

# **Ferromagnetismus und temperaturabhängige elektronische Struktur in metallischen Filmen**

D i s s e r t a t i o n  
zur Erlangung des akademischen Grades  
d o c t o r   r e r u m   n a t u r a l i u m  
(Dr. rer. nat.)  
im Fach Physik

eingereicht an der  
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät I  
der Humboldt-Universität zu Berlin

von  
Tomas Herrmann  
geboren am 22.03.1969 in Oak Ridge

Präsident der Humboldt-Universität zu Berlin  
Prof. Dr. Dr. h. c. H. Meyer

Dekan der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät I  
Prof. Dr. J. P. Rabe

Gutachter: 1. Prof. Dr. W. Nolting  
2. Prof. Dr. R. Keiper  
3. Prof. Dr. R. Jelitto

Eingereicht am: 05.03.1999

Tag der mündlichen Prüfung: 03.06.1999



# Kurzzusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wird der Einfluß der reduzierten Translations-symmetrie auf die magnetischen Eigenschaften in dünnen Filmen und an Oberflächen auf der Basis des stark korrelierten Hubbard-Modells untersucht. Zunächst wird die Möglichkeit von spontanem Ferromagnetismus im Hubbard-Modell für translations-symmetrische Systeme diskutiert. Verschiedene Näherungsmethoden zur Lösung des Vielteilchenproblems des Hubbard-Modells werden detailliert beschrieben und mit Ergebnissen von Quanten-Monte-Carlo-Rechnungen verglichen. Die Konsistenz mit exakten Resultaten über die grobe Struktur der Ein-Teilchen-Spektraldichte im Li-mes starker Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen erweist sich als es-sentiell wichtig für eine qualitativ korrekte Beschreibung von spontanem Ferromag-netismus. Das Temperaturverhalten in der ferromagnetischen Phase wird anhand von Magnetisierungskurven sowie mit Hilfe des spinabhängigen Quasiteilchenspek-trums ausführlich diskutiert.

Ein genaues Verständnis der Physik des Volumensystems liefert die Basis für den Übergang zu Systemen mit reduzierter Translationssymmetrie. Es wird ei-ne Methode vorgestellt mit der sich approximative Theorien für das translations-symmetrische Hubbard-Modell auf die Behandlung von Filmsystemen verallgemei-nern lassen. Die magnetischen Eigenschaften dünner Hubbard-Filme werden mit Hilfe der lagenabhängigen Magnetisierung als Funktion der Temperatur sowie der Filmdicke diskutiert. Die Abhängigkeit der Curie-Temperatur von der Filmdicke wird untersucht. Insbesondere wird auf die Frage nach der magnetischen Stabi-lität an der Oberfläche eingegangen. In stark korrelierten Elektronensystemen ist für endliche Temperaturen die magnetische Stabilität an der Oberfläche reduziert im Vergleich zu den inneren Lagen, obwohl auf der Basis des bekannten Stoner-Bildes für Bandmagnetismus genau der gegenteilige Trend zu erwarten wäre. Es wird gezeigt, daß sich dieses Verhalten anhand einfacher Argumente verstehen läßt. Die magnetischen Eigenschaften der Hubbard-Filme lassen sich im Detail mit Hilfe der lokalen Quasiteilchenzustandsdichte sowie der wellenvektorabhängigen Spektral-dichte analysieren. Die elektronische Struktur zeigt eine ausgeprägte Spin-, Lagen- und Temperaturabhängigkeit.

In einem weiteren Teil der Arbeit wird der temperaturgetriebene Reorientie-rungsübergang der Magnetisierungsrichtung in dünnen metallischen Filmen unter-sucht. Dazu müssen die die Hubbard-Filme um anisotrope Beiträge der Dipol-Wechselwirkung und der Spin-Bahn-Wechselwirkung erweitert werden. Das Wech-selspiel von Dipol- und Spin-Bahn-Anisotropie führt unter gewissen Bedingungen zu einem Reorientierungsübergang als Funktion der Temperatur. Im Rahmen des hier vorgestellten Zugangs lassen sich sowohl Reorientierungsübergänge von einer senk-rechten in eine parallele Position („Fe-artig“) als auch Reorientierungsübergänge von einer parallelen in eine senkrechte Position („Ni-artig“) der Magnetisierung qualita-tiv korrekt beschreiben.



# Abstract

In this work the influence of the reduced translational symmetry on the magnetic properties of thin itinerant-electron films and surfaces is investigated within the strongly correlated Hubbard model. Firstly, the possibility of spontaneous ferromagnetism in the Hubbard model is discussed for the case of systems with full translational symmetry. Different approximation schemes for the solution of the many-body problem of the Hubbard model are introduced and discussed in detail. It is found that it is vital for a reasonable description of spontaneous ferromagnetism to be consistent with exact results concerning the general shape of the single-electron spectral density in the limit of strong Coulomb interaction between the electrons. The temperature dependence of the ferromagnetic solutions is discussed in detail by use of the magnetization curves as well as the spin-dependent quasiparticle spectrum.

For the investigation of thin films and surfaces the approximation schemes for the bulk system have to be generalized to deal with the reduced translational symmetry. The magnetic behavior of thin Hubbard films is investigated by use of the layer-dependent magnetization as a function of temperature as well as the thickness of the film. The Curie-temperature is calculated as a function of the film thickness. Further, the magnetic stability at the surface is discussed in detail. Here it is found that for strong Coulomb interaction the magnetic stability at finite temperatures is reduced at the surface compared to the inner layers. This observation clearly contradicts the well-known Stoner picture of bandmagnetism and can be explained in terms of general arguments which are based on exact results in the limit of strong Coulomb interaction. The magnetic behavior of the Hubbard films can be analyzed in detail by inspecting the local quasiparticle density of states as well as the wave vector dependent spectral density. The electronic structure is found to be strongly spin-, layer-, and temperature-dependent.

The last part of this work is concerned about the temperature-driven reorientation transition in thin metallic films. For the description of the magnetic anisotropy in thin films the dipole interaction as well as the spin-orbit interaction have to be included in the model. By calculating the temperature-dependence of the magnetic anisotropy energy it is found that both types of temperature-driven reorientation transitions, from out-of-plane to in-plane (“Fe-type”) and from in-plane to out-of-plane (“Ni-type”) magnetization are possible within the generalized Hubbard films.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2. Grundlagen: Theoretische Modellsysteme</b>	<b>9</b>
<b>3. Ferromagnetismus im Hubbard-Modell</b>	<b>13</b>
3.1. Das Vielteilchenproblem des Hubbard-Modells . . . . .	13
3.2. Die exakten Summenregeln der Momente . . . . .	18
3.3. Der Limes schwacher Korrelation . . . . .	21
3.3.1. Das Hubbard-Modell in der Hartree-Fock-Näherung . . . . .	21
3.3.2. Die Störungstheorie zweiter Ordnung . . . . .	22
3.4. Der Limes starker Korrelation . . . . .	23
3.5. Der Limes unendlicher Dimensionen . . . . .	26
3.6. Approximative Theorien für das Hubbard-Modell . . . . .	29
3.6.1. Die Methode des Spektraldichteansatzes . . . . .	29
3.6.2. Die modifizierte Legierungsanalogie . . . . .	37
3.6.3. Die interpolierende Legierungsanalogie . . . . .	43
3.6.4. Die modifizierte Störungstheorie . . . . .	49
3.6.5. Zusammenfassung und Vergleich mit QMC-Resultaten . . . . .	50
<b>4. Übergang zu Systemen mit reduzierter Translationssymmetrie</b>	<b>55</b>
4.1. Die Geometrie idealer Filmsysteme . . . . .	55
4.2. Das Vielteilchenproblem der Hubbard-Filme . . . . .	56
4.3. Wechselwirkungsfreie Filme . . . . .	58
4.4. Approximative Theorien für Hubbard-Filme . . . . .	63
4.4.1. Die Hartree-Fock-Näherung für Filmsysteme . . . . .	68
4.4.2. Die SDA für Hubbard-Filme . . . . .	69
4.4.3. Die MAA für Hubbard-Filme . . . . .	70
<b>5. Ferromagnetismus in dünnen Hubbard-Filmen und an Oberflächen</b>	<b>73</b>
<b>6. Temperaturgetriebener Reorientierungsübergang in dünnen metallischen Filmen</b>	<b>99</b>
6.1. Magnetische Anisotropie und Reorientierungsübergang . . . . .	99
6.2. Erweiterung der Hubbard-Filme um anisotrope Beiträge . . . . .	104
6.3. Störungstheorie für die freie Energie . . . . .	105
6.4. Reorientierungsübergang als Funktion der Temperatur . . . . .	107
<b>7. Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>115</b>

<b>A. Details der numerischen Auswertung</b>	<b>121</b>
A.1. Zur Lösung der impliziten Gleichungssysteme . . . . .	121
A.2. Zur Berechnung der CPA-Selbstenergie . . . . .	122
A.3. Zur Durchführung der $\mathbf{k}$ -Summation . . . . .	122
A.4. Zur Matrixinversion . . . . .	123
<b>B. Matsubara-Summen</b>	<b>127</b>
B.1. Übergang zu Matsubara-Summen . . . . .	127
B.2. Zur numerischen Berechnung der Matsubara-Summen . . . . .	131
<b>C. Details zum Aufbau der Filmstrukturen</b>	<b>135</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>138</b>

# 1. Einleitung

Ferromagnetismus gilt als eines der am längsten bekannten Phänomene der Festkörperphysik. Während die makroskopischen Eigenschaften magnetischer Materialien im allgemeinen relativ gut verstanden sind, stellen die mikroskopischen Mechanismen der kollektiven Ordnung immer noch ein aktuelles und spannendes Forschungsgebiet dar. Diese Arbeit behandelt den sogenannten *Bandmagnetismus*. Prototypische Vertreter des Bandmagnetismus sind die magnetischen Übergangsmetalle Fe, Co, Ni, in denen die kollektive magnetische Ordnung von den itineranten Elektronen der schmalen 3d-Bänder gebildet wird. Diese tragen gleichzeitig zur Leitfähigkeit bei. Man weiß, daß in den 3d-Bändern der Übergangsmetalle der Einfluß der Coulomb-Wechselwirkung im Vergleich zur kinetischen Energie der Elektronen relativ groß ist. Eine starke Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen kann unter gewissen Bedingungen dazu führen, daß ein ferromagnetisch geordneter Zustand energetisch günstiger ist als der paramagnetische Zustand. Allerdings erfordert eine detaillierte Erklärung des Phänomens Bandmagnetismus das Verständnis des subtilen und äußerst nicht-trivialen Zusammenspiels von kinetischer Energie, Coulomb-Wechselwirkung, des Pauli-Prinzips sowie der Gitterstruktur der betrachteten Elektronensysteme.

Allgemein ist die Untersuchung von stark korrelierten Elektronensystemen eines der zentralen Themen der modernen Festkörperphysik. Neben dem kollektiven Magnetismus der Übergangsmetalle sind zum Beispiel die Hochtemperatur-Supraleitung und der Metall-Isolator-Übergang (Mott-Hubbard-Isolatoren) weitere prominente Phänomene, deren Erklärung – so glaubt man – in der starken Korrelation zwischen den Valenzelektronen zu suchen ist.

Neue Einblicke in die mikroskopischen Mechanismen der kollektiven magnetischen Ordnung erlaubt das Studium von dimensionsreduzierten Systemen. Die Möglichkeiten der modernen Molekularstrahlepitaxie zur Probenherstellung unter Ultrahochvakuumbedingungen haben eine rege Forschungstätigkeit auf dem Gebiet des Magnetismus dünner Filme ausgelöst [1,2,3,4]. Im Sinne einer Motivation sollen hier kurz einige grundlegende Eigenschaften dünner magnetischer Übergangsmetall-Filme dargestellt werden.

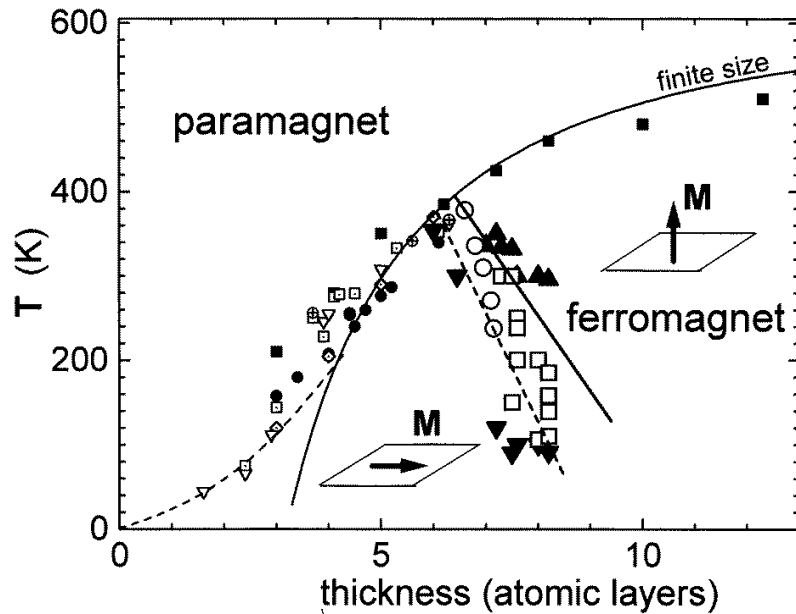
**Zum Magnetismus in dünnen metallischen Filmen.** Übergangsmetall-Filme können in einer kontrollierten und reproduzierbaren Weise bis in den Bereich von nur wenigen Atomlagen Dicke hergestellt werden. Die Filmdicke kann gewissermaßen als ein *neuer* Parameter angesehen werden, dessen Variation vielfältige Auswirkungen sowohl auf die strukturellen als auch auf die magnetischen Eigenschaften der betrachteten Systeme haben kann. Die Struktur, mit der die Filme auf dem Substrat

aufwachsen, hängt stark von den experimentellen Wachstumsbedingungen ab. Hier erweist sich eine genaue Klassifikation mittels Strukturuntersuchungen als sehr wichtig. Die magnetischen Eigenschaften dünner Filme reagieren im allgemeinen sehr empfindlich auf geringe strukturelle Veränderungen [5]. Es ist klar, daß darüberhinaus die Rauigkeit an den Grenzflächen, eine mögliche Interdiffusion zwischen Substrat und Film sowie Stufen- und Inselbildung eine wichtige Rolle spielen [1]. Zur Untersuchung von Magnetismus in dünnen Filmen haben sich in den letzten Jahren eine Vielzahl experimenteller Methoden etabliert. Eine knappe, aber umfassende Zusammenstellung findet sich zum Beispiel in Referenz [4]. Grundsätzlich muß dabei unterschieden werden, ob die jeweiligen Techniken im wesentlichen Oberflächen- oder Volumeneigenschaften messen, sowie, ob sie eine laterale Auflösung zulassen oder nicht.

Von Interesse in Bezug auf Magnetismus in dimensionsreduzierten Systemen sind zunächst grundlegende magnetische Eigenschaften wie das Temperaturverhalten der spontanen Magnetisierung, das kritische Verhalten der Magnetisierung in der Nähe des Phasenübergangs, die Abhängigkeit der Curie-Temperatur von der Filmdicke sowie der Einfluß von magnetischer Anisotropie. Experimentell findet man, daß Übergangsmetall-Filme schon ab einer einzigen Monolage eine langreichweitige ferromagnetische Ordnung zeigen können [6, 7]. Zwar schließt das Mermin-Wagner-Theorem [8, 9] eine spontane kollektive Ordnung bei endlichen Temperaturen in isotropen zweidimensionalen Modellsystemen (z. B. Heisenberg-Modell, Hubbard-Modell) aus. Theoretische Untersuchungen haben aber gezeigt, daß schon eine sehr kleine Anisotropie ausreicht, um spontanen Magnetismus mit einer beträchtlichen kritischen Temperatur zu stabilisieren [10, 11, 12, 13]. In realen Systemen gibt es zwangsläufig immer eine endliche Anisotropie, sei es aufgrund der Dipol-Wechselwirkung, der Spin-Bahn-Wechselwirkung oder durch eine nichtverschwindende Kopplung zwischen Substrat und Film.

Eine große Zahl von Arbeiten hat sich in den letzten Jahren mit dem kritischen Verhalten der spontanen Magnetisierung in dünnen Filmen befaßt [14, 7, 15, 16, 17, 18, 19, 20]. Hier ist insbesondere der Übergang von einem zweidimensionalen zu einem dreidimensionalen Verhalten des kritischen Exponenten der Magnetisierung als Funktion zunehmender Filmdicke interessant [17, 20]. Allerdings erweist sich eine genaue experimentelle Bestimmung der kritischen Exponenten als problematisch [16, 18]. Zum einen muß die Curie-Temperatur, bei der die langreichweitige ferromagnetische Ordnung verschwindet, sehr genau bekannt sein. Darüberhinaus ist das wahre kritische Verhalten nur für Temperaturen sehr nahe an der Curie-Temperatur zu erwarten.

Eine wesentliche Konsequenz endlicher Filmdicken ist die Reduktion der Curie-Temperatur im Vergleich zum zugehörigen Volumenkristall [1, 2, 3, 4, 7, 21, 22]. In Abwesenheit bedeutender struktureller Übergänge steigt die Curie-Temperatur mit wachsender Filmdicke im allgemeinen kontinuierlich bis zu ihrem Volumenwert an. Ein solches Verhalten zeigen zum Beispiel dünne Ni-Filme auf Cu(100), deren Phasendiagramm in Abbildung 1.1 gezeigt ist [4]. Aufgrund ihrer vielfältigen strukturellen und magnetischen Eigenschaften wurden Fe-Filme auf Cu(100) sehr intensiv untersucht. Dünne Fe-Filme wachsen auf Cu(100) in einer tetragonal verzerren fcc-Struktur (fct: *face-centered tetragonal*) auf. Als Funktion der Filmdicke findet man



**Abbildung 1.1.:** Die Curie-Temperatur von Ni/Cu(100)-Filmen als Funktion der Filmdicke (kleine Symbole). Zusätzlich ist die Richtung der Magnetisierung angegeben. Für dünne Filme liegt der Magnetisierungsvektor in der Filmebene ( $\blacktriangledown$ ), für dickere Filme senkrecht zur Filmebene ( $\blacktriangle$ ). Im Bereich dazwischen liegt eine gewinkelte Magnetisierung vor ( $\square$ ). Das Phasendiagramm wurde aus Referenz [4] entnommen.

im wesentlichen drei Bereiche, in denen sich die magnetischen Eigenschaften deutlich unterscheiden [23, 5, 24]: Für kleine Filmdicken  $d \lesssim 4$  steigt die Curie-Temperatur zunächst an, fällt dann aber steil ab und bleibt in einem Dickenbereich  $5 \lesssim d \lesssim 10$  annähernd konstant. Die totale Magnetisierung entspricht hier ungefähr 1.5 magnetisch aktiven Monolagen [25]. Dies ließe sich dadurch erklären, daß in diesem Dickenbereich nur die erste oder die ersten beiden Lagen zur ferromagnetischen Ordnung beitragen, während die inneren Lagen aufgrund geringer struktureller Veränderungen (von fct nach fcc) paramagnetisch [23] oder antiferromagnetisch geordnet sind [5, 25]. Neuere Untersuchungen deuten jedoch darauf hin, daß sich hier zwar ein Übergang von fct nach fcc vollzieht, dieser aber nicht lagenweise, sondern über lateral endlich ausgedehnte (domänenartige) Bereiche abläuft [26]. Während die fct-Bereiche ferromagnetisch geordnet sind, bilden die Bereiche mit einer fcc-Struktur eine antiferromagnetische Ordnung aus, deren Néel-Temperatur allerdings deutlich unterhalb der Curie-Temperatur der fct-Bereiche liegt. Das Temperaturverhalten der Magnetisierung wird von Umstrukturierungseffekten dominiert [27]. Die kritische Temperatur, bei der die ferromagnetische Ordnung verschwindet, ist nicht durch die Curie-Temperatur gegeben, sondern durch das Verschwinden der fct-Bereiche als Funktion steigender Temperatur („temperaturgetriebener, struktureller Ordnungs-Unordnungs-Übergang“) [27, 26]. Ab  $d \approx 10$  findet ein struktureller Übergang zu einer bcc-Struktur statt, die Curie-Temperatur steigt sprunghaft an und nähert sich mit wachsender Filmdicke dem Volumenwert an. Dünne Fe-Filme auf Co(100) zeigen ähnliche magnetische Eigenschaften [28].

Néel hat als erster erkannt, daß die magnetische Anisotropie, die die Richtung der spontanen Magnetisierung bestimmt, aufgrund der reduzierten Symmetrie an

der Oberfläche (Film/Vakuum) bzw. Grenzfläche (Film/Substrat) in dünnen Filmen deutlich größer sein kann als im Volumensystem [29]. Mikroskopische Ursachen der magnetischen Anisotropie sind die Dipol-Wechselwirkung und die Spin-Bahn-Wechselwirkung. Das Wechselspiel zwischen Dipol- und Spin-Bahn-Anisotropie, die in vielen Filmsystemen von der gleichen Größenordnung sind, kann zu einem sehr komplexen magnetischen Verhalten führen. Die Untersuchung der magnetischen Anisotropie dünner Übergangsmetall-Filme hat sich in den letzten Jahren zu einem sehr lebhaften Forschungsgebiet entwickelt. In vielen Übergangsmetall-Filmen beobachtet man einen Wechsel der Magnetisierungsrichtung (Reorientierungsübergang) als Funktion der Filmdicke oder als Funktion der Temperatur. Exemplarisch läßt sich die Richtung der Magnetisierung für dünne Ni-Filme auf Cu(100) aus Abbildung 1.1 entnehmen. Hier findet man als Funktion wachsender Filmdicke einen Reorientierungsübergang von einer Magnetisierungsrichtung in der Filmebene zu einer Magnetisierungsrichtung senkrecht zur Filmebene [30, 3, 4]. Zudem sieht man in Abbildung 1.1, daß ein solcher Reorientierungsübergang für gewisse Filmdicken auch als Funktion steigender Temperatur möglich ist [31, 4]. Der Reorientierungsübergang in dünnen Ni/Cu(100)-Filmen stellt allerdings eine Ausnahme dar. Die meisten untersuchten Filmsysteme bilden einen Reorientierungsübergang in umgekehrter Richtung aus. Einen Übergang von einer senkrechten zu einer parallelen Magnetisierung als Funktion der Filmdicke zeigen zum Beispiel Fe/Cu(100) [32, 2, 5], Fe/Ag(100) [33, 34] und Co/Au(111) [2]. Auch diese Art von Reorientierungsübergang kann als Funktion der Temperatur auftreten. Ein genaues Verständnis der magnetischen Anisotropie ist auch von starkem technologischen Interesse, da für die Datenspeicherung in immer kleineren Systemen eine Magnetisierungsrichtung senkrecht zur Filmebene wünschenswert ist.

