Ausblick

Die beiden diskutierten Beispiele zeigen, dass Quanten-Monte-Carlo-Simulationen in vielen Fällen in der Lage sind, eine sehr genaue Beschreibung von stark korrelierten Systemen zu geben, bei denen keine andere theoretische Methode zuverlässige Aussagen erlaubt. Zu den Ergebnissen zählt die Identifizierung der elementaren Anregungen, der Nachweis, dass Quasiteilchen existieren sowie die Entdeckung einer neuen Form von Kritikalität, die in Quantensystemen lokal auftreten kann. Doch um auch dotierte Quantenantiferromagnete in zwei Dimensionen oder frustrierte Quantenantiferromagnete behandeln zu können, gilt es bei den Quanten-Monte-Carlo-Methoden noch das „Vorzeichen-Problem“ zu überwinden. In der Lösung dieses Problems besteht derzeit die größte Herausforderung bei der Simulation von stark korrelierten Quantensystemen.

Danksagung

Wir danken dem John von Neumann-Institut für Computing und dem Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart für die Rechenzeit auf Massiv-Parallelrechnern.

Literatur

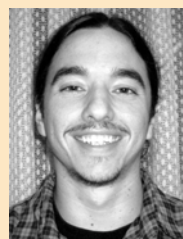
- [1] G. J. Bednorz und K. A. Müller, Z. Phys. B **64**, 188 (1986)
- [2] P. Nozières, Theory of interacting Fermi systems, W. A. Benjamin, New York (1964)
- [3] J. Solyom, Adv. Phys. **28**, 201 (1979)
- [4] J. Voit, Rep. Prog. Phys. **58**, 977 (1995)
- [5] M. Greiner et al., Nature **415**, 39 (2002)
- [6] W. Hofstetter et al., Phys. Rev. Lett. **89**, 220407 (2002)
- [7] E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994)
- [8] H. G. Evertz, Adv. Phys. **52**, 1 (2003)
- [9] J.-K. Kim und M. Troyer, Phys. Rev. Lett. **80**, 2705 (1998)
- [10] F. Ronning et al., Science **282**, 2067 (1998)
- [11] M. Brunner, F. F. Assaad und A. Muramatsu, Phys. Rev. B **62**, 15480 (2000)
- [12] A. Muramatsu, M. P. Nightingale und C. J. Umrigar (Hrsg.), Quantum Monte Carlo Methods in Physics and Chemistry, Dordrecht (1999)
- [13] C. Lavallo et al., Phys. Rev. Lett. **90**, 216401 (2003)
- [14] M. Nakamura, K. Nomura und A. Kitazawa, Phys. Rev. Lett. **79**, 3214 (1997)
- [15] S. A. Kivelson et al., Rev. Mod. Phys. **75**, 1201 (2003)
- [16] M. Jarrell und J. Gubernatis, Phys. Rep. **269**, 133 (1996)
- [17] Z. N. C. Ha und F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **73**, 2887 (1994)
- [18] M. Arikawa, Y. Saiga und Y. Kuramoto, Phys. Rev. Lett. **86**, 3096 (2001)
- [19] Z. A. Xu et al., Nature **406**, 487 (2000)
- [20] M. Imada, A. Fujimori und Y. Tokura, Rev. Mod. Phys. **70**, 1039 (1998)
- [21] G. Batrouni et al., Phys. Rev. Lett. **89**, 117203 (2002)
- [22] M. Rigol et al., Phys. Rev. Lett. **91**, 130403 (2003)

Die Autoren

Catia Lavallo studierte Physik an der Universität *La Sapienza* in Rom und diplomierte an der International School for Advanced Studies in Triest, wo sie sich schon mit numerischen Simulationen stark korrelierter Quantensysteme befasste. Sie promovierte 2003 an der Universität Stuttgart, wo sie auch den Hybrid-Loop-Algorithmus entwickelte.



Marcos Rigol studierte und diplomierte am Instituto de Ciencias y Tecnologías Nucleares, Havana, Kuba. Seit Sommer 2001 ist er Doktorand in Stuttgart, wo er numerische Methoden für die Simulation von ultrakalten Atomen auf optischen Gittern entwickelt.



Alejandro Muramatsu studierte Physik an der Universität Buenos Aires, Argentinien. Mit einer Doktorarbeit am MPI für Festkörperforschung promovierte er an der Universität



Stuttgart. Nach einer Postdoktorandenzeit am Institute for Theoretical Physics, University of California, Santa Barbara, habilitierte er an der Universität Würzburg. Seinen ersten Ruf erhielt er an die Universität Augsburg. Seit 1996 leitet er das Institut für Theoretische Physik III der Universität Stuttgart.