**Zur Theorie des Magnetismus in dünnen metallischen Filmen.** Wesentlich zum Verständnis der Grundzustandseigenschaften dünner Übergangsmetall-Filme haben *ab initio*-Rechnungen im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie in der Lokale-Dichte-Näherung (DFT-LDA) beigetragen [35, 36, 37, 38, 39]. Diese Rechnungen basieren allerdings grundsätzlich auf dem Stoner-Bild des Bandmagnetismus und berücksichtigen Coulomb-Korrelationen zwischen den itineranten 3d-Elektronen der Übergangsmetalle daher nur auf einem relativ niedrigen Niveau. Es ist bekannt, daß Ferromagnetismus ein Phänomen starker Coulomb-Korrelation darstellt. Zudem sind *ab initio*-Realstrukturechnungen auf die Beschreibung von Grundzustandseigenschaften beschränkt. Um diese Beschränkung zu überwinden, wird in Referenz [40] die temperaturabhängige elektronische Struktur dünner ferromagnetischer Filme mit Hilfe einer Verallgemeinerung der *fluctuating local moment*-Methode berechnet. Allerdings werden dabei die Lagenmagnetisierungen bei endlichen Temperaturen sowie die Spin-Spin-Korrelationsfunktion, die die kurzreichweitige magnetische Ordnung charakterisiert, als Input benötigt. In Referenz [39] werden magnetische Phasenübergänge in dünnen Filmen mit Hilfe einer Abbildung von *ab initio*-Resultaten auf ein effektives Ising-Modell untersucht. Hasegawa berechnet die magnetischen Eigenschaften dünner Übergangsmetall-Filme im Rahmen der *single site spin fluctuation*-Theorie [41, 42, 43]. Bei  $T = 0$  reduziert sich diese Methode auf die gewöhnliche Hartree-Fock-Theorie [42].

---

Um die magnetischen Eigenschaften dünner Filme bei endlichen Temperaturen zu untersuchen, haben sich idealisierte Modellsysteme als sehr hilfreich erwiesen. Die meisten bislang durchgeführten Modellrechnungen basieren auf sogenannten *lokalisierten Spin-Modellen* wie das Ising-Modell oder das Heisenberg-Modell [10, 44, 45, 46, 47]. Insbesondere der Mechanismus, der zu dem experimentell gefundenen Reorientierungsübergang als Funktion der Temperatur führt, ist sehr genau untersucht worden [48, 49]. Es ist allerdings nicht klar, inwieweit die Ergebnisse der lokalisierten Spin-Modelle auf Übergangsmetall-Filme übertragen werden können. Denn der itinerante Charakter der 3d-Elektronen, die in den Übergangsmetallen für die magnetische Ordnung verantwortlich sind, wird im Rahmen der lokalisierten Spin-Modelle vollständig vernachlässigt. Als Beispiel sei hier die Frage nach der Stabilität der Magnetisierung an der Oberfläche bei endlichen Temperaturen genannt. Im Heisenberg-Modell erwartet man, daß die Magnetisierung an der Oberfläche mit steigender Temperatur schneller abnimmt als im Volumen, da die Zahl der magnetischen „Bindungen“ an der Oberfläche reduziert ist. Dieses einfache Argument läßt sich aber nicht auf den Fall von Bandmagnetismus übertragen. Man weiß, daß im Rahmen eines *Tight-Binding-Modells* zur Beschreibung der Bandstruktur die reduzierte Koordinationszahl an der Oberfläche zu einer verringerten effektiven Bandbreite der Zustandsdichte führt. Dies bedeutet aber, daß die effektive Coulomb-Korrelation an der Oberfläche erhöht ist. Intuitiv ist also eine erhöhte magnetische Stabilität in der Oberflächenlage zu erwarten. Die magnetische Stabilität an der Oberfläche dünner Filme und in halbumendlichen Systemen ist ein zentrales Thema dieser Arbeit.

Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, das Zusammenspiel von reduzierter Translationssymmetrie und starker elektronischer Korrelation in einem Modell itineranter Elektronen zu untersuchen. Insbesondere steht der Einfluß der reduzierten Dimension auf spontanen Ferromagnetismus und die spin-, lagen- und temperaturabhängige elektronische Struktur im Vordergrund. Aufgrund der reduzierten Translationssymmetrie an der Oberfläche erhalten wichtige magnetische Größen eine Lagenabhängigkeit. Neben der Frage nach der magnetischen Stabilität an der Oberfläche sind zum Beispiel das Temperaturverhalten der Lagenmagnetisierung, die zugehörigen Magnetisierungsprofile sowie die Abhängigkeit der Curie-Temperatur von der Filmdicke interessant.

Eines der einfachsten Modelle zur Beschreibung stark korrelierter Elektronen auf einem Gitter ist das *Hubbard-Modell*. Das Hubbard-Modell wurde ursprünglich zur Beschreibung des Bandmagnetismus der magnetischen Übergangsmetalle eingeführt und hat sich in der Zwischenzeit als ein Standard-Modell zur Untersuchung von Korrelationseffekten in itineranten Elektronensystemen entwickelt. Die wichtigsten Vereinfachungen, die das Hubbard-Modell charakterisieren, sind die Beschränkung auf den on-site Term der Coulomb-Wechselwirkung sowie die Vernachlässigung der Bandentartung der 3d-Bänder. Trotz dieser starken Vereinfachungen stellt die Lösung des Hubbard-Modells selbst für translationssymmetrische Gitter ein kompliziertes, nicht-triviales Vielteilchenproblem dar. Eine exakte Lösung ist bislang nur in bestimmten Grenzfällen gelungen. Aufgrund der reduzierten Symmetrie der Filmsysteme wird eine Lösung des Hubbard-Modells weiter erschwert. Um spontanen Ferromagnetismus in dimensionsreduzierten Systemen im Detail untersu-

chen zu können, werden daher möglichst einfache Approximationsverfahren benötigt. Auf der anderen Seite sollten Korrelationseffekte auf einem deutlich höheren Niveau als in der Hartree-Fock-Näherung behandelt werden. Diese wurde in den Referenzen [50] bereits zur Beschreibung von Magnetismus in dünnen Hubbard-Filmen angewendet. Es ist bekannt, daß die Hartree-Fock-Näherung den magnetischen Bereich im Phasendiagramm drastisch überschätzt. Die Berücksichtigung von Korrelationseffekten ist wichtig für eine qualitativ korrekte Beschreibung von spontanem Ferromagnetismus, insbesondere bei endlichen Temperaturen. Zur Untersuchung von Ferromagnetismus sowie von Korrelationseffekten in der elektronischen Struktur im Rahmen des Hubbard-Modells haben sich approximative analytische Theorien, die sich an exakten Grenzfällen des Modells orientieren, als ein geeigneter Startpunkt erwiesen [51]. In dieser Arbeit wird der Übergang zu Filmsystemen im Rahmen approximativer analytischer Theorien für das Hubbard-Modell durchgeführt.

**Über den Aufbau dieser Arbeit.** Anhand einer groben Klassifikation magnetischer Materialien werden in Kapitel 2 theoretische Modell-Systeme zu deren Beschreibung diskutiert. Nach der Einführung des Hubbard-Modells werden einige grundlegende Aussagen über dessen Phasendiagramm zusammengefaßt.

Das Kapitel 3 behandelt das Hubbard-Modell auf einem translations-symmetrischen Gitter. Im Vordergrund steht dabei das Verhalten spontaner ferromagnetischer Lösungen – insbesondere als Funktion der Temperatur. Zur Lösung des Vielteilchenproblems des Hubbard-Modells werden verschiedene approximative Lösungen vorgestellt und diskutiert. Approximative Theorien für das Hubbard-Modell sollten sich an möglichst vielen, physikalisch aussagekräftigen Grenzfällen orientieren. Von zentraler Bedeutung in Bezug auf spontanen Ferromagnetismus sind die exakten Aussagen von Harris und Lange [52] im Limes starker Coulomb-Wechselwirkung. Die Überlegungen zum translationssymmetrischen Hubbard-Modell liefern in gewissem Sinne die Basis für die weiteren Kapitel.

Die Verallgemeinerung des Hubbard-Modells auf Systeme mit einer reduzierten Translationssymmetrie ist Gegenstand von Kapitel 4. Hier werden wir zunächst die lokalen Zustandsdichten und die Ladungsverteilung in wechselwirkungsfreien Filmen für verschiedene Filmgeometrien diskutieren. Anschließend wird eine Methode vorgestellt, mit der sich approximative Theorien für das translationssymmetrische Hubbard-Modell auf die Behandlung von Filmsystemen verallgemeinern lassen. Hierbei ist wichtig, daß die Grenzfälle, an denen sich die approximativen Lösungen orientieren, weiterhin korrekt reproduziert werden. Für die Methode des Spektraldichteansatzes (SDA) und die Methode der modifizierten Legierungsanalogie (MAA) wird der Übergang zu Filmsystemen explizit durchgeführt.

In Kapitel 5 werden die Ergebnisse der numerische Auswertung der SDA und der MAA für Filmsysteme in verschiedenen Geometrien vorgestellt. Das magnetische Verhalten von Hubbard-Filmen wird anhand der Lagenmagnetisierung als Funktion der Temperatur und der Filmdicke diskutiert. Weiter wird die Curie-Temperatur als Funktion der Filmdicke berechnet. Auf die Frage nach der magnetischen Stabilität an der Oberfläche wird ausführlich eingegangen. Die magnetischen Eigenschaften der Hubbard-Filme lassen sich im Detail mit Hilfe der lokalen Quasiteilchenzustandsdichte sowie der lokalen Spektraldichte analysieren. Die elektronische Struktur zeigt

---

eine ausgeprägte Spin-, Lagen- und Temperaturabhängigkeit.

Das Kapitel 6 behandelt den magnetischen Reorientierungsübergang in dünnen Hubbard-Filmen. Nach einer kurzen Einführung in die Thematik der magnetischen Anisotropie, werden die Hubbard-Filme um anisotrope Beiträge der Dipol-Wechselwirkung und der Spin-Bahn-Wechselwirkung erweitert. Auf der Basis einer Störungstheorie für die freie Energie des Systems wird die Anisotropieenergie als Funktion der Temperatur diskutiert. Das Zusammenspiel von Dipol- und Spin-Bahn-Anisotropie führt unter gewissen Bedingungen zu einem temperaturgetriebenen Reorientierungsübergang. Im Rahmen des hier vorgestellten Zugangs lassen sich sowohl Ni-artige als auch Fe-artige Reorientierungsübergänge qualitativ korrekt beschreiben.

Die Arbeit endet schließlich mit einer knappen Zusammenfassung sowie einigen Anhängen, die im wesentlichen Details der numerischen Rechnungen behandeln.



## 2. Grundlagen: Theoretische Modellsysteme

Für das Verständnis von spontanem Magnetismus, wie auch vieler anderer Korrelationsphänomene, haben sich stark idealisierte Modell-Systeme als äußerst hilfreich erwiesen. Der Grundgedanke dabei ist, durch eine geeignete Idealisierung des betrachteten Systems – im Sinne einer physikalisch motivierten Trennung in wesentliche und weniger wichtige Aspekte –, dessen Eigenschaften in einem möglichst einfachen Bild zu verstehen. Ein solches Verständnis wird zunächst oft nur qualitativer Natur sein. Der Nutzen der Modelle steht und fällt mit ihrer physikalischen Motivation. Um die betrachteten Systeme auch quantitativ zu beschreiben, ist es in einem weiteren wichtigen Schritt erforderlich, die Modelle auf die Beschreibung von Realsubstanzen zu erweitern.

Die große Vielfalt an magnetischen Materialien erfordert zum Teil sehr unterschiedliche Modellsysteme, die jeweils nur einen beschränkten Anwendungsbereich haben [53]. Spontaner Magnetismus entsteht aus der kollektiven Ordnung permanenter magnetischer Momente unterhalb einer für das System charakteristischen kritischen Temperatur. Die permanenten magnetischen Momente werden im Festkörper von den Elektronen, die den Spin  $s = 1/2$  tragen, gebildet und können je nach Materialklasse entweder *lokalisiert* oder *itinerant* sein. Lokalisierte magnetische Momente resultieren zum Beispiel aus unvollständig gefüllten inneren Elektronenschalen, die gemäß den Hund'schen Regeln zu einem Gesamtdrehimpuls  $J \neq 0$  koppeln. Typische Vertreter der magnetischen Materialien mit lokalisierten Momenten sind die sogenannten 4f-Systeme (Seltenen Erden oder Lanthanide). Je nach Konfiguration der Valenzelektronen kommen die 4f-Systeme als Isolatoren bzw. Halbleiter (z.B. Europiumchalkogenide: EuO, EuS, EuSe, EuTe) oder auch als Metalle (z.B. Gd) vor.

**Heisenberg-Modell.** Die magnetischen Eigenschaften der *Isolatoren* können gut auf der Grundlage des Heisenberg-Modells verstanden werden [53]:

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j. \quad (2.1)$$

Das Heisenberg-Modell stellt einen effektiven Modell-Hamilton-Operator dar, der die Wechselwirkung lokalisierter Spins  $\mathbf{S}_i$  beschreibt. Die Ursache der Kopplung ist letztlich die spinunabhängige Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen. Die Kopplungskonstanten  $J_{ij}$  sind zunächst als reine Parameter aufzufassen.  $J_{ij} > 0$  ( $i \neq j$ ) führt zu einer ferromagnetischen,  $J_{ij} < 0$  zu einer antiferromagnetischen

Kopplung zwischen den Spins. Anschluß an eine mikroskopische Deutung der Kopplungskonstanten  $J_{ij}$  erhält man zum Beispiel auf der Grundlage sogenannter *indirekter Austauschmechanismen* [53], wie dem Doppelaustausch oder dem Superaustausch.

**sf-Modell.** Eine weitere indirekte Austauschwechselwirkung läßt sich in Metallen mit lokalisierten magnetischen Momenten begründen. In diesen Systemen wird der Magnetismus und die Leitfähigkeit von unterschiedlichen Elektronengruppen bewirkt. Im Rahmen der bekannten RKKY-Wechselwirkung wird eine Heisenbergartige Kopplung zwischen den lokalisierten Spins über die Elektronen in einem breiten Leitungsband vermittelt. Für diese Klasse des sogenannten *lokalisierten Magnetismus* liefert das sf-Modell eine angemessene Beschreibung [53]. Es beinhaltet ein meist wechselwirkungsfreies Leitungsband (s-Band), ein System von an den Gitterplätzen lokalisierten Spins (f-Spinsystem) sowie einen intraatomaren Kopplungsterm zwischen dem Leitungsband und dem f-Spinsystem gemäß

$$-g \sum_i \boldsymbol{\sigma}_i \mathbf{S}_i . \quad (2.2)$$

Hier ist  $\boldsymbol{\sigma}_i$  der Spinoperator eines Elektrons am Gitterplatz  $\mathbf{R}_i$ , und  $\mathbf{S}_i$  beschreibt einen lokalisierten f-Spin. Häufig wird zusätzlich eine direkte Heisenberg-Wechselwirkung zwischen den lokalisierten f-Spins angenommen. Mit dem sf-Modell läßt sich insbesondere die Reaktion der Leitungsbandstruktur der 4f-Systeme auf die magnetische Ordnung der lokalisierten Momente untersuchen.

**Hubbard-Modell.** Eine deutlich andere Modellbildung erfordern dagegen solche Metalle, in denen die Elektronen, die zur kollektiven Ordnung beitragen, nicht lokalisiert, sondern itinerant sind. Diese Klasse von Systemen steht im Mittelpunkt der vorliegenden Arbeit. Prototypische Materialien des sogenannten *Bandmagnetismus* sind die Übergangsmetalle Fe, Co, Ni. Die kollektive magnetische Ordnung wird in diesen Systemen durch die Elektronen der schmalen 3d-Bänder gebildet, die gleichzeitig auch zur Leitfähigkeit beitragen. Hier ist der Einfluß der Coulomb-Wechselwirkung relativ groß im Vergleich zur kinetischen Energie. Eines der einfachsten Vielteilchenmodelle zur Beschreibung stark korrelierter Elektronen auf einem Gitter ist das Hubbard-Modell, das 1963 gleichzeitig von J. Hubbard [54], M. C. Gutzwiller [55] und J. Kanamori [56] eingeführt wurde:

$$\mathcal{H} = \sum_{ij\sigma} (T_{ij} - \mu\delta_{ij}) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma} . \quad (2.3)$$

Dabei bezeichnen  $c_{i\sigma}^\dagger$  ( $c_{i\sigma}$ ) die Erzeugungs- (Vernichtungs-) Operatoren eines Elektrons mit Spin  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  in einem Wannier-Zustand am Gitterplatz  $\mathbf{R}_i$ ,  $T_{ij}$  ist das Hoppingintegral zwischen den Gitterplätzen  $\mathbf{R}_i$  und  $\mathbf{R}_j$  und  $\mu$  das chemische Potential.  $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$  ist der Besetzungszahloperator und  $U$  repräsentiert die Coulomb-Wechselwirkung, oder genauer deren on-site Matrixelement. Das Hubbard-Modell beschreibt das nicht-triviale Zusammenspiel von kinetischer Energie, Coulomb-Wechselwirkung, Pauli-Prinzip und Gitterstruktur. Modellparameter sind die Band-

---

besetzung  $n$ , die Temperatur  $T$ , die zugrundeliegende Gitterstruktur sowie die effektive Coulomb-Korrelation  $U/W$  ( $W$ : Bandbreite des Bloch-Bandes des wechselwirkungsfreien Systems). Die Vereinfachungen [54, 53, 57], die auf das Hubbard-Modell führen, können wie folgt zusammengefaßt werden: Zunächst geht man davon aus, daß die langreichweitigen Anteile der Coulomb-Wechselwirkung in den 3d-Bändern der Übergangsmetalle stark abgeschirmt sind, und somit das on-site Coulomb-Matrixelement alle weiteren Beiträge dominiert. Im Hubbard-Modell wird die Coulomb-Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen nur dann berücksichtigt, wenn diese sich am selben Gitterplatz befinden. Um das Modell möglichst einfach zu halten, wird zudem die Bandentartung vernachlässigt, d. h. man beschränkt sich auf nur ein Orbital pro Gitterplatz. Zwei Elektronen, die sich am selben Gitterplatz befinden und damit einen Wechselwirkungsprozess eingehen, haben dann wegen des Pauli-Prinzips notwendigerweise entgegengesetzten Spin. Trotz der starken Vereinfachungen, die auf das Hubbard-Modell führen, ist eine exakte Lösung für allgemeine Modellparameter bisher nicht gelungen. Eine Ausnahme stellt der eindimensionale Fall ( $D = 1$ ) dar, für den zum Beispiel die Grundzustandsenergie exakt berechnet werden kann [58]. Große Fortschritte beim Verständnis des Hubbard-Modells brachte die Erkenntnis, daß auch im entgegengesetzten Grenzfall unendlicher Dimensionen ( $D = \infty$ ) [59] exakte Aussagen mit Hilfe von numerischen Methoden möglich sind [60, 61, 62, 63, 64].

Das Hubbard-Modell wurde ursprünglich zur Untersuchung von Ferromagnetismus in Übergangsmetallen eingeführt und hat sich in der Zwischenzeit als ein Standard-Modell der Vielteilchenphysik zur Beschreibung stark korrelierter Elektronensysteme etabliert. Spontaner Ferromagnetismus im Hubbard-Modell ist vor allem für große Coulomb-Wechselwirkungen  $U > W$  zu erwarten: Aufgrund des Pauli-Prinzips reduziert eine ferromagnetische Ordnung die potentielle Energie des Gesamtsystems im Vergleich zum paramagnetischen Zustand, erhöht aber gleichzeitig die kinetische Energie. Während die Zunahme an kinetischer Energie stark von der Zustandsdichte des Systems und damit von der Gitterstruktur anhängt, wird der Gewinn an potentieller Energie durch eine möglichst große Coulomb-Wechselwirkung maximiert. Einige weitere Anwendungsbereiche des Hubbard-Modells seien hier nur kurz erwähnt: Man geht davon aus, daß in der Nähe des halbgefüllten Systems im allgemeinen ein antiferromagnetisch geordneter Grundzustand vorliegt. Die Néel-Temperatur steigt mit wachsender Coulomb-Wechselwirkung an, hat ein Maximum im Bereich  $U \approx W$  und fällt für große Wechselwirkungen proportional zu  $1/U$  ab. Dies läßt sich über eine Abbildung [57] des exakt halbgefüllten Hubbard-Modells für  $U \gg W$  auf ein effektives Heisenberg-Modell mit  $J_{ij} \sim -T_{ij}^2/U$  ( $J_{ij} < 0$ : antiferromagnetische Kopplung) verstehen. Ebenfalls bei Halfüllung wird der korrelationsinduzierte Metall-Isolator-Übergang sehr intensiv untersucht. Eine starke Coulomb-Wechselwirkung führt dazu, daß das ursprüngliche unkorrelierte Bloch-Band in zwei Subbänder aufspaltet. Für halbe Bandfüllung liegt das chemische Potential in der Bandlücke zwischen den Subbändern, und das System verhält sich wie ein Isolator („Mott-Hubbard-Isolator“), obwohl nach der gewöhnlichen Bandtheorie ein Metall zu erwarten wäre. Für  $U \approx W$  zeigt das System einen Metall-Isolator-Übergang [65, 66]. Insbesondere ist auch das Zusammenspiel von Metall-Isolator-Übergang und magnetischer Ordnung interessant. In den letzten

Jahren wird intensiv diskutiert, ob das Hubbard-Modell abseits halber Bandfüllung in der Lage ist, das komplexe Phasendiagramm der Hochtemperatur-Supraleiter zu erklären. Auch hier ist der Bereich moderater Coulomb-Wechselwirkung  $U \approx W$  relevant.

Wir sind in dieser Arbeit im wesentlichen an spontanem Ferromagnetismus im Hubbard-Modell interessiert. Wichtige exakte Aussagen bezüglich Ferromagnetismus im Hubbard-Modell stammen von Nagaoka [67]. Für dreidimensionale kubische Gitter und den Fall einer unendlich starken Coulomb-Wechselwirkung ( $U \rightarrow \infty$ ) hat Nagaoka für die speziellen Bandbesetzungen  $n_{\pm} = (N \pm 1)/N$  ( $N$ : Anzahl der Gitterplätze) die Stabilität von Ferromagnetismus untersucht. Für die bipartiten Gitter sc und bcc ist der voll polarisierte Zustand sowohl für  $n_-$  als auch für  $n_+$  stabil, im Fall des nicht-bipartiten fcc-Gitters nur für  $n_+$ . Hier deutet sich schon eine starke Abhängigkeit der magnetischen Stabilität von der Gitterstruktur an. Leider ist eine Verallgemeinerung des Nagaoka-Theorems auf endliche Bandbesetzungen im thermodynamischen Limes ( $N \rightarrow \infty$ ) bislang nicht gelungen. Eine große Zahl von Arbeiten haben sich seitdem mit der Frage nach der Stabilität ferromagnetischer Lösungen im Hubbard-Modell befaßt. Das magnetische Phasendiagramm im Grundzustand ( $T = 0$ ) wurde intensiv im Rahmen von Variationsrechnungen untersucht. Hier können Aussagen über die Stabilität des vollständig polarisierten Zustandes gegenüber Spin-Flip-Anregungen getroffen werden. Der Vergleich verschiedener Gitterstrukturen zeigt, daß Gitter mit einer stark asymmetrischen Zustandsdichte spontanen Ferromagnetismus bei  $T = 0$  begünstigen [68, 69, 70]. Um Ferromagnetismus und Korrelationseffekte in der elektronischen Struktur im Hubbard-Modell sowohl für  $T = 0$  als auch bei endlichen Temperaturen zu untersuchen, haben sich approximative analytische Theorien als sehr hilfreich erwiesen [71, 72, 73, 74, 75, 51]. Es ist wichtig, daß sich solche approximativen Theorien an möglichst vielen exakten Grenzfällen des Modells orientieren [51]. In letzter Zeit liefern zunehmend numerische Methoden einen wichtigen Beitrag in Bezug auf das magnetische Phasendiagramm des Hubbard-Modells. Mit Hilfe von Quanten-Monte-Carlo-Rechnungen (QMC) im Limes unendlich hoher Dimensionen hat Ulmke [76] als erster die Existenz ferromagnetischer Lösungen bei endlichen Temperaturen im Hubbard-Modell numerisch exakt nachgewiesen. Sowohl Rechnungen im Rahmen analytischer Theorien [73, 51] als auch QMC-Resultate [77, 76, 78] machen die Bedeutung der Gitterstruktur für die magnetische Stabilität bei endlichen Temperaturen deutlich. Auch hier erhöht eine stark asymmetrische Zustandsdichte mit einem großen spektralen Gewicht an einer der beiden Bandkanten die Stabilität ferromagnetischer Lösungen.

## 3. Ferromagnetismus im Hubbard-Modell

Dieses Kapitel behandelt das Hubbard-Modell ausschließlich für translations-symmetrische Systeme. Wir nehmen an, daß das zugrundeliegende Gitter ein Bravais-Gitter darstellt. Zudem schließen wir eine antiferromagnetische Ordnung aus, die eine Aufteilung des Bravais-Gitters in zwei äquivalente Untergitter erfordern würde, und beschränken uns auf die Behandlung von Paramagnetismus und Ferromagnetismus. Bei angenommener Translationsinvarianz läßt sich eine Fourier-Transformation zwischen Orts- und Impulsraum durchführen. Bei der Behandlung von Filmsystemen oder Systemen mit einer Oberfläche ist die Translationsinvarianz dagegen eingeschränkt. In Kapitel 4 wird das Hubbard-Modell auf Filmgeometrien verallgemeinert. Grundlegende Konzepte können dabei direkt aus dem translations-symmetrischen Fall übernommen werden. In diesem Sinne ist ein möglichst gutes Verständnis des translationssymmetrischen Hubbard-Modells wichtig und notwendig für die im Kapitel 4 diskutierte Theorie der Hubbard-Filme.

### 3.1. Das Vielteilchenproblem des Hubbard-Modells

Das Hubbard-Modell wurde im vorangegangenen Kapitel als ein Modell zur Beschreibung stark korrelierter Elektronen auf einem Gitter eingeführt. Zur besseren Übersicht sei das Hubbard-Modell (2.3) hier noch einmal angegeben:

$$\mathcal{H} = \sum_{ij\sigma} (T_{ij} - \mu\delta_{ij}) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma}. \quad (3.1)$$

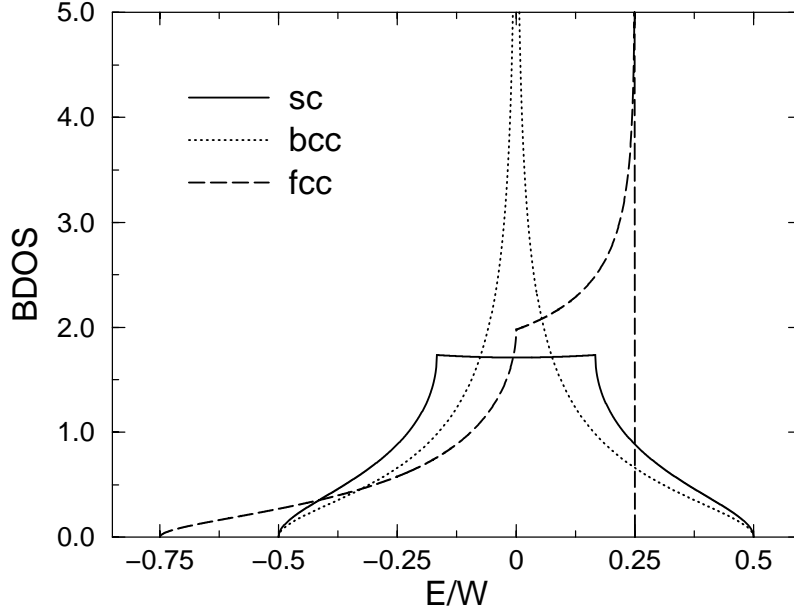
In diesem Abschnitt werden einige grundlegende Elemente der Vielteilchentheorie, die im folgenden von Bedeutung sind, dargestellt.

**Der kinetische Anteil.** Der kinetische Anteil des Hubbard-Modells ist exakt lösbar und läßt sich durch eine Fourier-Transformation in den Impulsraum diagonalisieren:

$$\sum_{ij\sigma} (T_{ij} - \mu\delta_{ij}) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (3.2)$$

Über die Bloch-Dispersion

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \sum_{ij} T_{ij} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \quad (3.3)$$



**Abbildung 3.1.:** Bloch-Zustandsdichte  $\rho_0(E)$  (BDOS) der drei kubischen Gitter sc, bcc und fcc als Funktion der Energie  $E$  [79].  $W$  gibt die Bandbreite des Bloch-Bandes an. Der Schwerpunkt des Blochbandes ist  $T_0 = 0$ .

ist die Zustandsdichte  $\rho_0(E)$  des wechselwirkungsfreien Systems (BDOS: *Bloch density of states*) gegeben:

$$\rho_0(E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - \varepsilon(\mathbf{k})). \quad (3.4)$$

Die Summe läuft dabei über alle Wellenvektoren  $\mathbf{k}$  der ersten Brillouin-Zone und  $N$  ist die Gesamtzahl der Gitterplätze im System. Den Schwerpunkt des Blochbandes bezeichnen wir im folgenden mit

$$T_0 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE E \rho_0(E) = T_{ii}. \quad (3.5)$$

Üblicherweise beschränkt man sich im Hubbard-Modell auf Hopping nur zwischen benachbarten Gitterplätzen. Das entsprechende Hoppingmatrixelement wird mit  $t$  bezeichnet. Eine Erweiterung auf längerreichweitiges Hopping ist aber im allgemeinen ohne Schwierigkeiten möglich. Für die drei kubischen Gitterstrukturen sc, bcc und fcc sind die BDOS nach Jelitto [79] in Abbildung 3.1 gezeigt.

Die Bandbreite  $W$  des Bloch-Bandes bestimmt die Energieskala des Systems. Die effektive Stärke der Coulomb-Wechselwirkung ist durch das Verhältnis  $U/W$  bestimmt. Bei festgehaltener effektiver Korrelation  $U/W$  skalieren alle Energiegrößen mit der Bandbreite  $W$  der BDOS.

**Green-Funktion, Selbstenergie und Spektraldichte.** Die zentrale Größe, die es zu bestimmen gilt, ist die *retardierte Ein-Teilchen-Green-Funktion* [57] des Systems:

$$G_{ij\sigma}(E) = \langle\langle c_{i\sigma}; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E = -i \int_0^{+\infty} dt e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \langle [c_{i\sigma}(t), c_{j\sigma}^\dagger(0)]_+ \rangle, \quad (3.6)$$

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \langle\langle c_{\mathbf{k}\sigma}; c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E = \frac{1}{N} \sum_{ij} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} G_{ij\sigma}(E). \quad (3.7)$$

Hier bezeichnet  $[\dots]_{(+)-}$  den (Anti-) Kommutator und  $\langle \dots \rangle$  den großkanonischen Erwartungswert. Die Bewegungsgleichung der Green-Funktion für das Hubbard-Modell (3.1) lautet:

$$EG_{ij\sigma}(E) = \hbar \langle [c_{i\sigma}, c_{j\sigma}^\dagger]_+ \rangle + \langle\langle [c_{i\sigma}, \mathcal{H}]_-; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned} &= \hbar \delta_{ij} + \sum_m (T_{im} - \mu \delta_{im}) G_{mj\sigma}(E) \\ &\quad + \langle\langle [c_{i\sigma}, \frac{1}{2}U \sum_{m\sigma'} n_{m\sigma'} n_{m-\sigma'}]_-; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Der letzte Term in (3.9) stellt eine *höhere* Green-Funktion dar, die im allgemeinen unbekannt ist. Durch Einführen der *elektronischen Selbstenergie*  $\Sigma_{ij\sigma}(E)$ ,

$$\langle\langle [c_{i\sigma}, \frac{1}{2}U \sum_{m\sigma'} n_{m\sigma'} n_{m-\sigma'}]_-; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E = U \langle\langle c_{i\sigma} n_{i-\sigma}; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E \quad (3.10)$$

$$\equiv \sum_m \Sigma_{im\sigma}(E) G_{mj\sigma}(E), \quad (3.11)$$

erhält man eine geschlossene Form für die Bewegungsgleichung (3.9):

$$\sum_m [(E + \mu)\delta_{im} - T_{im} - \Sigma_{im\sigma}(E)] G_{mj\sigma}(E) = \hbar \delta_{ij}. \quad (3.12)$$

Über eine Fourier-Transformation läßt sich sofort die die formale Lösung

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{\hbar}{E - (\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu) - \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E)} \quad (3.13)$$

angeben. Die elektronische Selbstenergie ist im allgemeinen eine komplexwertige Funktion der Energie,

$$\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E) = R_{\mathbf{k}\sigma}(E) + iI_{\mathbf{k}\sigma}(E), \quad (3.14)$$

und beinhaltet den gesamten Einfluß der Zwei-Teilchen-Wechselwirkung des Hubbard-Modells.

Bei Kenntnis der Green-Funktion können alle relevanten Ein-Teilchen-Größen des Systems berechnet werden. So ist zum Beispiel die *Spektraldichte*  $S_{\mathbf{k}\sigma}(E)$ , die

im Gegensatz zur Green-Funktion direkt im Experiment beobachtbar ist, gegeben durch:

$$S_{\mathbf{k}\sigma}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\mathbf{k}\sigma}(E + i0^+) \quad (3.15)$$

$$= -\frac{\hbar}{\pi} \frac{I_{\mathbf{k}\sigma}(E)}{(E + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - R_{\mathbf{k}\sigma}(E))^2 + I_{\mathbf{k}\sigma}^2(E)}. \quad (3.16)$$

Die Spektraldichte gibt die „nackte“ Linienform eines winkel- und spinaufgelösten (direkten, indirekten) Photoemissions-Experiments an. Dargestellt durch den Real- und Imaginärteil der Selbstenergie hat die Spektraldichte formal die Gestalt einer Lorentz-Funktion. Ausgeprägte Peaks der Spektraldichte werden mit Quasiteilchen identifiziert. Die Breite der Peaks ist im wesentlichen durch den Imaginärteil der Selbstenergie bestimmt und stellt ein Maß für die Lebensdauer der Quasiteilchen dar. Für verschwindenden Imaginärteil der Selbstenergie gehen die Lorentz-artigen Quasiteilchenpeaks zu  $\delta$ -Funktionen an den entsprechenden Quasiteilchenenergien über. Die Quasiteilchen haben dann eine unendlich lange Lebensdauer. Bei Kenntnis der Spektraldichte läßt sich über die Spektraldarstellung

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{S_{\mathbf{k}\sigma}(\omega)}{E - \omega + i0^+} d\omega \quad (3.17)$$

wiederum die Green-Funktion berechnen. Die Green-Funktion  $G_{\mathbf{k}\sigma}(E)$ , die elektronische Selbstenergie  $\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E)$  und die Spektraldichte  $S_{\mathbf{k}\sigma}(E)$  sind in Bezug auf ihren Informationsgehalt somit vollständig äquivalent.

Durch Summation über alle Wellenvektoren der ersten Brillouin-Zone erhält man aus der Spektraldichte die *Quasiteilchenzustandsdichte* (QDOS: *quasiparticle density of states*):

$$\rho_{\sigma}(E) = \frac{1}{N\hbar} \sum_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k}\sigma}(E - \mu) = -\frac{1}{\pi\hbar} \text{Im} G_{ii\sigma}(E - \mu). \quad (3.18)$$

$G_{ii\sigma}(E) = (1/N) \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}\sigma}(E)$  werden wir im weiteren als die *lokale* Green-Funktion bezeichnen. Mit Hilfe der QDOS sind über das Spektraltheorem die spinabhängigen Bandbesetzungen  $n_{\sigma}$  und die Magnetisierung  $m$  direkt zugänglich:

$$n_{\sigma} = \langle n_{i\sigma} \rangle = \frac{1}{N\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_{-}(E) S_{\mathbf{k}\sigma}(E - \mu) \quad (3.19)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_{-}(E) \rho_{\sigma}(E), \quad (3.20)$$

$$m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}. \quad (3.21)$$

Dabei ist  $f_{-}(E) = [\exp(\beta(E - \mu)) + 1]^{-1}$  die Fermi-Funktion. Aufgrund der angenommenen Translationsinvarianz können wir bei den Erwartungswerten  $n_{\sigma}$  und  $m$  den Gitterindex  $i$  weglassen. Die totale Bandbesetzung ist  $n = n_{\uparrow} + n_{\downarrow}$ .

**Innere Energie, freie Energie.** Die *innere Energie*  $E_0$  des Systems ist über den Erwartungswert des Hamilton-Operators gegeben:

$$E_0(T) = \frac{\langle H \rangle}{N} = E_{\text{kin}}(T) + E_{\text{pot}}(T). \quad (3.22)$$

Der kinetische Anteil  $E_{\text{kin}}$  kann leicht mit Hilfe der Korrelationsfunktion

$$\langle c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle = \frac{1}{N\hbar} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_-(E) S_{\mathbf{k}\sigma}(E - \mu) \quad (3.23)$$

berechnet werden. (3.23) folgt direkt aus (3.7) über das Spektraltheorem. Zur Bestimmung von  $E_{\text{pot}}$  benötigen wir den Erwartungswert  $\langle n_{i\sigma} n_{i-\sigma} \rangle$ . Dieser läßt sich aus der höheren Green-Funktion  $\langle\langle c_{i\sigma} n_{i-\sigma}; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E$ , die in der Bewegungsgleichung (3.9) der Green-Funktion  $G_{ij\sigma}(E)$  auftritt, berechnen. Mit dem Spektraltheorem sowie (3.9), (3.10) und (3.15) erhält man:

$$\begin{aligned} \langle c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} n_{i-\sigma} \rangle &= \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_-(E + \mu) \left(-\frac{1}{\pi}\right) \text{Im} \langle\langle c_{i\sigma} n_{i-\sigma}; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E \\ &= -\frac{1}{U\hbar} \frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_m \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_-(E + \mu) [(E + \mu)\delta_{im} - T_{im}] G_{mj\sigma}(E) \\ &= \frac{1}{UN\hbar} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_-(E) [E - \varepsilon(\mathbf{k})] S_{\mathbf{k}\sigma}(E - \mu). \end{aligned} \quad (3.24)$$

Für die innere Energie  $E_0$  folgt dann aus (3.23) und (3.24):

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{N\hbar} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_-(E) \varepsilon(\mathbf{k}) S_{\mathbf{k}\sigma}(E - \mu), \quad (3.25)$$

$$E_{\text{pot}} = \frac{1}{2N\hbar} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_-(E) [E - \varepsilon(\mathbf{k})] S_{\mathbf{k}\sigma}(E - \mu), \quad (3.26)$$

$$E_0 = \frac{1}{2N\hbar} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_-(E) [E + \varepsilon(\mathbf{k})] S_{\mathbf{k}\sigma}(E - \mu). \quad (3.27)$$

Ist die Selbstenergie lokal, d. h.  $\Sigma_{ij\sigma}(E) = \delta_{ij} \Sigma_{\sigma}(E)$ , so läßt sich die explizite  $\mathbf{k}$ -Summation in (3.25)-(3.27) vermeiden. Unter Verwendung der Bewegungsgleichung (3.12) kann man zum Beispiel (3.27) für eine lokale Selbstenergie wie folgt umformen<sup>1</sup>:

$$E_0 = -\frac{1}{\pi\hbar} \text{Im} \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_-(E) \left[ \left(E - \frac{1}{2} \Sigma_{\sigma}(E - \mu)\right) G_{ii\sigma}(E - \mu) - \hbar \right]. \quad (3.28)$$

<sup>1</sup> Zur Bestimmung der lokalen Green-Funktion  $G_{ii\sigma}(E)$  muß natürlich weiterhin eine  $\mathbf{k}$ -Summation durchgeführt werden.

Bei Kenntnis der inneren Energie  $E_0$  für alle Temperaturen  $T' < T$  erhält man unter Ausnutzung des dritten Hauptsatzes der Thermodynamik schließlich die *freie Energie*  $F(T)$  des Systems [57]:

$$F(T) = E_0(0) - T \int_0^T dT' \frac{E_0(T') - E_0(0)}{T'^2}. \quad (3.29)$$

Über die freie Energie  $F$  erhält man Anschluß an die gesamte Gleichgewichts-Thermodynamik.

Das Vielteilchenproblem des Hubbard-Modells ist im allgemeinen nicht exakt lösbar. In den folgenden Kapiteln 3.2 - 3.5 werden wir einige exakte Aussagen und wichtige nicht-triviale Grenzfälle kennenlernen, die einen ersten Einblick in die Physik des Hubbard-Modells erlauben. Auf der Basis dieser Resultate werden wir in Kapitel 3.6 verschiedene approximative Lösungsmethoden für das Hubbard-Modell diskutieren.

## 3.2. Die exakten Summenregeln der Momente

Über die Momente der Spektraldichte lassen sich rigorose Summenregeln formulieren, die starke globale Bedingungen an Näherungslösungen für das Hubbard-Modell stellen. Wir werden sehen (Kap. 3.4), daß die Einhaltung der Summenregeln zum Beispiel für ein qualitativ korrektes Verhalten einer approximativen Theorie im Limes starker Coulomb-Wechselwirkung wichtig ist.

**Momente der Spektraldichte.** Die Momente der Spektraldichte sind folgendermaßen definiert:

$$M_{\mathbf{k}\sigma}^{(m)} = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE E^m S_{\mathbf{k}\sigma}(E) \quad (m = 0, 1, 2, \dots). \quad (3.30)$$

Die Bedeutung der Momente  $M_{\mathbf{k}\sigma}^{(m)}$  für das folgende resultiert aus der Tatsache, daß für sie neben (3.30) noch eine weitere Darstellung existiert, in der sich die Momente allein mit Hilfe des Hamilton-Operators berechnen lassen. Unter Verwendung der Heisenberg-Darstellung der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren findet man [57]:

$$M_{\mathbf{k}\sigma}^{(m)} = \frac{1}{N} \sum_{ij} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \left\langle \left[ \underbrace{[\dots [c_{i\sigma}, \mathcal{H}]_{-}, \dots, \mathcal{H}]_{-}}_{m\text{-mal}}, c_{j\sigma}^{\dagger} \right]_{+} \right\rangle. \quad (3.31)$$

Die Gleichungen (3.30) und (3.31) stellen exakte Summenregeln für die Spektraldichte dar und sind somit ein wichtiges Hilfsmittel bei der Konstruktion approximativer Lösungen in der Vielteilchentheorie. Im Prinzip können mit (3.31) die Momente  $M_{\mathbf{k}\sigma}^{(m)}$  bis zu beliebiger Ordnung  $m$  berechnet werden. Allerdings enthalten die

Momente für große  $m$  in zunehmenden Maße komplizierte höhere Erwartungswerte. Es ist klar, daß die Summenregeln nur dann von praktischen Nutzen sind, wenn sich diese höheren Erwartungswerte mit Hilfe „bekannter“ Größen (Green-Funktion, Selbstenergie oder Spektraldichte) berechnen lassen. Für das Hubbard-Modell gilt dies für die ersten vier Momente ( $m = 0 - 3$ ):

$$M_{\mathbf{k}\sigma}^{(0)} = 1, \quad (3.32)$$

$$M_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)} = \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu + Un_{-\sigma}, \quad (3.33)$$

$$M_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)} = [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu]^2 + 2Un_{-\sigma}[\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu] + U^2n_{-\sigma}, \quad (3.34)$$

$$M_{\mathbf{k}\sigma}^{(3)} = [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu]^3 + 3Un_{-\sigma}[\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu]^2 + U^2n_{-\sigma}(2 + n_{-\sigma})[\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu] + U^2n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})(B_{\mathbf{k}-\sigma} - \mu) + U^3n_{-\sigma}. \quad (3.35)$$

Man beachte, daß im vierten Moment  $M_{\mathbf{k}\sigma}^{(3)}$  ein Korrekturterm  $B_{\mathbf{k}-\sigma}$  auftritt, der aus höheren Korrelationsfunktionen aufgebaut ist. Der Korrekturterm ist abhängig von der Bandbesetzung  $n_{-\sigma}$ , vom Wellenvektor  $\mathbf{k}$  und implizit auch von der Temperatur  $T$ .  $B_{\mathbf{k}-\sigma}$  läßt sich aufspalten in einen lokalen Term  $B_{-\sigma}$ , der sogenannten *Bandverschiebung*, und in einen nichtlokalen Term  $F_{\mathbf{k}-\sigma}$ , der als *Bandbreitenkorrektur* bezeichnet wird:

$$B_{\mathbf{k}-\sigma} = B_{-\sigma} + F_{\mathbf{k}-\sigma}, \quad (3.36)$$

$$B_{-\sigma} = T_0 + \frac{1}{n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})} \frac{1}{N} \sum_{ij}^{i \neq j} T_{ij} \langle c_{i-\sigma}^\dagger c_{j-\sigma} (2n_{i\sigma} - 1) \rangle, \quad (3.37)$$

$$F_{\mathbf{k}-\sigma} = \frac{1}{n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})} \frac{1}{N} \sum_{ij}^{i \neq j} T_{ij} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \left[ \langle n_{i-\sigma} n_{j-\sigma} \rangle - n_{-\sigma}^2 - \langle c_{j\sigma}^\dagger c_{j-\sigma}^\dagger c_{i-\sigma} c_{i\sigma} \rangle - \langle c_{j\sigma}^\dagger c_{i-\sigma}^\dagger c_{j-\sigma} c_{i\sigma} \rangle \right]. \quad (3.38)$$

Die Bedeutung von  $B_{-\sigma}$  und  $F_{\mathbf{k}-\sigma}$  werden wir in Kapitel 3.4 diskutieren. Alle lokalen Beiträge sind in der Bandverschiebung  $B_{-\sigma}$  enthalten. Insbesondere gilt für die Bandbreitenkorrektur:

$$\sum_{\mathbf{k}} F_{\mathbf{k}-\sigma} = 0. \quad (3.39)$$

Obwohl in der Bandverschiebung (3.37) höhere Korrelationsfunktionen auftreten, läßt sie sich exakt mit Hilfe der Spektraldichte  $S_{\mathbf{k}\sigma}(E)$  berechnen. Bei der Bestimmung der Bandbreitenkorrektur (3.38) ist man dagegen auf zusätzliche Annahmen angewiesen (vgl. Kap. 3.6.1). Mit Hilfe der Korrelationsfunktionen (3.23) und (3.24) ergibt sich der folgende exakte Ausdruck für die Bandverschiebung (vgl. auch [71, 72]):

$$B_{-\sigma} - T_0 = \frac{1}{n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})} \frac{1}{N\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_{-}(E) (\varepsilon(\mathbf{k}) - T_0) \times \left[ \frac{2}{U} [E - \varepsilon(\mathbf{k})] - 1 \right] S_{\mathbf{k}-\sigma}(E - \mu). \quad (3.40)$$

Im Fall einer lokalen Selbstenergie ( $\Sigma_{ij\sigma}(E) = \delta_{ij}\Sigma_{\sigma}(E)$ ) läßt sich in (3.40) – analog zur inneren Energie  $E_0$  – die  $\mathbf{k}$ -Summation komplett auf die lokale Green-Funktion  $G_{ii\sigma}(E)$  übertragen:

$$B_{\sigma} - T_0 = -\frac{1}{\pi} \frac{1}{n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})} \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_{-}(E + \mu) \left( \frac{2}{U} \Sigma_{\sigma} - 1 \right) \times \left[ (E + \mu - T_0 - \Sigma_{\sigma}) \frac{1}{\hbar} G_{ii\sigma} - 1 \right]. \quad (3.41)$$

Will man die Summenregeln (3.30), (3.31) für eine approximative Theorie überprüfen, so müssen die Energieintegrationen in (3.30) explizit durchgeführt werden. Dies kann im konkreten Fall unpraktisch sein. Wir werden im folgenden zeigen, daß die Summenregeln auch anhand der Hochenergieentwicklung der Green-Funktion oder der Selbstenergie kontrolliert werden können.

**Die Hochenergieentwicklung der Green-Funktion und der Selbstenergie.** Wir wollen zunächst die Hochenergieentwicklung der Green-Funktion  $G_{\mathbf{k}\sigma}(E)$  angeben. Ausgangspunkt ist die Spektraldarstellung der Green-Funktion (3.17). Für große Energien läßt sich der Nenner in (3.17) nach Potenzen von  $1/E$  entwickeln:

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{E^{m+1}} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega^m S_{\mathbf{k}\sigma}(\omega) d\omega = \hbar \sum_{m=0}^{\infty} \frac{M_{\mathbf{k}\sigma}^{(m)}}{E^{m+1}}. \quad (3.42)$$

Die Hochenergieentwicklung ist natürlich nur für solche Energien sinnvoll, für die die Reihe (3.42) konvergiert. Wir stellen fest, daß die Hochenergiekoeffizienten der Green-Funktion gerade durch die Momente der Spektraldichte (3.30) gegeben sind. Für sehr große Energien verschwindet die Green-Funktion wegen  $M_{\mathbf{k}\sigma}^{(0)} = 1$  wie  $1/E$ .

Analog zur Green-Funktion läßt sich auch die Selbstenergie  $\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E)$  für große Energien nach  $1/E$  entwickeln:

$$\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \hbar \sum_{m=0}^{\infty} \frac{C_{\mathbf{k}\sigma}^{(m)}}{E^m}. \quad (3.43)$$

Die Koeffizienten  $C_{\mathbf{k}\sigma}^{(m)}$  ergeben sich direkt durch Einsetzen von (3.43) in die Darstellung (3.13) der Green-Funktion und einem anschließenden Vergleich mit (3.42), (3.32)-(3.35):

$$C_{\mathbf{k}\sigma}^{(0)} = U n_{-\sigma}, \quad (3.44)$$

$$C_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)} = U^2 n_{-\sigma} (1 - n_{-\sigma}), \quad (3.45)$$

$$C_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)} = U^2 n_{-\sigma} (1 - n_{-\sigma}) \left( B_{\mathbf{k}-\sigma} - \mu + U(1 - n_{-\sigma}) \right). \quad (3.46)$$

Die Hochenergieentwicklungen der Green-Funktion ((3.42) mit (3.32)-(3.35)) und der Selbstenergie ((3.43) mit (3.44)-(3.46)) sind vollständig äquivalent. Dabei ist zu

beachten, daß die ersten vier Terme der Hochenergieentwicklung der Green-Funktion den ersten drei Termen der Entwicklung der Selbstenergie entsprechen<sup>2</sup>. Insbesondere eröffnen die Hochenergieentwicklungen die Möglichkeit, die Summenregeln (3.30) und (3.31) unabhängig von der Energieintegration in (3.30) zu überprüfen.

### 3.3. Der Limes schwacher Korrelation

Für kleine Wechselwirkungen  $U \ll W$  sind im Rahmen der Störungstheorie in  $U$  exakte Aussagen für das Hubbard-Modell möglich. Für das folgende ist die Störungstheorie erster und zweiter Ordnung von Bedeutung.

#### 3.3.1. Das Hubbard-Modell in der Hartree-Fock-Näherung

Der Term erster Ordnung der Störungsentwicklung für die elektronische Selbstenergie entspricht der Hartree-Fock-Selbstenergie (HF)<sup>3</sup>:

$$\Sigma_{\sigma}^{(\text{HF})} = U \langle n_{i-\sigma} \rangle = U n_{-\sigma}. \quad (3.47)$$

Die HF-Selbstenergie ist reell, lokal und energieunabhängig. Qualitativ korrekte Aussagen können im Rahmen von HF nur für sehr kleine Wechselwirkungen erwartet werden. Man erhält das Ergebnis (3.47) am einfachsten durch eine HF-Entkopplung („Linearisierung“) der Zwei-Teilchen-Wechselwirkung des Hubbard-Modells

$$\begin{aligned} n_{i\sigma} n_{i-\sigma} &\xrightarrow{\text{HF}} n_{i\sigma} \langle n_{i-\sigma} \rangle + \langle n_{i\sigma} \rangle n_{i-\sigma} - \langle n_{i\sigma} \rangle \langle n_{i-\sigma} \rangle \\ &= n_{-\sigma} n_{i\sigma} + n_{\sigma} n_{i-\sigma} - n_{\sigma} n_{-\sigma}, \end{aligned} \quad (3.48)$$

wodurch das Produkt der Fluktuationen um die jeweiligen Erwartungswerte vernachlässigt wird. Das Hubbard-Modell wird durch die Entkopplung (3.48) auf einen effektiven Ein-Teilchen-Operator,

$$\mathcal{H}_{\text{HF}} = \sum_{ij\sigma} (T_{ij} + \delta_{ij}(U n_{-\sigma} - \mu)) c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma}, \quad (3.49)$$

reduziert, der exakt gelöst werden kann. Das Modell (3.49) wird auch als *Stoner-Modell* bezeichnet.

In Bezug auf Magnetismus hat die HF-Selbstenergie bzw. das Stoner-Modell aus zwei Gründen einen hohen Bekanntheitsgrad erlangt. Zum einen liefert das Modell (3.49) auf eine einfache und leicht verständliche Art spontanen Magnetismus in einem Bandmodell itineranter Elektronen. Unter gewissen Voraussetzungen sind sogar analytische Aussagen über wichtige magnetische Kenngrößen möglich (vgl.

<sup>2</sup>Denn (3.43) impliziert, daß die Selbstenergie für große Energien beschränkt ist. Dies sorgt automatisch für die Normierung der Spektraldichte, also für  $M_{\mathbf{k}\sigma}^{(0)} = 1$ . Dies sieht man z. B. durch Einsetzen von (3.43) in (3.13).

<sup>3</sup> Genaugenommen verschwindet der Fock-Term aufgrund der Lokalität der Wechselwirkung im Hubbard-Modell. Die Selbstenergie (3.47) wird im weiteren trotzdem als Hartree-Fock-Selbstenergie bezeichnet.

z. B. [53]). Der zweite Grund liegt darin, daß Realstrukturrechnungen mittels DFT-LDA (DFT-LDA: Dichtefunktionaltheorie in der Lokalen-Dichte-Näherung) den Beitrag der Coulomb-Wechselwirkung im wesentlichen auf dem Niveau von HF berücksichtigen. Die magnetischen Eigenschaften der DFT-LDA-Realstrukturrechnungen basieren daher auf dem sogenannten *Stoner-Bild* des Bandmagnetismus.

Wir wollen die magnetischen Eigenschaften des Hubbard-Modells im Rahmen von HF hier nur kurz skizzieren<sup>4</sup>. Die Selbstenergie (3.47) führt bei eingeschalteter Wechselwirkung zunächst lediglich zu einer starren Verschiebung des Spektrums. Ab einer kritischen Wechselwirkungsstärke stellt sich ein ferromagnetischer Grundzustand ein. Die kritische Wechselwirkungsstärke kann analytisch abgeschätzt werden [53]. Das bekannte *Stoner-Kriterium* besagt, daß für  $T = 0$  spontaner Ferromagnetismus stabil ist, falls  $U\rho_0(\epsilon_F) > 1$  gilt. Dabei bezeichnet  $\epsilon_F$  die Fermi-Energie des wechselwirkungsfreien Systems. Für die Stabilität spontaner ferromagnetischer Ordnung ist also nur eine schmale BDOS mit einem hohen Wert an der Fermikante wichtig. Sonstige Einflüsse der Gitterstruktur sind irrelevant. Im Falle ferromagnetischer Ordnung ergibt sich eine wellenvektorunabhängige Spinaufspaltung  $\Delta E_{\text{ex}} = 2mU$  zwischen Majoritäts- und Minoritätsspektrum. Mit steigender Temperatur nimmt die Spinaufspaltung kontinuierlich ab. Die Curie-Temperatur ist im allgemeinen sehr groß und skaliert für nicht zu kleine Wechselwirkungen mit  $U$ . Insgesamt wird der magnetische Bereich im Phasendiagramm im Rahmen von HF deutlich überschätzt.

Es soll noch einmal betont werden, daß die HF-Selbstenergie nur für kleine  $U$  motiviert ist, spontaner Ferromagnetismus dagegen ein Phänomen mittlerer bis starker Wechselwirkung darstellt. Diese Diskrepanz kann zu qualitativ falschen Aussagen führen. Die Grenzen des Stoner-Bildes für Bandmagnetismus aufzuzeigen ist daher ein zentrales Anliegen der Theorie stark korrelierter Elektronensysteme. Dies ist insbesondere im Hinblick auf eine mögliche Verbesserung bestehender Realstrukturrechnungen sowie deren Erweiterung auf endliche Temperaturen (siehe z. B. [81]) wichtig.

### 3.3.2. Die Störungstheorie zweiter Ordnung

Der Term zweiter Ordnung der Störungsentwicklung in  $U$  liefert einen weitaus komplexeren Beitrag zur Selbstenergie. Wir benötigen im weiteren nur den lokalen Beitrag zweiter Ordnung der Selbstenergie (vgl. auch Kap. 3.5). Dieser wird in den Kapiteln 3.6.3 und 3.6.4 zur Konstruktion interpolativer Näherungslösungen für das Hubbard-Modell verwendet. Bis zur Ordnung  $U^2$  ist die Selbstenergie des Hubbard-Modells in der lokalen Näherung gegeben durch:

$$\Sigma_{\sigma}^{(\text{SOPT})}(E) = Un_{-\sigma} + \Sigma_{\sigma}^{(\text{SOC})}(E). \quad (3.50)$$

Der erste Term ist die Hartree-Fock-Selbstenergie. Der lokale Beitrag zur zweiten Ordnung der Störungstheorie lautet [82, 83, 84, 51]:

$$\begin{aligned} \Sigma_{\sigma}^{(\text{SOC})}(E) = & \frac{U^2}{\hbar^3} \iiint \frac{\rho_{\sigma}^{(1)}(x)\rho_{-\sigma}^{(1)}(y)\rho_{-\sigma}^{(1)}(z)}{E + \mu - x + y - z} \\ & \times [f_{-}(x)f_{-}(-y)f_{-}(z) + f_{-}(-x)f_{-}(y)f_{-}(-z)] dx dy dz. \end{aligned} \quad (3.51)$$

---

<sup>4</sup>Für eine ausführliche Diskussion siehe z. B. [53, 80].

Der Selbstenergiebeitrag  $\Sigma_\sigma^{(\text{SOC})}(E)$  ist im allgemeinen eine komplexe Funktion der Energie. In (3.51) entspricht  $\rho_\sigma^{(1)}(E)$  im wesentlichen der Zustandsdichte des wechselwirkungsfreien Systems. Im Hinblick auf Kapitel 3.6.3 ist es sinnvoll,  $\rho_\sigma^{(1)}(E)$  etwas allgemeiner zu definieren:

$$\begin{aligned}\rho_\sigma^{(1)}(E) &= \rho_0(E - E_\sigma) \\ &= -\frac{1}{\pi\hbar} \text{Im} G_{ii\sigma}^{(1)}(E - \mu) \\ &= -\frac{1}{\pi\hbar} \text{Im} G_{ii\sigma}^{(U=0)}(E - \mu - E_\sigma).\end{aligned}\tag{3.52}$$

Die spinabhängigen Konstanten  $E_\sigma$  sind zunächst noch unbestimmt. Mit  $E_\sigma = 0$  erhält man die konventionelle Störungstheorie 2. Ordnung. Setzt man  $E_\sigma = Un_{-\sigma}$ , so ergibt sich die Störungstheorie 2. Ordnung um das Hartree-Fock-Niveau (SOPT-HF). Beide Versionen der Störungstheorie sind bis zur Ordnung  $U^2$  identisch. Im Gegensatz zur konventionellen Störungstheorie finden Bulk und Jelitto [82] im Rahmen der SOPT-HF spontane ferromagnetische Lösungen. Der magnetische Bereich ist gegenüber der HF-Lösung deutlich eingeschränkt.

Luttinger [85] hat für beliebige Ordnung der Störungstheorie gezeigt, daß für  $T = 0$  der Imaginärteil der Selbstenergie an der Fermi-Kante quadratisch verschwindet („Fermi-Flüssigkeitsverhalten“). Das Luttinger-Theorem [86] besagt darüberhinaus, daß das Volumen innerhalb der Fermifläche ( $T = 0$ ), analog zum wechselwirkungsfreien System, durch die Gesamtteilchenzahl  $n$  gegeben ist. Insbesondere bleibt daher das Fermi-Volumen durch Einschalten der Wechselwirkung unverändert. Das Fermi-Flüssigkeitsverhalten und das Luttinger-Theorem gelten für alle Wechselwirkungen, für die die Störungsentwicklung konvergiert.

### 3.4. Der Limes starker Korrelation

Spontaner Ferromagnetismus im Hubbard-Modell ist sicherlich nur für moderate bis starke Coulomb-Wechselwirkung zu erwarten. In diesem Abschnitt werden einige exakte Aussagen von Harris und Lange [52] im Limes starker Korrelation erklärt und bezüglich ihrer Bedeutung für spontanen Magnetismus diskutiert.

**Der Grenzfall des unendlich schmalen Bandes.** Ein einfacher, aber dennoch instruktiver Grenzfall des Hubbard-Modells ist der Limes des unendlich schmalen Bandes:

$$W \rightarrow 0; \quad T_{ij} \rightarrow T_0\delta_{ij}; \quad \varepsilon(\mathbf{k}) \rightarrow T_0 \quad \forall \mathbf{k}.\tag{3.53}$$

Im Gedankenexperiment ist dieser Grenzfall zum Beispiel vorstellbar durch unendlich weit auseinanderliegende Atome ( $a \rightarrow \infty$ ;  $a$ : Gitterkonstante). Die Elektronen können nicht zwischen den Gitterplätzen hüpfen und das Leitungsband reduziert sich auf ein  $N$ -fach entartetes Niveau  $T_0$ . In diesem Grenzfall ist das Modell exakt

lösbar. Die Spektraldichte, die die Anregungsenergien des Systems angibt, hat eine Zweipolstruktur [52]:

$$S_{\mathbf{k}\sigma}^{(W=0)}(E) = \hbar(1 - n_{-\sigma})\delta(E + \mu - T_0) + \hbar n_{-\sigma}\delta(E + \mu - T_0 - U). \quad (3.54)$$

Das ursprüngliche Niveau  $T_0$  des wechselwirkungsfreien Systems spaltet aufgrund der Coulomb-Wechselwirkung in zwei spinunabhängige Quasiteilchenniveaus bei  $T_0$  und  $T_0 + U$  auf. Die Gewichte  $(1 - n_{-\sigma})$  und  $n_{-\sigma}$  der beiden Pole der Spektraldichte entsprechen der Wahrscheinlichkeit, daß ein  $\sigma$ -Elektron einen leeren oder bereits von einem  $(-\sigma)$ -Elektron einfach besetzten Gitterplatz antrifft. Äquivalent zu der Spektraldichte (3.54) ist die Selbstenergie:

$$\Sigma_{\sigma}^{(W=0)}(E) = Un_{-\sigma} \frac{E + \mu - T_0}{E + \mu - T_0 - U(1 - n_{-\sigma})}. \quad (3.55)$$

Die Selbstenergie im Grenzfall  $W = 0$  ist eine reelle Einpolfunktion.

Eine Auswertung von (3.54) bezüglich der Bandbesetzung  $n_{\sigma}$  liefert immer  $n_{\uparrow} = n_{\downarrow} = n/2$ , d. h. im hier betrachteten Grenzfall  $W = 0$  ist spontaner Magnetismus ausgeschlossen. Dies ist auch nicht verwunderlich, da spontaner Magnetismus ein kollektives Phänomen darstellt, im Grenzfall des unendlich schmalen Bandes aber gerade die Kopplung zwischen den Gitterplätzen ausgeschaltet ist. Die Frage ist nun, wie sich das System bei einer endlichen, aber im Vergleich zur Coulomb-Wechselwirkung kleinen Hoppingwahrscheinlichkeit ( $U \gg W$ ) verhält. Wir werden sehen, daß im Limes starker Korrelation mit Hilfe einer Störungstheorie in  $W/U$  nicht-triviale, exakte Aussagen über die Spektraldichte – zumindest über deren grobe Struktur – getroffen werden können.

**Die Ergebnisse von Harris und Lange im Limes starker Korrelation.** Harris und Lange [52] geben eine erste nicht-triviale Korrektur zum Grenzfall des unendlich schmalen Bandes an. Für  $W = 0$  ist die Zahl der Doppelbesetzungen eine Konstante der Bewegung. Die Anregungsenergien des Systems sind genau  $T_0$  und  $T_0 + U$ . Dies gilt nicht mehr bei einer zwar kleinen, aber endlichen Hoppingwahrscheinlichkeit. Aufgrund von Mehrfachprozessen<sup>5</sup> können in der Spektraldichte zusätzliche Satellitenpeaks bei  $T_0 + pU$  ( $p \in \mathbb{Z} \setminus \{0, 1\}$ ) auftreten. Harris und Lange führen nun eine kanonische Transformation [52, 87, 88] auf neue Teilchen  $(\bar{c}_{i\sigma}, \bar{c}_{i\sigma}^{\dagger})$  durch, mit der Bedingung, daß diese beim Hüpfen die Gesamtzahl der Doppelbesetzungen konstant lassen. Dadurch gelingt es, eine spektrale Zerlegung der ursprünglichen Operatoren  $(c_{i\sigma}, c_{i\sigma}^{\dagger})$  nach der Änderung der Zahl der Doppelbesetzungen anzugeben. Die Transformation kann rekursiv bis zur gewünschten Ordnung in  $W/U$  durchgeführt werden, und man erhält so eine Störungstheorie in  $W/U$  um den Grenzfall  $W = 0$ . Insbesondere können Harris und Lange mit Hilfe der spektralen Zerlegung der  $(c_{i\sigma}, c_{i\sigma}^{\dagger})$  Aussagen über die grobe Struktur der Spektraldichte im Limes starker Korrelation treffen [52]:

- Für große  $U$  wird die Spektraldichte dominiert von zwei Hauptpeaks, die aus den zwei Quasiteilchenniveaus des Grenzfalls  $W \rightarrow 0$  hervorgehen. Das spek-

---

<sup>5</sup>Unter Mehrfachprozessen sind solche Prozesse zu verstehen, bei denen sich beim Erzeugen (Verichten) eines Teilchens die Zahl der Doppelbesetzung an einem anderen Gitterplatz ändert [52].

trale Gewicht der Satellitenpeaks ist höchstens von der Ordnung  $(W/U)^4$ . Sie sind damit im Grenzfall starker Coulomb-Wechselwirkung vernachlässigbar.

- Darüberhinaus berechnen Harris und Lange die Schwerpunkte  $T_{p\sigma}^{(\text{HL})}(\mathbf{k})$  und die zugehörigen spektralen Gewichte  $\alpha_{p\sigma}^{(\text{HL})}(\mathbf{k})$  der beiden Hauptpeaks ( $p = 1, 2$ ) der Spektraldichte:

$$T_{1\sigma}^{(\text{HL})}(\mathbf{k}) = (1 - n_{-\sigma})\varepsilon(\mathbf{k}) + n_{-\sigma}B_{\mathbf{k}-\sigma} + O\left(\frac{W^2}{U}\right), \quad (3.56)$$

$$T_{2\sigma}^{(\text{HL})}(\mathbf{k}) = U + n_{-\sigma}\varepsilon(\mathbf{k}) + (1 - n_{-\sigma})B_{\mathbf{k}-\sigma} + O\left(\frac{W^2}{U}\right), \quad (3.57)$$

$$\alpha_{1\sigma}^{(\text{HL})}(\mathbf{k}) = 1 - n_{-\sigma} + \frac{2}{U}n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})(B_{\mathbf{k}-\sigma} - \varepsilon(\mathbf{k})) + O\left(\frac{W}{U}\right)^2, \quad (3.58)$$

$$\alpha_{2\sigma}^{(\text{HL})}(\mathbf{k}) = 1 - \alpha_{1\sigma}^{(\text{HL})}(\mathbf{k}). \quad (3.59)$$

Der Korrekturterm  $B_{\mathbf{k}-\sigma} = B_{-\sigma} + F_{\mathbf{k}-\sigma}$  ist dabei identisch mit (3.36)-(3.38).

Wir wollen die grobe Struktur des Quasiteilchenspektrums im Limes starker Korrelation (3.56)-(3.59) genauer diskutieren und mit dem Ergebnis (3.54) im Grenzfall des unendlich schmalen Bandes vergleichen. Die sogenannte *Hubbard-Aufspaltung* in zwei Quasiteilchensubbänder bleibt für endliches Hopping bestehen, die Schwerpunkte der beiden Subbänder (3.56) und (3.57) erhalten allerdings eine Dispersion. Darüberhinaus führen die Korrelationen bei eingeschaltetem Hopping zu einer Verschiebung der Schwerpunkte der Quasiteilchenpeaks sowie in erster Ordnung in  $W/U$  zu einer Umverteilung von spektralem Gewicht zwischen dem oberen und unteren Subband. In Bezug auf Magnetismus ist die Verschiebung der Schwerpunkte von wesentlicher Bedeutung. Diese ist für das untere und obere Subband durch  $n_{-\sigma}B_{\mathbf{k}-\sigma}$  bzw.  $(1 - n_{-\sigma})B_{\mathbf{k}-\sigma}$  gegeben. Dabei induziert die lokale Bandverschiebung  $B_{-\sigma}$  eine in der gesamten Brillouin-Zone konstante Verschiebung des Spektrums, die sich auch auf die über alle Wellenvektoren summierte QDOS überträgt. Sobald  $B_{-\sigma}$  im Rahmen einer selbstkonsistenten Rechnung eine echte Spinabhängigkeit bekommt, kann dieser Term entscheidend dazu beitragen, spontanen Ferromagnetismus zu stabilisieren. Es ist wichtig zu bemerken, daß  $B_{-\sigma}$  für große  $U$  proportional zur kinetischen Energie der  $(-\sigma)$ -Elektronen ist<sup>6</sup> [52, 89, 72, 51]:

$$n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})(B_{-\sigma} - T_0) \xrightarrow{U \rightarrow \infty} \begin{cases} -E_{\text{kin}-\sigma} + n_{-\sigma}T_0, & n \leq 1, \\ E_{\text{kin}-\sigma} - n_{-\sigma}T_0, & n > 1. \end{cases} \quad (3.60)$$

Die Bandbreitenkorrektur  $F_{\mathbf{k}-\sigma}$  hat im Gegensatz zur Bandverschiebung  $B_{-\sigma}$  wegen  $(1/N)\sum_{\mathbf{k}} F_{\mathbf{k}-\sigma} = 0$  keinen Einfluß auf die Schwerpunkte der QDOS, sondern führt lediglich zu einer Deformation (bzw. einer Verbreiterung oder Verschmälerung) der Quasiteilchenbänder. Darüberhinaus verschwindet  $F_{\mathbf{k}-\sigma}$  im Limes unendlicher Dimensionen (vgl. Kap. 3.5) und ist daher unwichtig für Gitter mit einer großen Koordinationszahl  $z$  [89, 73]. Man könnte daher annehmen, daß die Bandbreitenkorrektur in Bezug auf Magnetismus nur von untergeordneter Bedeutung ist. Der Einfluß der Bandbreitenkorrektur auf die Stabilität von spontanem Ferromagnetismus wird in Kapitel 3.6.1 im Detail untersucht.

<sup>6</sup> Für  $n \leq 1$  ergibt sich (3.60) wegen  $\langle c_{j-\sigma}^\dagger c_{i-\sigma} n_{i\sigma} \rangle \rightarrow 0$  für  $U \rightarrow \infty$  direkt aus (3.37). Der Fall  $n > 1$  folgt dann unter Verwendung der Teilchen-Loch-Symmetrie des Hubbard-Modells.

**Verbindung zu den Summenregeln für die Spektraldichte.** Es besteht ein enger Zusammenhang zwischen den Summenregeln (3.30), (3.31) und den exakten Resultaten von Harris und Lange (3.56)-(3.59). Zunächst sei bemerkt, daß das Erfüllen der Summenregeln bis  $m = 2$  eine notwendige Bedingung für das Ausbilden der beiden Hubbard-Bänder im Limes  $U \rightarrow \infty$  darstellt [90]. Für den Fall, daß eine Theorie die Hubbard-Aufspaltung ausbildet, reicht es nun aus, die Summenregel  $m = 0 - 3$  zu fordern um sicherzustellen, daß die Ergebnisse von Harris und Lange korrekt reproduziert werden [51]. Denn für  $U/W \gg 1$  kann man in niedrigster Ordnung von  $W/U$  die beiden Quasiteilchensubbänder<sup>7</sup> mit ihren Schwerpunkten und den zugehörigen spektralen Gewichten identifizieren. Diese vier Parameter können aber für jeden  $\mathbf{k}$ -Vektor der Brillouin-Zone eindeutig durch die ersten vier Summenregeln bestimmt werden. Die so festgelegten Dispersionen  $T_{p\sigma}(\mathbf{k})$  und spektralen Gewichte  $\alpha_{p\sigma}(\mathbf{k})$  ( $p = 1, 2$ ) stimmen notwendigerweise für große  $U$  mit den Ergebnissen von Harris und Lange überein [51]. Für beliebige approximative Lösungen des Hubbard-Modells wird also über die Summenregeln (3.30), (3.31) bzw. über die Hochenergieentwicklung der Green-Funktion (3.42) oder der Selbstenergie (3.43) eine Möglichkeit eröffnet, unabhängig von einer expliziten Entwicklung der Theorie in  $1/U$  zu überprüfen, ob die exakten Resultate von Harris und Lange erfüllt sind. Ist man sich andererseits sicher, daß eine bestimmte Theorie sowohl die Hubbard-Aufspaltung als auch die korrekten Hochenergiekoeffizienten der Green-Funktion für  $m = 0 - 3$  liefert, so werden die exakten Aussagen von Harris und Lange im Limes starker Korrelation automatisch reproduziert.

### 3.5. Der Limes unendlicher Dimensionen

Für klassische Spinsysteme, wie zum Beispiel für das Ising- oder das Heisenberg-Modell, wird die bekannte Weiss'sche Molekularfeldnäherung im Limes unendlich langreichweitiger Wechselwirkung oder unendlich vieler Nachbarn  $z \rightarrow \infty$  ( $\hat{=}$  unendlich hoher Dimensionen  $D$ ) exakt [91]. Jeder Spin spürt ein durch die benachbarten Spins induziertes fluktuierendes Feld. Bei einer großen Anzahl von Nachbarn sind die relativen Schwankungen dieses Feldes so gering, daß man es durch seinen Mittelwert (mittleres effektives Feld, *mean field*) ersetzen kann. Will man den Übergang  $D \rightarrow \infty$  am Heisenberg-Modell (2.1) konkret durchführen, so muß die Kopplungskonstante  $J$  gemäß

$$J = \frac{J^*}{z}, \quad J^* = \text{const}, \quad (3.61)$$

skaliert werden. Die Skalierung stellt sicher, daß das Modell weiterhin nicht-trivial bleibt<sup>8</sup>. Auf der anderen Seite ist eine solche, mit Hilfe des Übergangs  $D \rightarrow \infty$  formulierte Mean-Field-Theorie im Sinne einer Näherung für beliebige Dimensionen

---

<sup>7</sup> Dabei wird zusätzlich angenommen, daß die Bandbreite der beiden Quasiteilchensubbänder maximal von der Größenordnung  $W$  ist.

<sup>8</sup>Nicht-trivial meint hier, daß z. B. die freie Energie des Systems beim Übergang  $D \rightarrow \infty$  endlich bleibt ( $F \neq 0, F \neq \infty$ ).

anwendbar. Nicht-lokale Anregungen, insbesondere Spinwellen, die in niedrigen Dimensionen wichtig sind, werden dadurch vernachlässigt. Trotzdem liefert die Mean-Field-Näherung für das Heisenberg-Modell im allgemeinen eine qualitativ korrekte Beschreibung der magnetischen Eigenschaften und bildet so einen geeigneten Ausgangspunkt für weiterführende Rechnungen.

Für wechselwirkende Fermionensysteme ist eine ähnliche kontrollierte Mean-Field-Näherung wünschenswert. Metzner und Vollhardt [59] haben gezeigt, daß sich in der Tat der Übergang  $D \rightarrow \infty$  in analoger Weise auch für das Hubbard-Modell formulieren läßt. Allerdings kann für das Hubbard-Modell das mittlere effektive Feld auch im Grenzfall  $D = \infty$  nicht exakt angegeben werden. Im Gegensatz zur Weiss'schen Theorie ist das effektive Feld nicht statisch, sondern energieabhängig (dynamisch). Damit das nicht-triviale Wechselspiel zwischen kinetischer und potentieller Energie im Hubbard-Modell beim Übergang  $D \rightarrow \infty$  erhalten bleibt, haben Metzner und Vollhardt [59] folgende Skalierung des Hoppingintegrals zwischen nächsten Nachbarn  $t$  eingeführt:

$$t \rightarrow \frac{t^*}{\sqrt{z}}, \quad t^* = \text{const.} \quad (3.62)$$

Eine direkte Folge der Skalierung (3.62) ist die Tatsache, daß die elektronische Selbstenergie im Limes  $D \rightarrow \infty$  lokal wird [59, 92]:

$$\Sigma_{ij\sigma}(E) \xrightarrow{D \rightarrow \infty} \delta_{ij} \Sigma_{\sigma}(E). \quad (3.63)$$

Zudem wird für alle nicht-lokalen Wechselwirkungen die Hartree-Fock-Näherung exakt [92]. Angewendet auf Systeme in endlichen Dimensionen ist der Übergang (3.63) äquivalent zu der wohlbekannteren lokalen Näherung für die Selbstenergie. Der konzeptionelle Gewinn beim Lösen des Hubbard-Modells in endlichen Dimensionen besteht nun in der Erkenntnis, daß die lokale Näherung im Limes  $D \rightarrow \infty$  exakt wird und in diesem Sinne eine kontrollierte Näherung darstellt. Zumindest im Prinzip kann die lokale Näherung mit Hilfe von  $1/D$ -Korrekturen systematisch verbessert werden. Im Gegensatz zu gewöhnlichen Mean-Field-Theorien, wie der Hartree-Fock-Theorie oder der *random phase approximation*, werden im Rahmen der lokalen Näherung die lokalen Quantenfluktuationen vollständig berücksichtigt. Räumliche Fluktuationen dagegen werden vernachlässigt – eine Näherung, die mit steigender Koordinationszahl immer besser wird.

Aufgrund der Lokalität der Selbstenergie läßt sich das Hubbard-Modell in  $D = \infty$  auf das Single-Impurity-Anderson-Modell (SIAM) [93], zusammen mit einer Selbstkonsistenzbedingung, abbilden [60, 61, 62, 63, 64]. Das SIAM beschreibt eine einzelne Störstelle, die über eine Hybridisierung an ein Bad wechselwirkungsfreier Gitterelektronen koppelt. Die Coulomb-Wechselwirkung wird nur am Gitterplatz der Störstelle berücksichtigt. Die Abbildung auf das SIAM erfordert die selbstkonsistente Bestimmung der Hybridisierungsfunktion zwischen Störstelle und Gitterelektronen. Die Lösung des Hubbard-Modells über die Abbildung auf das SIAM wird als *dynamische Mean-Field-Theorie* (DMFT) bezeichnet. Der Gewinn liegt unter anderem darin, daß zur Lösung des SIAM umfangreiche Methoden existieren. Insbesondere numerische Methoden haben sich hier als sehr hilfreich erwiesen und liefern im Rahmen der numerischen Genauigkeit exakte Aussagen. Zum Beispiel läßt sich

das SIAM bei einer Beschränkung auf eine endliche Zahl von Gitterplätzen durch exakte Diagonalisierung (ED) lösen [94, 65]. Aufgrund der meist sehr kleinen Zahl der berücksichtigten Orbitale erhält man im Rahmen der ED allerdings keine glatten Zustandsdichten. Darüberhinaus kann man die Dynamik des SIAM mit Hilfe von Quanten-Monte-Carlo-Algorithmen (QMC) [95] numerisch berechnen. Ein Nachteil des QMC-Verfahrens ist allerdings – neben dem hohen Rechenaufwand – die Tatsache, daß die Selbstenergie nur für diskrete Matsubara-Energien, also entlang der imaginären Energieachse, bestimmt werden kann. Der Bereich tiefer Temperaturen ist daher wegen der statistischen Fehler der QMC-Rechnungen nur schwer zugänglich. Zudem erhält man physikalisch aussagekräftige dynamische Größen, wie die Spektraldichte oder die Quasiteilchenzustandsdichte, nur mit Hilfe einer numerisch durchzuführenden analytischen Fortsetzung der Selbstenergie auf die reelle Energieachse. Die Zuverlässigkeit einer solchen analytischen Fortsetzung ist allerdings fraglich.

Umfangreiche Untersuchungen am halbgefüllten ( $n = 1$ ) Hubbard-Modell im Rahmen der DMFT in den letzten Jahren haben zu großen Fortschritten beim Verständnis des korrelationsinduzierten Metall-Isolator-Übergangs geführt [65, 66]. In Bezug auf die magnetischen Eigenschaften des Hubbard-Modells hat Ulmke [76] mit Hilfe von DMFT-QMC-Rechnungen erstmals für ein verallgemeinertes fcc-Gitter in  $D = \infty$  die Existenz von spontanen ferromagnetischen Lösungen nachgewiesen. Zu einem detaillierten Verständnis des Phänomens Ferromagnetismus auf der Basis der temperaturabhängigen elektronischen Struktur können diese numerisch exakten Ergebnisse aber nur eingeschränkt beitragen. Die mit Hilfe der statischen Suszeptibilität bestimmten magnetischen Phasendiagramme [76, 78] stellen rigorose Aussagen dar, mit deren Hilfe approximative Theorien sowohl qualitativ als auch quantitativ überprüft werden können.

Die Überlegungen zum Grenzfall  $D = \infty$  ermöglichen es jetzt insbesondere, nicht nur die Selbstenergie, sondern auch beliebige Korrelationsfunktionen in der lokalen Näherung anzugeben. Führt man die Skalierung (3.62) explizit durch, so sieht man, wie sich beliebige Größen beim Übergang  $D \rightarrow \infty$  verhalten. Wir können also in konsistenter Weise die Momente der Spektraldichte (3.32)-(3.35), die Hochenergiekoeffizienten der Selbstenergie (3.44)-(3.46) sowie die Dispersionen und Gewichte der beiden Hubbard-Bänder im Limes starker Korrelation (3.56)-(3.59) in der lokalen Näherung bestimmen. Die generelle Struktur dieser Ausdrücke bleibt im Limes  $D \rightarrow \infty$  erhalten. Allerdings wird der Korrekturterm  $B_{\mathbf{k}-\sigma}$  (3.36) wegen

$$\begin{aligned} F_{\mathbf{k}-\sigma} &\xrightarrow[\text{lokale Näherung}]{D \rightarrow \infty} 0, \\ B_{\mathbf{k}-\sigma} &\xrightarrow[\text{lokale Näherung}]{D \rightarrow \infty} B_{-\sigma}, \end{aligned} \tag{3.64}$$

lokal [72, 89]. Die Ersetzung (3.64) liefert natürlich lokale Hochenergiekoeffizienten der Selbstenergie ( $C_{\mathbf{k}\sigma} \rightarrow C_{\sigma}$ , vgl. Kap. 3.2). Die Momente der Spektraldichte sowie die Resultate von Harris und Lange behalten aber über die Bloch-Dispersion  $\varepsilon(\mathbf{k})$  weiterhin eine  $\mathbf{k}$ -Abhängigkeit.

## 3.6. Approximative Theorien für das Hubbard-Modell

Näherungslösungen für das Hubbard-Modell sollten sich möglichst an exakten Aussagen in physikalisch wichtigen Grenzfällen des Modells orientieren. Im letzten Abschnitt haben wir einige solcher Grenzfälle diskutiert. Neben den Grenzfällen  $U = 0$  und  $W = 0$  lassen sich exakte Aussagen sowohl für  $U/W \ll 1$  (vgl. Kap. 3.3) als auch im entgegengesetzten Grenzfall  $U/W \gg 1$  (vgl. Kap. 3.4) treffen. Wir haben gesehen, daß die nicht-trivialen exakten Resultate von Harris und Lange [52] im Limes starker Korrelation wichtig in Bezug auf die Stabilität ferromagnetischer Lösungen sind. Das korrekte Verhalten einer Theorie gemäß Harris und Lange erfordert notwendigerweise die Einhaltung der ersten vier Summenregeln (3.30)-(3.31). Ein weiterer exakt lösbarer Grenzfall sei hier nur erwähnt. Läßt man im Hamilton-Operator (3.1) das Hopping der Elektronen nur für eine Spinrichtung zu ( $\varepsilon(\mathbf{k}) \rightarrow \varepsilon_\sigma(\mathbf{k})$ ,  $\varepsilon_\uparrow(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k})$ ,  $\varepsilon_\downarrow(\mathbf{k}) = T_0$ ), so erhält man das sogenannte *vereinfachte Hubbard-Modell* oder auch *Falicov-Kimball-Modell* (FKM) [96]. Im Limes  $D \rightarrow \infty$  kann das FKM exakt gelöst werden [97]. Die Selbstenergie dieser exakten Lösung des FKM ist äquivalent zur Lösung des Hubbard-Modells im Rahmen der Hubbard-III-Legierungsanalogie [98].

Wir werden im folgenden verschiedene Näherungsverfahren für das Hubbard-Modell diskutieren. Die approximativen Lösungen werden zunehmend aufwendiger und schließen immer mehr Grenzfälle ein. Alle hier vorgestellten Näherungsverfahren haben gemeinsam, daß sie die Ergebnisse von Harris und Lange im Limes starker Korrelation korrekt reproduzieren. Allgemeiner betrachtet lassen sich die im folgenden diskutierten Näherungslösungen als Verbesserungen bereits bekannter Approximationsverfahren bezüglich ihres Verhaltens im Limes starker Korrelation verstehen [51].

### 3.6.1. Die Methode des Spektraldichteansatzes

Die Methode des Spektraldichteansatzes (SDA)<sup>9</sup> beruht darauf, für die Spektraldichte einen physikalisch motivierten Ansatz aufzustellen, dessen freie Parameter mit Hilfe der exakten Summenregeln (3.30), (3.31) festgelegt werden [99, 71, 72]. Die Vorzüge der SDA beruhen auf ihrem klaren und einfachen Konzept, sowie auf ihrem nicht-störungstheoretischen Charakter. Da wir in dieser Arbeit in erster Linie an der Untersuchung von spontanem Ferromagnetismus – oder allgemeiner an der Beschreibung von stark korrelierten Elektronensystemen – interessiert sind, ist es sinnvoll, den Grenzfall  $U/W \gg 1$  als Anhaltspunkt für einen einfachen Ansatz zu verwenden. Harris und Lange [52] haben gezeigt, daß in diesem Limes die Struktur der Spektraldichte durch zwei Quasiteilchenpeaks dominiert wird. Geht man nun davon aus, daß Quasiteilchendämpfung nicht so wesentlich für die magnetische Stabilität ist, so erscheint folgender *Zweipolansatz* für die Spektraldichte plausibel [71, 72]:

$$S_{\mathbf{k}\sigma}^{(\text{SDA})}(E) = \hbar \sum_{p=1,2} \alpha_{p\sigma}(\mathbf{k}) \delta(E + \mu - E_{p\sigma}(\mathbf{k})). \quad (3.65)$$

<sup>9</sup> Die Methode wird auch auf andere Vielteilchenprobleme mit Erfolg angewendet.

Die Spektraldichte  $S_{\mathbf{k}\sigma}^{(\text{SDA})}(E)$  besteht für jeden Wellenvektor  $\mathbf{k}$  aus zwei  $\delta$ -Peaks bei den Quasiteilchenenergien  $E_{p\sigma}(\mathbf{k})$  mit den spektralen Gewichten  $\alpha_{p\sigma}(\mathbf{k})$  ( $p = 1, 2$ ). Die zugehörigen Quasiteilchen haben eine unendlich lange Lebensdauer. Die Vernachlässigung von Quasiteilchendämpfung ist sicher eine grobe Näherung. Der Einfluß einer endlichen Lebensdauer der Quasiteilchen auf die magnetische Stabilität wird in den folgenden Kapiteln (3.6.2-3.6.4) eingehend untersucht. Wir werden sehen, daß die konzeptionell einfache SDA das magnetische Verhalten des stark korrelierten Hubbard-Modells – zumindest qualitativ – erstaunlich gut beschreibt.

Die freien Parameter  $E_{p\sigma}(\mathbf{k})$  und  $\alpha_{p\sigma}(\mathbf{k})$  des Ansatzes (3.65) können mit Hilfe der ersten vier Summenregeln der Spektraldichte ((3.30), (3.31) mit (3.32)-(3.35)) eindeutig bestimmt werden [71, 72]:

$$E_{p\sigma}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left[ B_{\mathbf{k}-\sigma} + U + \varepsilon(\mathbf{k}) \right. \\ \left. (-)^p \sqrt{(U + B_{\mathbf{k}-\sigma} - \varepsilon(\mathbf{k}))^2 + 4Un_{-\sigma}(\varepsilon(\mathbf{k}) - B_{\mathbf{k}-\sigma})} \right], \quad (3.66)$$

$$\alpha_{1\sigma}(\mathbf{k}) = \frac{B_{\mathbf{k}-\sigma} + U(1 - n_{-\sigma}) - E_{1\sigma}(\mathbf{k})}{E_{2\sigma} - E_{1\sigma}}, \quad (3.67)$$

$$\alpha_{2\sigma}(\mathbf{k}) = 1 - \alpha_{1\sigma}(\mathbf{k}). \quad (3.68)$$

Dabei tritt der in (3.36) definierte Korrekturterm  $B_{\mathbf{k}-\sigma}$  auf. Man sieht leicht, daß  $E_{p\sigma}(\mathbf{k})$  und  $\alpha_{p\sigma}(\mathbf{k})$  für große  $U$  die Ergebnisse von Harris und Lange (3.56)-(3.59) reproduzieren.

Die zu (3.65)-(3.68) äquivalente Selbstenergie

$$\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{(\text{SDA})}(E) = Un_{-\sigma} \frac{E + \mu - B_{\mathbf{k}-\sigma}}{E + \mu - B_{\mathbf{k}-\sigma} - U(1 - n_{-\sigma})} \quad (3.69)$$

ist aufgrund der Vernachlässigung von Quasiteilchendämpfung rein reell. Man beachte, daß  $\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{(\text{SDA})}(E)$  dieselbe Struktur hat wie die Selbstenergie der Hubbard-I-Lösung [54] und die Selbstenergie im Grenzfall des unendlich schmalen Bandes (3.55). Allerdings ist in  $\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{(\text{SDA})}(E)$  der Schwerpunkt  $T_0$  des freien Bloch-Bandes durch den Korrekturterm  $B_{\mathbf{k}-\sigma}$  ersetzt. Im Gegensatz zur Hubbard-I-Lösung reproduziert  $\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{(\text{SDA})}(E)$  die exakte Hochenergieentwicklung der Selbstenergie gemäß (3.43)-(3.46). Die Hubbard-I-Lösung dagegen liefert nur die ersten beiden Hochenergiekoeffizienten der Selbstenergie in korrekter Weise, denn im dritten Koeffizienten ist der Korrekturterm  $B_{\mathbf{k}-\sigma}$  durch  $T_0$  ersetzt. Für gewisse Parameter kann der Korrekturterm  $B_{\mathbf{k}-\sigma}$  über die selbstkonsistente Rechnung eine echte Spinabhängigkeit erhalten und trägt so entscheidend zur Stabilität magnetischer Lösungen in der SDA bei [71, 72]. Im Rahmen der Hubbard-I-Lösung ist spontaner Ferromagnetismus nur für sehr spezielle BDOS möglich [54].

Um ein geschlossenes Gleichungssystem zu erhalten, das selbstkonsistent gelöst werden kann, muß der Korrekturterm  $B_{\mathbf{k}-\sigma} = B_{-\sigma} + F_{\mathbf{k}-\sigma}$  noch durch bekannte EinTeilchengrößen ausgedrückt werden. Wie wir bereits in Kapitel 3.1 gesehen haben, läßt sich die Bandverschiebung  $B_{-\sigma}$  (3.37), obwohl sie höhere Korrelationsfunktionen enthält, anhand von Gleichung (3.40) über die Ein-Teilchen-Spektraldichte berechnen. Die Bestimmung der höheren Korrelationsfunktionen (Dichte-Dichte-

Doppelsprung- und Spinflipkorrelation), die in der Bandbreitenkorrektur  $F_{\mathbf{k}-\sigma}$  (3.38) auftreten, gelingt dagegen nur mit Hilfe einer zusätzlichen Annahme [89, 72]: Zunächst werden geeignete „höhere“ Spektraldichten

$$S_{ij\sigma}^{(A)}(t) = \frac{1}{2\pi} \langle [A_i(t), c_{j\sigma}^\dagger(0)] \rangle \quad (3.70)$$

definiert, mit denen sich über das Spektraltheorem die gesuchten höheren Korrelationsfunktionen berechnen lassen. Anhand der Lehmann-Darstellung erkennt man, daß die Anregungsenergien dieser höheren Spektraldichten identisch zu den Anregungsenergien der der Ein-Teilchen-Spektraldichte sind. Ein Zweipolansatz für  $S_{\mathbf{k}\sigma}^{(A)}(E)$  mit den Quasiteilchenenergien (3.66), aber neuen spektralen Gewichten erscheint also konsistent mit der generellen Idee der SDA. Die noch unbestimmten neuen Gewichte können über die ersten zwei Summenregeln (analog zu (3.30), (3.31)) der höheren Spektraldichten  $S_{\mathbf{k}\sigma}^{(A)}(E)$  festgelegt werden. Eine ausführliche Berechnung der Bandbreitenkorrektur ist in [89, 72] zu finden. Dasselbe Verfahren, angewendet auf die Berechnung der Bandverschiebung  $B_{-\sigma}$ , liefert das exakte Resultat (3.40). Weiter sei bemerkt, daß die so bestimmte Bandbreitenkorrektur  $F_{\mathbf{k}-\sigma}$  im Limes unendlich hoher Dimensionen ( $D \rightarrow \infty$ ) verschwindet. Die Lokalität der Selbstenergie in diesem Limes wird also im Rahmen der SDA korrekt reproduziert.

Da sich also die Bandbesetzung  $n_{-\sigma}$  und der Korrekturterm  $B_{\mathbf{k}-\sigma}$  über die Spektraldichte  $S_{\mathbf{k}\sigma}^{(\text{SDA})}(E)$  berechnen lassen, erhalten wir ein geschlossenes Gleichungssystem ((3.65)-(3.68), (3.19), (3.40), zur Bestimmung von  $F_{\mathbf{k}-\sigma}$  siehe [89, 72]), daß selbstkonsistent gelöst werden kann. Das Gleichungssystem der SDA erweist sich als vollständig äquivalent [72, 89] zur Methode von Roth [100, 101] und kann auch mit Hilfe des Mori-Zwanzig-Projektionsformalismus abgeleitet werden [102, 103]. Die hier vorgestellte Methode des Zweipolansatzes wurde unter anderem auf das Hubbard-Modell in  $D = 1$  [102],  $D = 2$  [102, 101],  $D = 3$  [99, 71, 72, 73, 89] sowie  $D = \infty$  [73] angewendet. In  $D = 1, 2$  zeigt sich eine gute Übereinstimmung des Quasiteilchenspektrums der SDA mit ED [102] und QMC [101] Resultaten – selbst im Bereich moderater Coulomb-Wechselwirkung  $U \approx W$ .

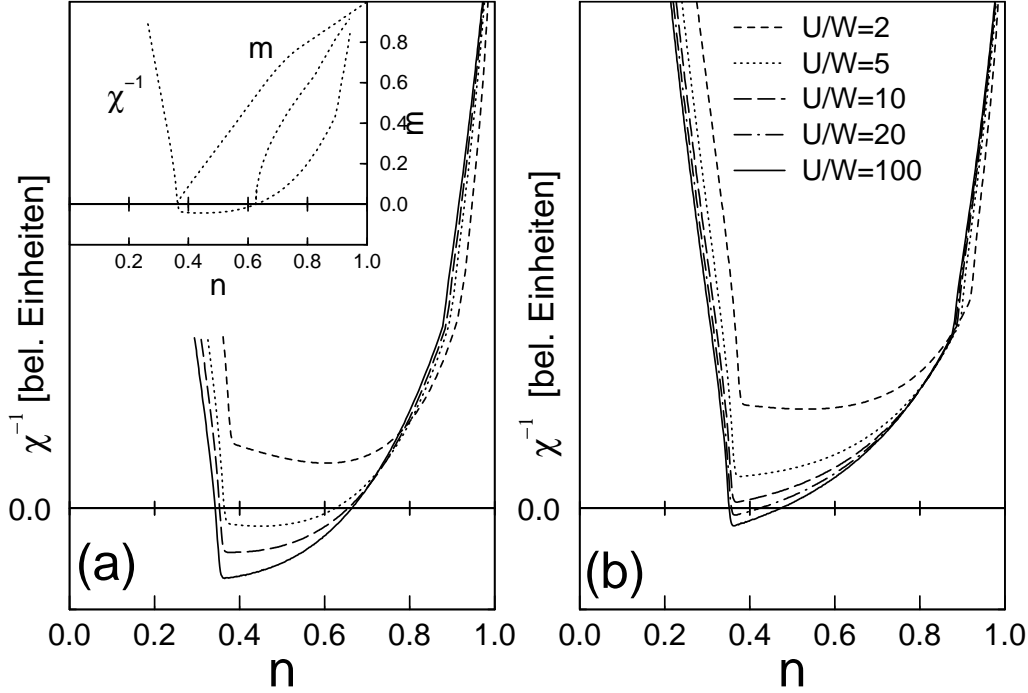
Einen wichtigen Einblick in das magnetische Verhalten des Hubbard-Modells erhält man mit Hilfe der statischen Suszeptibilität [104, 72, 73, 89]:

$$\chi(T, H, n) = \frac{1}{\mu_0} \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right)_{T, n}. \quad (3.71)$$

Dabei ist  $\mu_0$  die Vakuumpermeabilität,  $H$  ein homogenes statisches magnetisches Feld und  $M$  die Magnetisierung des Systems:

$$M = \frac{N}{V} \mu_B (n_\uparrow - n_\downarrow). \quad (3.72)$$

Zur Untersuchung magnetischer Phasenübergänge sind wir an der paramagnetischen statischen Suszeptibilität im Limes  $H \rightarrow 0$  interessiert. Die Pole der Suszeptibilität geben die Punkte im Phasendiagramm an, an denen die paramagnetische Phase instabil gegenüber ferromagnetischer Ordnung wird. Dabei ist zu beachten, daß von  $\chi$  nur die kontinuierlichen Phasenübergänge 2. Ordnung abgelesen werden können. Um die Suszeptibilität zu berechnen, muß das Hubbard-Modell um einen Zeeman-Term

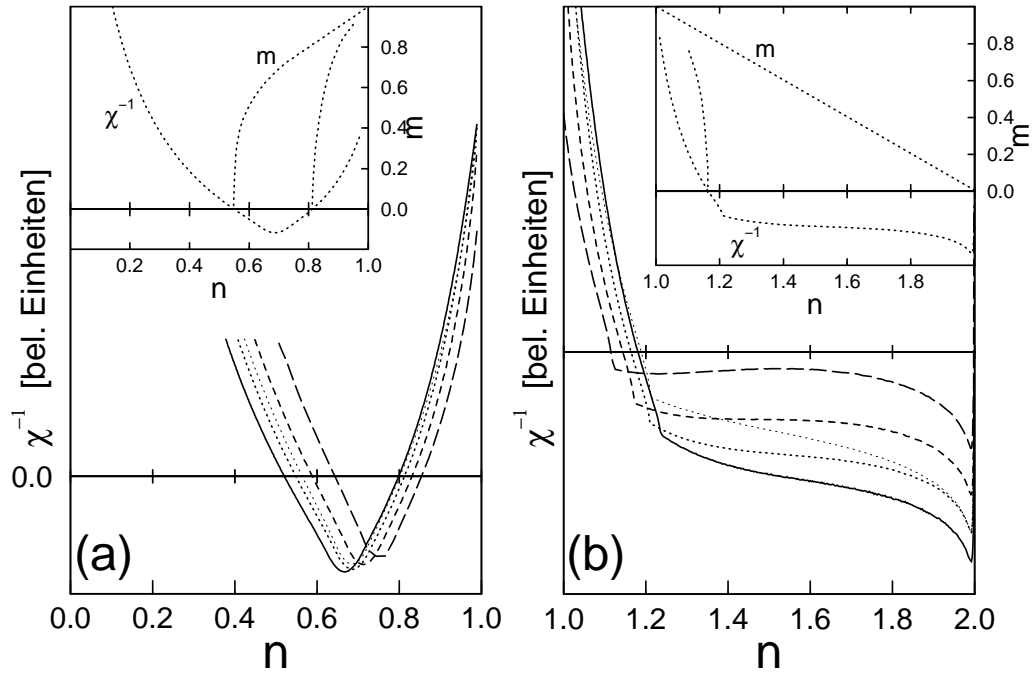


**Abbildung 3.2.:** Inverse Suszeptibilität  $\chi^{-1}$  für das sc-Gitter als Funktion der Bandbesetzung  $n$  bei  $T = 0$  K und für verschiedene Werte der Coulomb-Wechselwirkung  $U$ . (a) System mit der vollen  $\mathbf{k}$ -Abhängigkeit der Selbstenergie. (b) System in der lokalen Näherung ( $F_{\mathbf{k}\sigma} \equiv 0$ ). Der Inset in (a) zeigt für  $U/W = 5$  und  $T = 0$  K die Magnetisierungskurven  $m(n)$  der beiden ferromagnetischen Lösungen, die an den beiden Nulldurchgängen von  $\chi^{-1}$  starten.

ergänzt werden. Dies erschwert aber nicht die Lösung des Modells. Die Ableitung in (3.71) kann entweder numerisch oder analytisch [89] durchgeführt werden.

In den Abbildungen 3.2 und 3.3 ist die inverse Suszeptibilität  $\chi^{-1}$  in der SDA für die drei kubischen Gitter sc, bcc und fcc (BDOS wie in Abb. 3.1) bei  $T = 0$  als Funktion der Bandbesetzung abgebildet [73]. Für die bipartiten Gitter sc und bcc ist der Bereich  $0 \leq n \leq 1$  gezeigt. Die Ergebnisse für  $1 \leq n \leq 2$  ergeben sich in diesen Systemen unter Ausnutzung der Teilchen-Loch-Symmetrie durch Spiegelung an  $n = 1$ . Für das fcc-Gitter ist nur der Bereich  $1 \leq n \leq 2$  interessant, da hier  $\chi^{-1}$  für  $n < 1$  keine Nullstellen hat [73]. Wir finden eine untere kritische Wechselwirkungsstärke  $U_c$ , ab der spontaner Ferromagnetismus im System möglich ist. Dabei zeigt sich eine deutliche Abhängigkeit von der Gitterstruktur [73] (vgl. auch Tabelle 3.1). So ist für das sc-Gitter spontaner Ferromagnetismus in der SDA erst ab einer Coulomb-Wechselwirkung  $U_c^{\text{sc}} = 4W$  möglich. Für das bcc-Gitter, dessen BDOS eine ausgeprägte Singularität in der Bandmitte aufweist, reduziert sich dieser Wert auf  $U_c^{\text{bcc}} \approx 0.8W$  und für das fcc-Gitter sogar auf  $U_c^{\text{fcc}} \approx 0.5W$ . Die starke Asymmetrie der BDOS des nicht-bipartiten fcc-Gitters erweist sich als günstig in Bezug auf die magnetische Stabilität.

Es ist interessant, den Einfluß der  $\mathbf{k}$ -abhängigen Terme der Selbstenergie auf die magnetische Stabilität zu untersuchen. In Abbildung 3.2(b) ist  $\chi^{-1}(n)$  im sc-Gitter für die SDA in der lokalen Näherung ( $F_{\mathbf{k}-\sigma} \equiv 0$ ) aufgetragen. Die Vernachlässigung der  $\mathbf{k}$ -Abhängigkeit hat einen drastischen Effekt. Die kritische Wechselwirkung  $U_c$



**Abbildung 3.3.:** Inverse Suszeptibilität  $\chi^{-1}$  für das (a) bcc-Gitter und (b) fcc-Gitter als Funktion der Bandbesetzung  $n$  bei  $T = 0$  K und für verschiedene Werte der Coulomb-Wechselwirkung  $U$  (---:  $U/W = 1$ ; -·-·-:  $U/W = 2$ ; ····:  $U/W = 5$ ; —:  $U/W = 100$ ; die dünne punktierte Linie entspricht der Lösung für  $U/W = 5$  in der lokalen Näherung ( $F_{\mathbf{k}\sigma} \equiv 0$ )). Die Insets zeigt für  $U/W = 5$  und  $T = 0$  K die Magnetisierungskurven  $m(n)$  zusammen mit  $\chi^{-1}(n)$ .

steigt für das sc-Gitter auf  $U_c = 14W$  an. Allerdings nimmt der Einfluß der Bandbreitenkorrektur  $F_{\mathbf{k}-\sigma}$  mit steigender Koordinationszahl stark ab [72, 73, 89]. Schon für das fcc-Gitter ( $z = 12$ ) ist der Einfluß der  $\mathbf{k}$ -abhängigen Terme der Selbstenergie auf das magnetische Phasendiagramm nur noch sehr gering (Abb. 3.3).

Für  $U > U_c$  hat  $\chi^{-1}$  als Funktion der Bandbesetzung  $n$  zwei Nulldurchgänge. An beiden Nulldurchgängen setzt eine ferromagnetische Lösung ein (Inset der Abb. 3.2 und 3.3). Für gewisse Bandbesetzungen gibt es daher zwei verschiedene ferromagnetische Lösungen – eine Eigenschaft, die wir auch im Rahmen aller weiteren in dieser Arbeit vorgestellten Näherungsverfahren finden. Allerdings ist immer die Lösung mit der höheren Magnetisierung („erste“ Lösung) stabil [71, 72]. Die „zwei-

**Tabelle 3.1.:** Für die drei kubischen Gitter sc, bcc und fcc ist die kritische Coulomb-Wechselwirkung  $U_c$  angegeben, ab der im Rahmen der SDA Ferromagnetismus im System möglich ist. Zusätzlich aufgeführt ist für  $U = \infty$  der Bereich der Bandbesetzung  $n$ , für den ferromagnetische Lösungen existieren, sowie der Bereich, in dem ferromagnetische Sättigung auftritt.

Gitter	$U_c/W$	mag. Bereich ( $U = \infty$ )	Sättigung ( $U = \infty$ )
sc	4	$0.34 < n < 1.66$	$0.68 < n < 1.32$
bcc	0.8	$0.52 < n < 1.48$	$0.68 < n < 1.32$
fcc	0.5	$1.0 < n < 2.0$	$1.0 < n < 2.0$

te“ Lösung ist daher für das folgende von untergeordneter Bedeutung. Anhand der ersten Lösung können wir für die verschiedenen Gitterstrukturen den Bereich der Bandbesetzung bestimmen, in dem ferromagnetische Lösungen existieren. Weiterhin ist auch der Bereich interessant, für den die magnetischen Lösungen vollständig polarisiert sind. Beide Bereiche sind für den Fall  $U/W \gg 1$  in der Tabelle 3.1 angegeben. Es zeigt sich eine Übereinstimmung mit den Ergebnissen von [105, 106]. Dort wird der Stabilitätsbereich des vollständig polarisierten Zustandes im Rahmen des *single spin flip* Gutzwiller Variationsverfahrens untersucht.

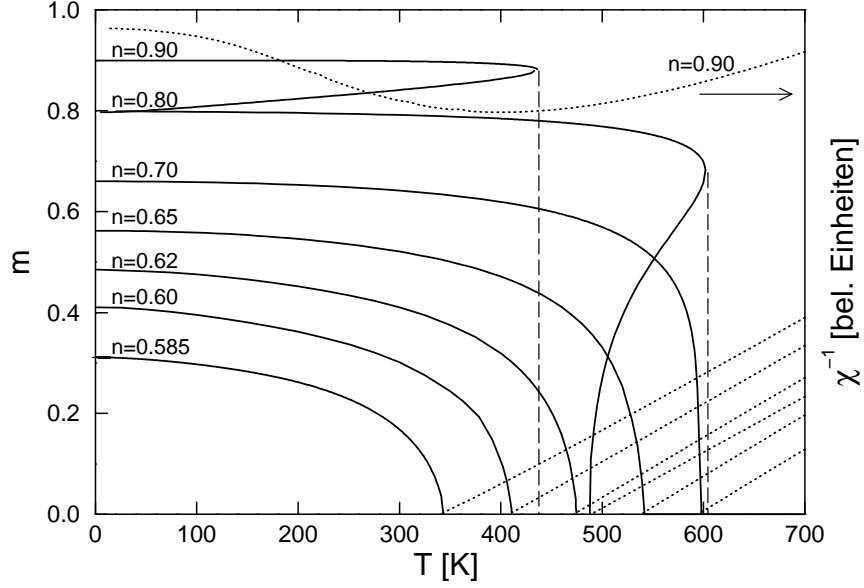
Wir wollen am Beispiel des bcc-Gitters<sup>10</sup> das Temperaturverhalten der ferromagnetischen Lösungen diskutieren [72]. In Abbildung 3.4 sind für verschiedene Bandbesetzungen  $n$  die Magnetisierungskurven  $m(T)$  und die inverse Suszeptibilität  $\chi^{-1}(T)$  als Funktion der Temperatur  $T$  aufgetragen. Für Bandbesetzungen  $n < 0.7$  zeigen die Magnetisierungskurven einen typischen Brillouin-artigen Temperaturverlauf. Die Curie-Temperaturen  $T_C$  nehmen in diesem Bereich mit steigender Bandbesetzung zu. Dieses Verhalten ändert sich für Bandbesetzungen nahe bei Halbfüllung, für die zwei ferromagnetische Lösungen existieren. Die beiden ferromagnetischen Lösungen verschmelzen als Funktion der Temperatur bei einer endlichen Magnetisierung. Dies hat einen sprunghaften Phasenübergang 1. Ordnung zur Folge, der in Abbildung 3.4 durch die senkrechten gestrichelten Linien angedeutet ist. Es ist nicht klar, ob die Existenz von Phasenübergängen 1. Ordnung nahe bei Halbfüllung typisch für das Hubbard-Modell ist, oder einen Artefakt der Näherung darstellt. Die inverse Suszeptibilität ist für hohe Temperaturen linear in  $T$  und zeigt damit das typische Curie-Weiß-Verhalten. Nahe am Phasenübergang weichen die Kurven geringfügig vom linearen Verhalten ab. Die Nulldurchgänge von  $\chi^{-1}$  stimmen im Fall von Phasenübergängen 2. Ordnung genau mit den Curie-Temperaturen überein.<sup>11</sup>

Das magnetische Verhalten des Hubbard-Modells im Rahmen der SDA läßt sich anschaulich mit Hilfe der Quasiteilchenzustandsdichte  $\rho_\sigma(E)$  verstehen. Diese ist für das bcc-Gitter in Abbildung 3.5 für einen typischen Satz von Bandbesetzungen und Temperaturen gezeigt [72]. Das Spektrum wird dominiert von zwei korrelationsinduzierten Bandaufspaltungen. Davon bezieht sich die erste auf die Aufspaltung des Quasiteilchenspektrums in ein unteres und ein oberes Subband (Hubbard-Aufspaltung). Die Hubbard-Aufspaltung tritt für alle Parameter auf und läßt sich bereits im exakt lösbaeren Grenzfall des unendlich schmalen Bandes  $W = 0$  beobachten. Die beiden Subbänder sind durch einen Energiebetrag der Größenordnung  $U$  voneinander getrennt. Im unteren Subband hüpfte das Elektron im wesentlichen über leere Gitterplätze, während es sich im oberen Subband hauptsächlich über Gitterplätze bewegt, die bereits von einem Elektron mit entgegengesetztem Spin besetzt sind. Die Gewichte (Flächen) der Subbänder entsprechen gerade der Wahrscheinlichkeit für ein propagierendes Elektron, die jeweilige Situation im System anzutreffen. Anschaulich argumentiert skaliert daher das Gewicht des unteren Subbandes mit

---

<sup>10</sup> Anhand von Tabelle 3.1, aber auch anderer approximativer Theorien sowie QMC-Rechnungen ist klar, daß das bcc-Gitter nicht besonders günstig für spontanen Ferromagnetismus ist. Aus Gründen der Anschaulichkeit werden wir das Temperaturverhalten trotzdem zunächst am Beispiel des bipartiten bcc-Gitters diskutieren.

<sup>11</sup> Auch für Bandbesetzungen, für die das System Phasenübergänge 1. Ordnung ausbildet, kann  $\chi^{-1}(T)$  einen Nulldurchgang haben (z. B.  $n = 0.8$  in Abb. 3.4). Dieser zeigt dann aber nicht die Curie-Temperatur, sondern das Einsetzen der zweiten ferromagnetischen Lösung an.

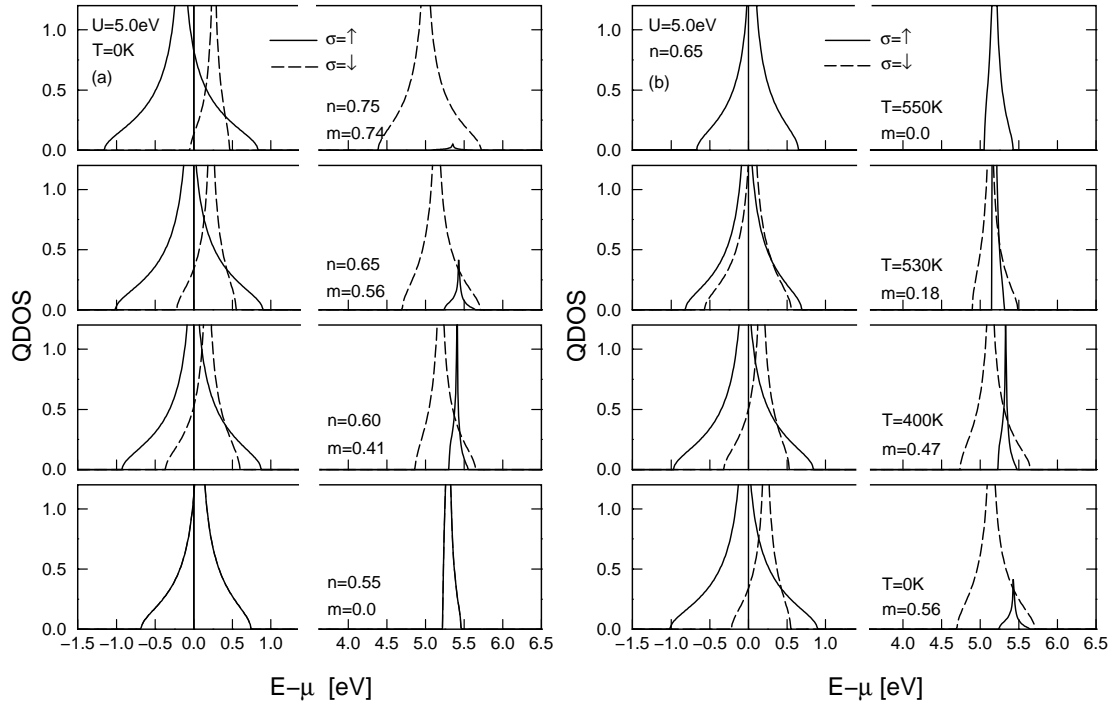


**Abbildung 3.4.:** Magnetisierung  $m$  (durchgezogene Linien) als Funktion der Temperatur  $T$  für verschiedene Bandbesetzungen  $n$  im Rahmen der SDA für das bcc Gitter. Zusätzlich ist die inverse paramagnetische statische Suszeptibilität  $\chi^{-1}$  (punktirierte Linien) gezeigt. Weitere Parameter:  $U = 5.0$  eV;  $W = 2$  eV.

$(1 - n_{-\sigma})$ , das des oberen mit  $n_{-\sigma}$ . Diese Ausdrücke werden exakt im Limes starker Korrelation  $U/W \gg 1$  (vgl. Gl. (3.58), (3.59)).

Abbildung 3.4(a) zeigt die Abhängigkeit der QDOS von der Bandbesetzung für  $T = 0$  K. Für  $n = 0.55$  ist das System in der paramagnetischen Phase. Für größere Bandbesetzungen finden wir dagegen spontanen Ferromagnetismus. Hier tritt neben der Hubbard-Aufspaltung eine zusätzliche Spinaufspaltung („Austauschaufspaltung“) zwischen Majoritätsspektrum ( $\sigma = \uparrow$ ) und Minoritätsspektrum ( $\sigma = \downarrow$ ) auf. Mit steigender Bandbesetzung nimmt die Spinaufspaltung und damit die Magnetisierung des Systems zu. Für  $n > 0.75$  liegt das ( $\sigma = \downarrow$ )-Spektrum komplett über dem chemischen Potential  $\mu$  und das System ist vollständig polarisiert. Aufgrund der fehlenden Wechselwirkungspartner ( $n_{\downarrow} = 0$ ) verschwindet in der ferromagnetischen Sättigung im ( $\sigma = \uparrow$ )-Spektrum das obere Subband und das zugehörige untere Subband wird identisch mit der Zustandsdichte des freien Systems.

Die Spinaufspaltung wird hervorgerufen durch eine Spinabhängigkeit des Korrekturterms  $B_{\mathbf{k}-\sigma}$ . Die spinabhängige Verschiebung zwischen den Schwerpunkten der unteren Majoritäts- und Minoritätssubbänder der QDOS ist im Limes starker Korrelation mit (3.56) und (3.57) durch  $\Delta_{\text{ex}} = n_{\uparrow} B_{\uparrow} - n_{\downarrow} B_{\downarrow}$  gegeben. Die Bandverschiebung  $B_{\sigma}$  ist in diesem Limes proportional zur kinetischen Energie der  $\sigma$ -Elektronen. Im Falle ferromagnetischer Sättigung vereinfacht sich dieser Ausdruck weiter, da die kinetische Energie der ( $\sigma = \downarrow$ )-Elektronen verschwindet. Die kinetische Energie der ( $\sigma = \uparrow$ )-Elektronen ist wegen  $n_{\downarrow} = 0$  über das wechselwirkungsfreie System gegeben. Wir halten fest, daß die für die magnetischen Eigenschaften relevante Energieskala (Spinaufspaltung) im Limes starker Korrelation also nicht durch die Größe der Coulomb-Wechselwirkung, sondern durch die kinetische Energie (genauer: die Differenz zwischen der kinetischen Energie der ( $\sigma = \downarrow$ )- und ( $\sigma = \uparrow$ )-Elektronen) und damit durch die Bandbreite  $W$  der BDOS gegeben ist. Typischerweise ist die



**Abbildung 3.5.:** Quasiteilchenzustandsdichte (QDOS)  $\rho_\sigma(E)$  als Funktion der Energie  $E$  für das bcc-Gitter. (a) für  $T = 0\text{K}$  und unterschiedliche Bandbesetzungen  $n$ . (b) für  $n = 0.65$  und verschiedene Temperaturen  $T \leq T_C$ . Die durchgezogenen Linien bezeichnen das ( $\sigma = \uparrow$ )-Spektrum, die gestrichelten Linien das ( $\sigma = \downarrow$ )-Spektrum. Weitere Parameter:  $U = 5.0\text{eV}$ ,  $W = 2.0\text{eV}$ .

Spinaufspaltung im Rahmen der SDA daher sehr viel kleiner als die Coulomb-Wechselwirkung  $U$ . Insbesondere sättigt die Spinaufspaltung als Funktion von  $U$  bereits für  $U/W \approx 2 - 3$ . Aus demselben Grund sättigt auch die Curie-Temperatur als Funktion der Coulomb-Wechselwirkung (vgl. auch Abb. 3.8 in Kap. 3.6.2).

Der Demagnetisierungsprozess mit wachsender Temperatur ist in Abbildung 3.4(b) für  $n = 0.65$  gezeigt. Das Temperaturverhalten der QDOS wird dominiert von zwei Korrelationseffekten. Eine spinabhängige Verschiebung der Bänder führt mit steigender Temperatur zu einer Abnahme der Spinaufspaltung zwischen ( $\sigma = \uparrow$ )- und ( $\sigma = \downarrow$ )-Spektrum. Der Demagnetisierungsprozess wird zusätzlich noch verstärkt durch einen starken, spinabhängigen Transfer von spektralem Gewicht zwischen unterem und oberem Subband. Im unteren Subband nimmt das spektrale Gewicht des ( $\sigma = \uparrow$ )-Spektrums ab, während das des ( $\sigma = \downarrow$ )-Spektrums zunimmt. Das Verhalten im oberen Subband ist gerade umgekehrt. Beide Korrelationseffekte zusammen führen zu einer Verringerung der Spinasymmetrie, die schließlich für  $T = T_C$  vollständig verschwindet.

### 3.6.2. Die modifizierte Legierungsanalogie

Während der Zweipolansatz für die Spektraldichte der SDA anhand der exakten Resultate von Harris und Lange im Limes starker Korrelation sehr gut motiviert ist, stellt die Vernachlässigung von Quasiteilchendämpfung in (3.65) sicherlich eine grobe Näherung dar. In diesem Kapitel soll daher der Einfluß von Quasiteilchendämpfungseffekten auf die magnetische Stabilität untersucht werden. Eine Theorie, die Quasiteilchendämpfung auf eine konzeptionell einfache Weise einschließt, ist die Methode der Legierungsanalogie, die ursprünglich von Hubbard [98] eingeführt wurde. Die grundlegende Idee von Hubbards *Legierungsanalogie* besteht darin, bei der Berechnung des Spektrums der  $\sigma$ -Elektronen für einen Moment die  $(-\sigma)$ -Elektronen als „festgehalten“ und zufällig über das Gitter verteilt anzunehmen. Die Situation, die sich dadurch für die  $\sigma$ -Elektronen ergibt, ist äquivalent zu einer *fiktiven binären Legierung*. Ein  $\sigma$ -Elektron trifft an einem leeren Gitterplatz auf das atomare Niveau  $E_{1\sigma}$ , an einem Gitterplatz, der bereits von einem  $(-\sigma)$ -Elektron besetzt ist, auf das atomare Niveau  $E_{2\sigma}$ . Diese beiden Energieniveaus treten in der fiktiven Legierung mit den Konzentrationen  $x_{1\sigma}$  und  $x_{2\sigma}$  auf, die proportional zur Wahrscheinlichkeit sind, daß ein  $\sigma$ -Elektron die erste oder die zweite Situation antrifft.

Hubbard bestimmte im Rahmen seiner *konventionellen* Legierungsanalogie (AA: *alloy analogy*) [98] die Parameter  $E_{p\sigma}$  und  $x_{p\sigma}$  ( $p = 1, 2$ ) anhand der Lösung des Modells im Grenzfall  $W = 0$  (siehe (3.54)):

$$\begin{aligned} E_{1\sigma}^{(\text{AA})} &= T_0 & x_{1\sigma}^{(\text{AA})} &= 1 - n_{-\sigma}, \\ E_{2\sigma}^{(\text{AA})} &= T_0 + U & x_{2\sigma}^{(\text{AA})} &= n_{-\sigma}. \end{aligned} \quad (3.73)$$

Diese Wahl ist aber keineswegs die einzig mögliche. Wie wir sehen werden, kann (3.73) noch erheblich verbessert werden. Es ist klar, daß eine „optimale“ Wahl der Energiepole  $E_{p\sigma}$  und Konzentrationen  $x_{p\sigma}$  in irgendeiner Weise berücksichtigen sollte, daß die  $(-\sigma)$ -Elektronen nicht wirklich „festgehalten“, sondern itinerant sind.

Kommen wir aber zunächst zur Auswertung einer durch  $E_{p\sigma}$  und  $x_{p\sigma}$  festgelegten binären Legierung. Hierfür steht mit der *coherent potential approximation* (CPA) [107, 108] eine gut bekannte und konzeptionell klare Theorie zu Verfügung. Die CPA beruht auf einer *single site*-Näherung für die ungeordnete Legierung, d. h. bei der Berechnung der Selbstenergie werden Korrelationen zwischen Streuprozessen an verschiedenen Gitterplätzen vernachlässigt. Es wurde schon früh mit Hilfe diagrammatischer Methoden erkannt, daß die CPA von allen *single site*-Näherungen für das Legierungsproblem die beste ist [109, 57]. Insbesondere liefert die CPA die exakte Lösung für das Legierungsproblem im Limes unendlicher Dimensionen, in dem die *single site*-Näherung exakt wird [110]. Die Methode der CPA manifestiert sich in der folgenden impliziten Gleichung für die Selbstenergie<sup>12</sup> [107, 108, 109, 57]:

$$0 = \sum_{p=1,2} x_{p\sigma} \frac{E_{p\sigma} - \Sigma_{\sigma}(E) - T_0}{1 - \frac{1}{\hbar} G_{ii\sigma}(E) [E_{p\sigma} - \Sigma_{\sigma}(E) - T_0]}. \quad (3.74)$$

<sup>12</sup> In (3.74) muß die Selbstenergie um den Bandschwerpunkt  $T_0$  korrigiert werden, um sicherzustellen, daß die CPA-Lösung der AA (3.73) den Grenzfall des unendlich schmalen Bandes  $W = 0$  (vgl. Kapitel 3.4) reproduziert.

Zusätzlich erscheint die Selbstenergie implizit in dem Ausdruck für die lokale Green-Funktion  $G_{ii\sigma}(E)$ :

$$G_{ii\sigma}(E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar}{E + \mu - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma_{\sigma}(E)}. \quad (3.75)$$

Zur Bestimmung von  $\Sigma_{\sigma}(E)$  und  $G_{ii\sigma}(E)$  müssen die Gleichungen (3.74) und (3.75) selbstkonsistent gelöst werden (vgl. Anhang A). Die CPA-Selbstenergie ist im allgemeinen eine komplexe Funktion der Energie und schließt Quasiteilchendämpfung aufgrund von Streuprozessen ein. Die Auswertung der AA mit Hilfe der CPA liefert – angewendet auf das FKM – die exakte Lösung von Brandt und Mielsch [97] im Limes  $D = \infty$ . Auch der Grenzfall  $W = 0$  (3.55) wird korrekt reproduziert.

Es wurde bald erkannt, daß im Rahmen der konventionellen Legierungsanalogie (3.73) kein spontaner Ferromagnetismus möglich ist [111]. Dies hängt eng damit zusammen, daß die Energieniveaus  $E_{p\sigma}^{(AA)}$  spinunabhängige Größen sind. Die Frage ist daher, ob Ferromagnetismus im Rahmen einer Legierungsanalogie generell ausgeschlossen ist. In diesem Zusammenhang wollen wir das Verhalten der AA im Limes  $U/W \rightarrow \infty$  genauer analysieren. Im sogenannten *split band limit* ( $|E_{2\sigma} - E_{1\sigma}|/W \gg 1$ ), der im Rahmen der Legierungsanalogie für das Hubbard-Modell dem Limes starker Korrelation entspricht, läßt die CPA-Theorie exakte Aussagen über die Schwerpunkte der Quasiteilchenbänder zu [107]:

$$T_{p\sigma}^{(CPA)}(\mathbf{k}) \longrightarrow E_{p\sigma} + x_{p\sigma}(\varepsilon(\mathbf{k}) - T_0). \quad (3.76)$$

Im Vergleich mit (3.56) und (3.57) sieht man, daß die AA (3.73) für große  $U$  im Widerspruch zu den Ergebnissen von Harris und Lange [52] steht. Offensichtlich ist die Legierungsanalogie (3.73) unzureichend. Die Annahme der „festgehaltenen“ ( $-\sigma$ )-Elektronen führt zu unbefriedigenden Ergebnissen.

Das Ergebnis (3.76) liefert nun einen entscheidenden Hinweis darauf, wie die ursprüngliche Legierungsanalogie verbessert werden kann. Das Ziel ist es, die Legierungsparameter so zu modifizieren, daß die Schwerpunkte der Quasiteilchenbänder (3.76) die exakten Resultate von Harris und Lange reproduzieren. Die Methode der Legierungsanalogie stellt eine lokale Theorie dar. Für einen korrekten Vergleich müssen wir daher die Ergebnisse (3.56)-(3.59) in der lokalen Näherung, also für  $F_{\mathbf{k}-\sigma} \equiv 0$  betrachten. Man sieht leicht, daß die Ergebnisse von Harris und Lange reproduziert werden, falls man die Legierungsparameter anhand der SDA-Resultate im Limes starker Korrelation bestimmt. Dazu muß die Blochdispersion  $\varepsilon(\mathbf{k})$  durch den Schwerpunkt des Bloch-Bandes  $T_0$  ersetzt werden:

$$\begin{aligned} E_{p\sigma} &= \left( (E_{p\sigma}^{(SDA)}(\mathbf{k}))_{U/W \rightarrow \infty} \right)_{\varepsilon(\mathbf{k}) \rightarrow T_0}, \\ x_{p\sigma} &= \left( (\alpha_{p\sigma}^{(SDA)}(\mathbf{k}))_{U/W \rightarrow \infty} \right)_{\varepsilon(\mathbf{k}) \rightarrow T_0}. \end{aligned} \quad (3.77)$$

Die entscheidende Idee der modifizierten Legierungsanalogie (MAA: *modified alloy analogy*) [74, 112] besteht nun darin, die Ersetzung (3.77) auf beliebige Wechselwirkungsstärken zu verallgemeinern. Die Legierungsparameter der MAA erhält man dann mit  $\varepsilon(\mathbf{k}) \rightarrow T_0$  aus den Quasiteilchenenergien und Gewichten (3.66)-(3.68) der

SDA:

$$\begin{aligned}
 E_{p\sigma}^{(\text{MAA})} &= \frac{1}{2} \left[ B_{-\sigma} + U + T_0 + (-)^p \sqrt{(U + B_{-\sigma} - T_0)^2 + 4Un_{-\sigma}(T_0 - B_{-\sigma})} \right], \\
 x_{1\sigma}^{(\text{MAA})} &= \frac{B_{-\sigma} + U(1 - n_{-\sigma}) - E_{1\sigma}^{(\text{MAA})}}{E_{2\sigma}^{(\text{MAA})} - E_{1\sigma}^{(\text{MAA})}}, \\
 x_{2\sigma}^{(\text{MAA})} &= 1 - x_{1\sigma}^{(\text{MAA})}.
 \end{aligned} \tag{3.78}$$

Damit hängen in der MAA die Energieniveaus  $E_{p\sigma}^{(\text{MAA})}$  und Konzentrationen  $x_{1\sigma}^{(\text{MAA})}$  nicht nur von den Modellparametern  $T_0$  und  $U$  ab, sondern auch von der Bandbesetzung  $n_{-\sigma}$  und der Bandverschiebung  $B_{-\sigma}$  (3.37). Im Grenzfall des unendlich schmalen Bandes ( $W = 0$ ) stimmen die modifizierte und die konventionelle Legierungsanalogie wegen  $B_{-\sigma}|_{W=0} = T_0$  überein. Dies gilt nicht mehr bei eingeschaltetem Hopping ( $W \neq 0$ ). Hier muß die Bandverschiebung, die für große  $U$  proportional zur kinetischen Energie der  $(-\sigma)$ -Elektronen ist, selbstkonsistent bestimmt werden. Die zugrundeliegende Legierungsanalogie ändert sich daher mit (3.78) in jedem Iterationsschritt. In diesem Sinne wird durch die Bandverschiebung das Hopping der  $(-\sigma)$ -Elektronen berücksichtigt. Im Rahmen der MAA ist die Legierungsanalogie also nicht mehr allein über den Wechselwirkungsanteil des Hamilton-Operators bestimmt, sondern es wird Information aus dem vollen System mit Hopping auf die fiktive Legierung übertragen.

In der paramagnetischen Phase sind nur relativ geringe Unterschiede zwischen MAA und AA zu erwarten. Die Verschiebung des Quasiteilchenspektrums aufgrund der Bandverschiebung wird gerade durch das unterschiedliche chemische Potential  $\mu$  ausgeglichen. Sobald aber die Bandverschiebung  $B_{-\sigma}$  für gewisse Parameter eine echte Spinabhängigkeit bekommt, können in der MAA, im Gegensatz zur AA, spontane magnetische Lösungen stabilisiert werden. Man beachte außerdem, daß die Energieniveaus und Konzentrationen der MAA über die Erwartungswerte  $n_{-\sigma}$  und  $B_{-\sigma}$  implizit temperaturabhängig sind. Es resultiert eine temperaturabhängige elektronische Struktur.

Interessant ist schließlich noch eine zweite Herleitung der modifizierten Legierungsanalogie [51]. Diese verwendet die Summenregeln (3.30), (3.31), um die Legierungsparameter  $E_{p\sigma}$  und  $x_{p\sigma}$  festzulegen. Setzt man die Hochenergieentwicklung (vgl. Kap. 3.2) der lokalen Green-Funktion ( $G_{i\sigma}(E) = \hbar \sum_{m=0}^{\infty} M_{i\sigma}^{(m)} / E^{m+1}$ ) und der Selbstenergie in der lokalen Näherung ( $\Sigma_{\sigma}(E) = \hbar \sum_{m=0}^{\infty} C_{\sigma}^{(m)} / E^m$ ) in die CPA-Gleichung (3.74) ein und entwickelt diese nach  $1/E$ , so erhält man durch Koeffizientenvergleich bis einschließlich der Ordnung  $1/E^2$ :

$$\begin{aligned}
 0 &= \sum_{p=1,2} x_{p\sigma} [E_{p\sigma} - T_0 - C_{\sigma}^{(0)}], \\
 0 &= \sum_{p=1,2} x_{p\sigma} [(E_{p\sigma} - T_0 - C_{\sigma}^{(0)})^2 M_{i\sigma}^{(0)} - C_{\sigma}^{(1)}], \\
 0 &= \sum_{p=1,2} x_{p\sigma} [(E_{p\sigma} - T_0 - C_{\sigma}^{(0)})^3 (M_{i\sigma}^{(0)})^2 + (E_{p\sigma} - T_0 - C_{\sigma}^{(0)})^2 M_{i\sigma}^{(1)} - C_{\sigma}^{(2)}].
 \end{aligned} \tag{3.79}$$

Zusammen mit der Bedingung  $x_{1\sigma} + x_{2\sigma} = 1$  liefert (3.79) nach Einsetzen der lokalen Hochenergiekoeffizienten ((3.32)-(3.35) und (3.44)-(3.46) mit  $F_{\mathbf{k}-\sigma} \equiv 0$ ) das folgende

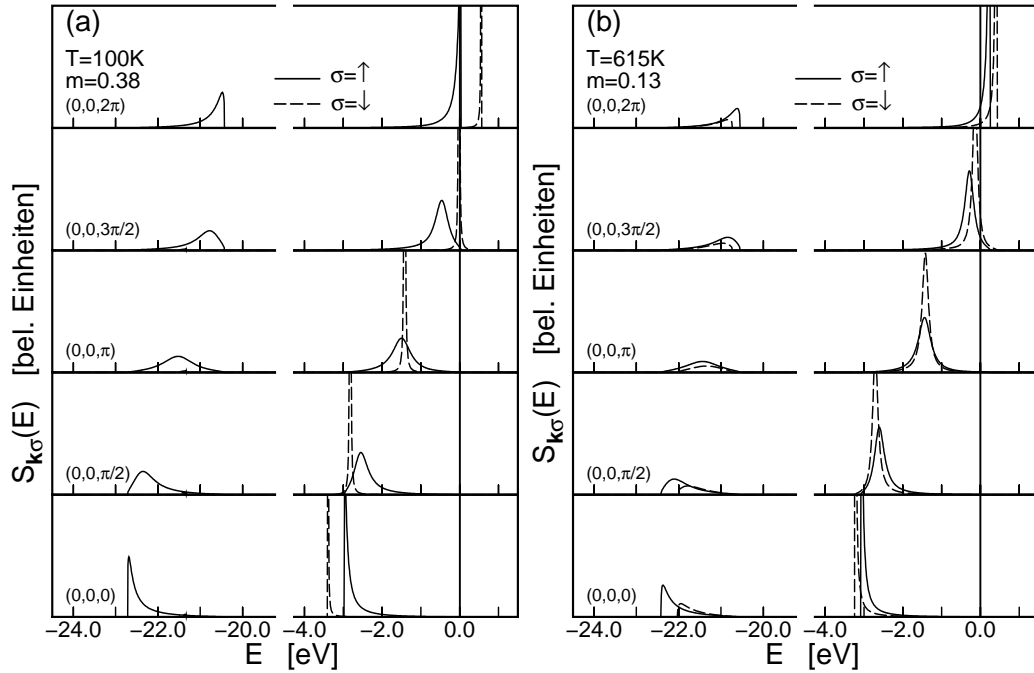
Gleichungssystem:

$$\begin{aligned}
 \sum_{p=1,2} x_{p\sigma} &= 1, \\
 \sum_{p=1,2} x_{p\sigma}(E_{p\sigma} - T_0) &= Un_{-\sigma}, \\
 \sum_{p=1,2} x_{p\sigma}(E_{p\sigma} - T_0)^2 &= U^2n_{-\sigma}, \\
 \sum_{p=1,2} x_{p\sigma}(E_{p\sigma} - T_0)^3 &= U^3n_{-\sigma} + U^2n_{-\sigma}(1 - n_{-\sigma})[B_{-\sigma} - T_0].
 \end{aligned} \tag{3.80}$$

Dadurch sind die Energieniveaus  $E_{p\sigma}$  und Konzentrationen  $x_{p\sigma}$  eindeutig bestimmt. Die Lösung dieses Gleichungssystems führt nun wiederum auf das Ergebnis (3.78). Die erste Herleitung anhand des Limes starker Korrelation macht das physikalische Konzept der MAA deutlich. Die Legierungsparameter werden selbstkonsistent über das volle System mit eingeschaltetem Hopping der Elektronen bestimmt. Die zweite Herleitung liefert in gewissem Sinne die formale Rechtfertigung des Ansatzes (3.78) für die Legierungsparameter. Die MAA verbessert die AA hinsichtlich der Summenregel für  $m = 3$ . Denn analog zur Hubbard-I-Lösung ist im vierten Moment  $M_{ii\sigma}^{(3,AA)}$  der AA der Korrekturterm  $B_{-\sigma}$  durch den Bandschwerpunkt  $T_0$  ersetzt. Es ist klar, daß ein ähnliches Konzept auch auf andere Vielteilchenprobleme anwendbar sein sollte.

Die selbstkonsistente Auswertung der MAA erfordert die Lösung von zwei ineinander verschachtelten Selbstkonsistenzschleifen: Ausgehend von Startwerten für die Bandbesetzung  $n_\sigma$  und die Bandverschiebung  $B_\sigma$  werden die Legierungsparameter (3.78) berechnet. Die Bestimmung der Selbstenergie sowie der lokalen Green-Funktion der zugehörigen fiktiven Legierung gelingt dann durch die selbstkonsistente Lösung der CPA-Gleichung (3.74), (3.75). Mit Hilfe von (3.20) und (3.41) können neue Werte für  $n_\sigma$  und  $B_\sigma$  berechnet werden. Stimmen diese nicht mit den ursprünglichen Startwerten überein, so muß das gesamte Verfahren iterativ bis zur vollständigen Selbstkonsistenz wiederholt werden (vgl. Anhang A).

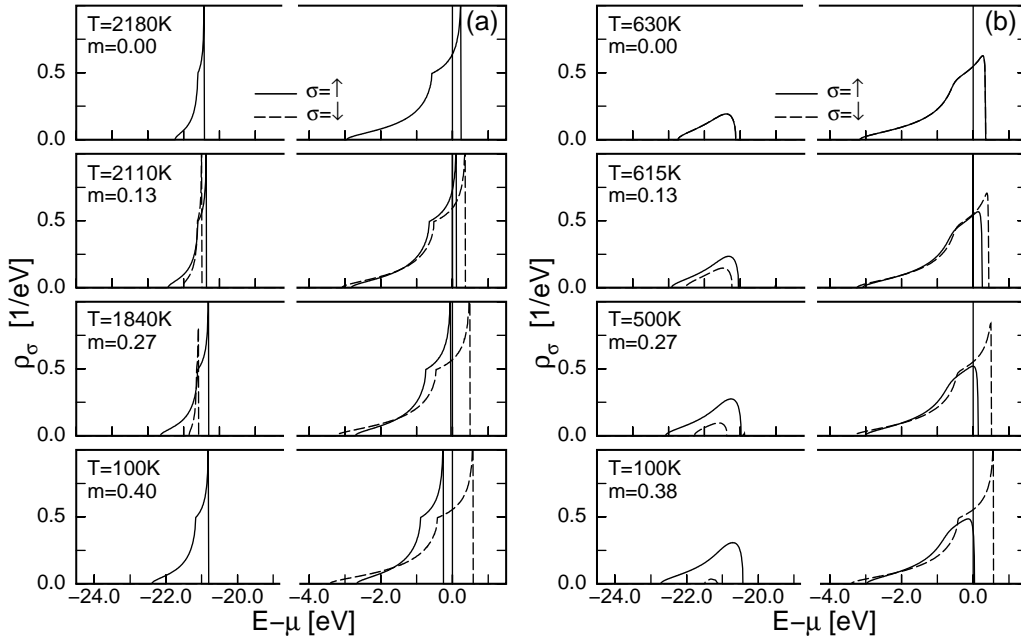
Im Gegensatz zur AA finden wir im Rahmen der MAA für gewisse Parameterbereiche spontanen Ferromagnetismus [74, 112]. In Abbildung 3.6 ist die Spektraldichte für das fcc-Gitter (BDOS wie in Abb. 3.1) in der ferromagnetischen Phase für eine Bandbesetzung von  $n = 1.6$  und eine effektive Wechselwirkung von  $U/W = 5$  abgebildet [112]. Ähnlich wie im Quasiteilchenspektrum im Rahmen der SDA treten zwei korrelationsinduzierte Bandaufspaltungen (Hubbard-Aufspaltung, Spinaufspaltung) auf. Für das hier betrachtete, mehr als halbgefüllte System liegt das chemische Potential im oberen Subband. Das untere Subband ist vollständig besetzt. Die endliche Breite der Spektraldichtepeaks resultiert aus dem endlichen Imaginärteil der Selbstenergie und ist ein Maß für die Lebensdauer der zugehörigen Quasiteilchen. Das Gewicht (Fläche) der unteren Quasiteilchenpeaks entspricht der Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein propagierendes  $(\mathbf{k}, \sigma)$ -Elektron auf einen leeren Gitterplatz trifft, während das Gewicht der oberen Peaks mit der Wahrscheinlichkeit skaliert, daß das  $(\mathbf{k}, \sigma)$ -Elektron einen Gitterplatz vorfindet, der bereits mit einem  $(-\sigma)$ -Elektron besetzt ist. Ferromagnetismus wird durch eine zusätzliche Spinaufspaltung zwischen  $(\sigma = \uparrow)$ - und  $(\sigma = \downarrow)$ -Spektrum angezeigt. Für tiefe Temperaturen ( $T = 100$  K,



**Abbildung 3.6.:** Spektraldichte  $S_{\mathbf{k}\sigma}(E)$  im Rahmen der MAA für das fcc-Gitter als Funktion der Energie  $E$  und für verschiedene, äquidistant gewählte  $\mathbf{k}$ -Punkte entlang der  $(0,0,1)$ -Richtung der 1. Brillouin-Zone. (a)  $T = 100$  K, (b)  $T = 615$  K. Weitere Parameter:  $n = 1.6$ ,  $U = 20.0$  eV,  $W = 4.0$  eV.

Abb. 3.6(a)) finden wir annähernd ferromagnetische Sättigung ( $m = 2 - n$ ). Die ( $\sigma = \uparrow$ )-Zustände sind fast vollständig besetzt. Das hat zur Folge, daß ein  $\downarrow$ -Elektron zwangsläufig an jedem Gitterplatz auf ein  $\uparrow$ -Elektron trifft und daher effektiv keinen Streuprozessen unterworfen ist. Im voll polarisierten Zustand verschwindet also im ( $\sigma = \downarrow$ )-Spektrum das untere Band und die Quasiteilchen im oberen Band haben eine unendlich lange Lebensdauer. Für höhere Temperaturen ( $T = 615$  K, Abb. 3.6(b)) nimmt die Spinasymmetrie zwischen ( $\sigma = \uparrow$ )- und ( $\sigma = \downarrow$ )-Spektrum aufgrund der verringerten Polarisation ab. Die Lebensdauer der Quasiteilchen ist stark spin- und temperaturabhängig.

Die Spinaufspaltung zwischen den ( $\sigma = \uparrow$ )- und den ( $\sigma = \downarrow$ )-Quasiteilchenpeaks der Spektraldichte ist stark vom Wellenvektor  $\mathbf{k}$  abhängig (Abb. 3.6). Der Grund dafür ist das Zusammenspiel von zwei Korrelationseffekten im Quasiteilchenspektrum. Zum einen sind die Schwerpunkte der über alle Wellenvektoren summierten Quasiteilchensubbänder des Majoritäts- und Minoritätsspektrums gegeneinander verschoben (Bandverschiebung). Zusätzlich sind die Bandbreiten der Subbänder stark spinabhängig. Dieser Bandbreiteneffekt resultiert aus einem starken spinabhängigen Transfer von spektralem Gewicht zwischen dem unteren und oberen Subband. Beide Korrelationseffekte lassen sich anhand der Ergebnisse von Harris und Lange über die grobe Struktur der Spektraldichte im Limes starker Korrelation verstehen und wurden bereits anhand des Quasiteilchenspektrums der SDA (Kap. 3.6.1, Abb. 3.5) diskutiert. Man beachte, daß die Überlagerung dieser beiden Korrelationseffekte im oberen Subband im Bereich der unteren Bandkante (d. h. für Wellenvektoren in der Nähe des  $\Gamma$ -Punktes ( $\mathbf{k} = (0,0,0)$ )) zu einer inversen

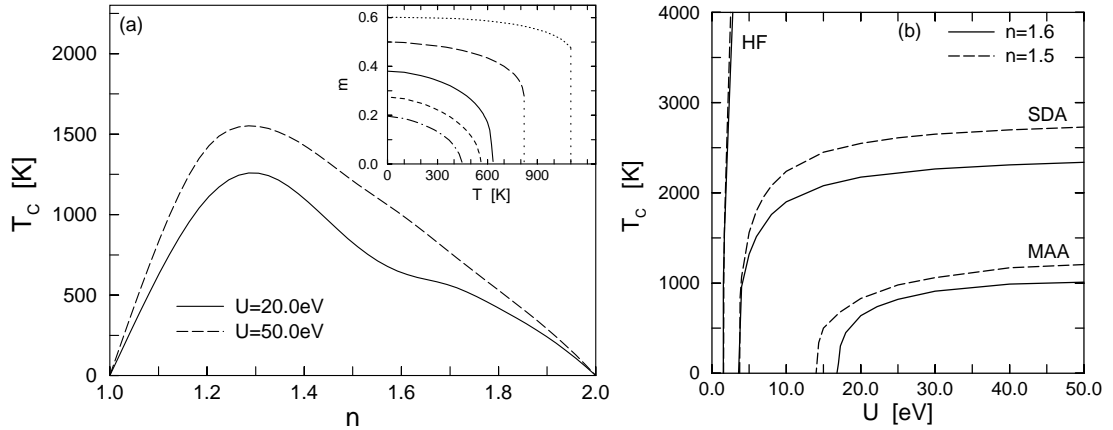


**Abbildung 3.7.:** Quasiteilchenzustandsdichte  $\rho_\sigma(E)$  für das fcc-Gitter als Funktion der Energie  $E$  und verschiedene Temperaturen  $T \leq T_C$ , (a) berechnet mit der SDA, (b) berechnet mit der MAA. Weitere Parameter:  $n = 1.6$ ,  $U = 20.0$  eV,  $W = 4.0$  eV.

Spinaufspaltung führt. Wie in Abbildung 3.6 deutlich zu sehen ist, liegt hier der ( $\sigma = \downarrow$ )-Quasiteilchenpeak energetisch tiefer als der ( $\sigma = \uparrow$ )-Quasiteilchenpeak. Die Quasiteilchendispersionen kreuzen sich als Funktion des Wellenvektors.

Die zugehörigen Quasiteilchenzustandsdichten sind für verschiedene Temperaturen  $T \leq T_C$  in Abbildung 3.7(b) abgebildet [112]. Um den Einfluß der Quasiteilchendämpfung deutlich zu machen, sind zum Vergleich für dieselben Parameter  $U/W$ ,  $n$  und  $m$  die Quasiteilchenzustandsdichten, berechnet im Rahmen der SDA, gezeigt (Abb. 3.7(a)). Qualitativ ergibt sich für beide Theorien dasselbe Bild. Aufgrund der Quasiteilchendämpfung zeigt die QDOS im Rahmen der MAA weniger scharfe Strukturen. In der MAA nimmt die Spinaufspaltung als Funktion der Temperatur schneller ab als in der SDA. Die Curie-Temperatur der MAA-Lösung ist daher gegenüber der SDA reduziert. Der Mechanismus, der zu spontanem Magnetismus führt, und insbesondere die das Temperaturverhalten dominierenden Korrelationseffekte (Bandverschiebung, Transfer von spektralem Gewicht zwischen unterem und oberem Quasiteilchensubband), sind jedoch in beiden Theorien identisch (vgl. Kapitel 3.6.1).

Quantitativ ergeben sich allerdings deutliche Unterschiede zwischen SDA und MAA für magnetische Kenngrößen wie die Curie-Temperatur  $T_C$  oder die kritische Wechselwirkungsstärke  $U_c$ , ab der Ferromagnetismus im System möglich ist. Für das fcc-Gitter finden wir eine kritische Wechselwirkungsstärke von  $U_c \approx 1.5W$  und einen magnetischen Bereich für  $U/W \gg 1$  von  $1 < n < 2$ . Die Abhängigkeit der Curie-Temperatur von der Bandbesetzung ist in Abbildung 3.8(a) für den Fall sehr starker Coulomb-Wechselwirkung ( $U/W = 5$  und  $U/W = 12.5$ ) gezeigt [112]. Für  $n > 1.5$  finden wir für die Magnetisierung als Funktion der Temperatur Phasenübergänge 2. Ordnung, während sich im Bereich  $1 < n < 1.5$  Phasenübergänge 1. Ordnung



**Abbildung 3.8.:** (a) Curie-Temperatur  $T_C$  als Funktion der Bandbesetzung  $n$  für das fcc-Gitter berechnet mit der MAA. Das Inset zeigt die Magnetisierung  $m$  als Funktion der Temperatur  $T$  für verschiedene Bandbesetzungen  $n$  (--- :  $n = 1.8$ ; - - - :  $n = 1.7$ ; — :  $n = 1.6$ ; — — :  $n = 1.5$ ; ..... :  $n = 1.4$ ). (b)  $T_C$  als Funktion der Coulomb-Wechselwirkung  $U$  berechnet mit der SDA und der MAA. Zusätzlich sind die Ergebnisse der HF-Rechnung gezeigt. Weiterer Parameter:  $W = 4.0\text{eV}$ .

ausbilden. Im Gegensatz zum fcc-Gitter ist für das bcc-Gitter Ferromagnetismus im Rahmen der MAA nur ab  $U_c \approx 2.5W$  möglich und ist zudem beschränkt auf einen sehr kleinen Bereich der Bandbesetzung [74]. Im sc-Gitter ist spontaner Ferromagnetismus sogar vollständig ausgeschlossen.

Für eine feste Bandbesetzung muß die Coulomb-Wechselwirkung einen kritischen Wert<sup>13</sup> überschreiten, damit Ferromagnetismus im System möglich ist (Abb. 3.8(b)). Als Funktion von  $U$  steigt  $T_C$  zunächst steil an, sättigt aber für große Coulomb-Wechselwirkungen auf einem endlichen Wert. Qualitativ finden wir dasselbe Verhalten im Rahmen der SDA. Bei gleicher Bandbesetzung ist der Sättigungswert der Curie-Temperatur für die konzeptionell einfachere SDA allerdings um etwa einen Faktor zwei erhöht und die kritische Wechselwirkung ist deutlich niedriger. In Abbildung 3.8 ist zum Vergleich die  $T_C(U)$ -Kurve der HF-Lösung gezeigt. Diese steigt schnell an und wächst schließlich proportional zu  $U$ . Im Gegensatz zur SDA und zur MAA zeigt die HF-Lösung kein Sättigungsverhalten im Bereich großer Wechselwirkungen.

Wir halten fest, daß die Ergebnisse der SDA und der MAA qualitativ sehr ähnlich sind. Allerdings ist im Rahmen der MAA, die Quasiteilchendämpfungseffekte berücksichtigt, der magnetische Bereich im Phasendiagramm deutlich reduziert. Im Gegensatz zur SDA haben in der MAA die spinaufgespaltenen Spektraldichtepeaks für  $\sigma = \uparrow$  und  $\sigma = \downarrow$  aufgrund ihrer endlichen Breite einen gewissen Überlapp. Im Rahmen der selbstkonsistenten Rechnung führt dieser endliche Überlapp offensichtlich zu einer Destabilisierung der ferromagnetischen Lösungen [112].

### 3.6.3. Die interpolierende Legierungsanalogie

Wir haben gesehen, daß die MAA die konventionelle Legierungsanalogie AA [98] hinsichtlich ihres Verhaltens im Grenzfall  $U \gg W$  verbessert und so die Existenz

<sup>13</sup>Die oben definierte kritische Wechselwirkung  $U_c$  entspricht gerade dem kleinsten kritischen  $U$ .

von spontanem Ferromagnetismus bei gleichzeitiger Berücksichtigung von Quasiteilchendämpfung ermöglicht. Im entgegengesetzten Grenzfall  $U \ll W$  sind allerdings sowohl die AA als auch die MAA nicht in der Lage, die Ergebnisse der Störungstheorie in  $U/W$  (3.50) zu reproduzieren. In diesem Abschnitt wird eine interpolative Legierungsanalogie vorgeschlagen, die neben dem Limes starker Korrelation und dem Grenzfall des FKM auch den Grenzfall kleiner Wechselwirkungen korrekt einschließt.

**Die Edwards-Hertz-Approximation.** Um das Verhalten der AA für kleine  $U$  zu verbessern, haben Edwards und Hertz [113] folgende interpolative Selbstenergie (EHA: Edwards-Hertz-Approximation) vorgeschlagen:

$$\Sigma_{\sigma}^{(\text{EHA})}(E) = \frac{Un_{-\sigma}}{1 - \frac{1}{\hbar}\tilde{G}_{ii\sigma}(E)[U - \Sigma_{\sigma}^{(\text{EHA})}(E)]}. \quad (3.81)$$

Die Struktur von  $\Sigma_{\sigma}^{(\text{EHA})}(E)$  ist identisch mit der CPA-Gleichung (3.74), wobei die Energieniveaus und Konzentrationen der AA (3.73) bereits eingesetzt sind. Allerdings ist die lokale Ein-Teilchen-Green-Funktion  $G_{ii\sigma}(E)$ , die in der CPA-Gleichung auftritt, durch eine modifizierte Green-Funktion  $\tilde{G}_{ii\sigma}(E)$  ersetzt:

$$\tilde{G}_{ii\sigma}(E) = \hbar \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\tilde{\rho}_{\sigma}(\omega)}{E - \omega - \Sigma_{\sigma}^{(\text{EHA})}(E) + E_{\sigma}}. \quad (3.82)$$

Dabei ist  $\tilde{\rho}_{\sigma}(E)$  über den lokalen Selbstenergiebeitrag zur zweiten Ordnung Störungstheorie  $\Sigma_{\sigma}^{(\text{SOC})}(E)$  (3.51) definiert:

$$\tilde{\rho}_{\sigma}(E) = \frac{1}{U^2 n_{-\sigma} (1 - n_{-\sigma})} \frac{-1}{\pi} \text{Im} \Sigma_{\sigma}^{(\text{SOC})}(E + i0^+). \quad (3.83)$$

Alle Erwartungswerte müssen natürlich über die „volle“ lokale Green-Funktion  $G_{ii\sigma}(E)$  (vgl. (3.75)) berechnet werden. Die Ersetzung  $G_{ii\sigma}(E) \rightarrow \tilde{G}_{ii\sigma}(E)$  wurde in [113] „ad hoc“ eingeführt und sichert im Sinne eines Interpolationsverfahrens<sup>14</sup> das korrekte Verhalten der EHA für kleine Wechselwirkungen. Wie sich leicht nachrechnen läßt [113, 114], ist (3.81) bis zur Ordnung  $U^2$  identisch mit dem Ergebnis der Störungstheorie (3.50). Für kleine Wechselwirkungen ist die EHA daher insbesondere konsistent mit dem Luttinger-Theorem [86]. Allerdings bricht das Fermi-Flüssigkeitsverhalten für  $U \approx W$  zusammen [113, 114].

Der Parameter  $E_{\sigma}$ , der sowohl in Gleichung (3.82) auftritt als auch über die Green-Funktion

$$G_{ii\sigma}^{(1)}(E) = G_{ii\sigma}^{(U=0)}(E - E_{\sigma})$$

in die Bestimmung von  $\Sigma_{\sigma}^{(\text{SOC})}(E)$  (3.51) eingeht, wurde von Wermbter und Czycholl [114] eingeführt. Dies dient dazu sicherzustellen, daß die EHA für alle Bandbesetzungen die exakte Lösung des FKM [97] sowie den Grenzfall des unendlich schmalen Bandes ( $W = 0$ ) korrekt reproduziert.  $E_{\sigma}$  wird dafür selbstkonsistent so

---

<sup>14</sup> Der interpolative Charakter verhindert allerdings eine physikalisch anschauliche Interpretation der EHA.

festgelegt, daß die Bandbesetzung  $n_\sigma^{(1)}$ , berechnet mit Hilfe von  $G_{ii\sigma}^{(1)}(E)$ , gleich der Bandbesetzung  $n_\sigma$  des vollen Systems ist:

$$\begin{aligned} n_\sigma^{(1)} &= -\frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_-(E) \text{Im} G_{ii\sigma}^{(1)}(E - \mu) \\ &\stackrel{!}{=} -\frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_-(E) \text{Im} G_{ii\sigma}(E - \mu) = n_\sigma. \end{aligned} \quad (3.84)$$

Schaltet man das Hopping der ( $\sigma = \downarrow$ )-Elektronen aus ( $\varepsilon_\downarrow(\mathbf{k}) \rightarrow T_0$ ), so folgt aus (3.83) mit (3.84) nach einer kurzen Umformung  $\tilde{\rho}_\uparrow(E) = \rho_0(E + \mu - E_\uparrow)$  und damit  $\tilde{G}_\uparrow(E) = G_\uparrow(E)$ . Die EHA ist für diesen Fall also äquivalent zur AA und reproduziert damit die exakte Lösung des FKM und insbesondere auch den Grenzfall  $W = 0$ .

Ein Schwachpunkt der EHA ist allerdings – analog zur AA – ihr Verhalten im Grenzfall starker Coulomb-Wechselwirkung. Dies läßt sich am einfachsten anhand der Hochenergieentwicklung der Selbstenergie

$$\Sigma_\sigma^{(\text{EHA})}(E) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{C_\sigma^{(m,\text{EHA})}}{E^m} \quad (3.85)$$

diskutieren. Um die Hochenergiekoeffizienten  $C_\sigma^{(m,\text{EHA})}$  zu bestimmen, benötigen wir die Hochenergieentwicklung der modifizierten Green-Funktion  $\tilde{G}_{ii\sigma}(E)$ . Entwicklung von (3.82) in  $1/E$  ergibt:

$$\frac{1}{\hbar} \tilde{G}_{ii\sigma}(E) = \frac{1}{E} + \left( B_{-\sigma}^{(1)} - \mu + U n_{-\sigma} \right) \frac{1}{E^2} + \dots \quad (3.86)$$

Dabei ist  $B_{-\sigma}^{(1)}$  gegeben durch

$$B_{-\sigma}^{(1)} = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega \tilde{\rho}_\sigma(E) + \mu - E_\sigma, \quad (3.87)$$

$$= T_0 + \frac{2n_{-\sigma}^{(1)} - 1}{n_{-\sigma}^{(1)}(1 - n_{-\sigma}^{(1)})} \sum_{ij}^{i \neq j} T_{ij} \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle^{(1)}, \quad (3.88)$$

und entspricht der Bandverschiebung  $B_{-\sigma}$ , ausgewertet<sup>15</sup> mit Hilfe der Green-Funktion  $G_{ii\sigma}^{(1)}(E)$  [75]. Dies entspricht einer Auswertung von  $B_{-\sigma}$  auf dem Niveau von Hartree-Fock. Die Koeffizienten der Hochenergieentwicklung von  $\Sigma_\sigma^{(\text{EHA})}(E)$  ergeben sich mit (3.86) zu:

$$\begin{aligned} C_\sigma^{(0,\text{EHA})} &= U n_{-\sigma}, \\ C_\sigma^{(1,\text{EHA})} &= U^2 n_{-\sigma}, \\ C_\sigma^{(3,\text{EHA})} &= U^2 n_{-\sigma} (1 - n_{-\sigma}) \left( B_{-\sigma}^{(1)} - \mu + U(1 - n_{-\sigma}) \right). \end{aligned} \quad (3.89)$$

<sup>15</sup>  $\langle \dots \rangle^{(1)}$  bezeichnet den thermodynamischen Erwartungswert, berechnet über die Green-Funktion  $G_{ii\sigma}^{(1)}(E)$ .

Analog zur AA zeigt der Vergleich mit (3.44)-(3.46), daß nur die ersten beiden Koeffizienten korrekt sind. Folglich ist die EHA für große  $U$  im Widerspruch zu den exakten Resultaten von Harris und Lange [52]. Im Gegensatz zur AA ist der Korrekturterm  $B_{-\sigma}$ , der im dritten lokalen Hochenergiekoeffizienten der Selbstenergie (vgl. (3.46)) auftritt, allerdings bereits auf Hartree-Fock-Niveau berücksichtigt.

**Die interpolative Legierungsanalogie.** Es ist wünschenswert, eine interpolative Legierungsanalogie zu finden, die alle vier Grenzfälle ( $U/W \ll 1$ ,  $U/W \gg 1$ , FKM,  $W = 0$ ) korrekt einschließt. Dies gelingt durch eine geeignete Kombination (IAA: *interpolating alloy analogy-based approximation*) der EHA mit der MAA [75].

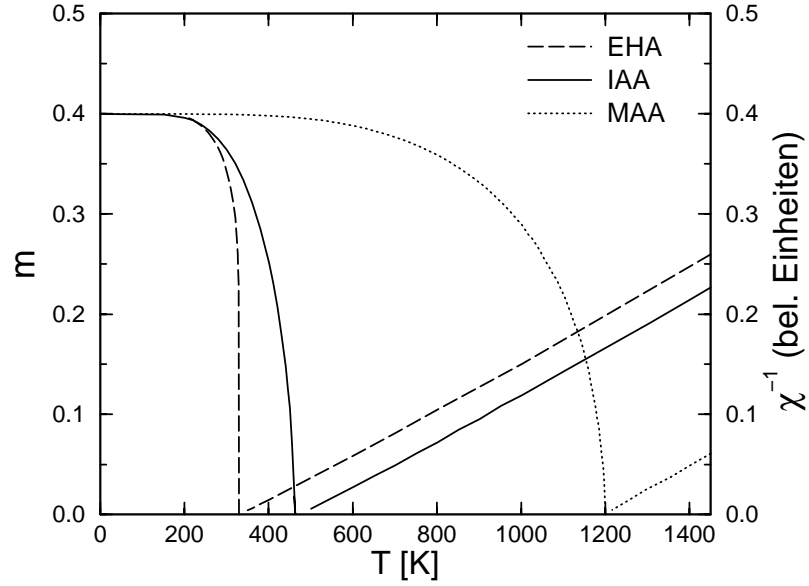
Ausgangspunkt ist die CPA-Gleichung (3.74) mit der „ad hoc“-Ersetzung  $G_{ii\sigma}(E) \rightarrow \tilde{G}_{ii\sigma}(E)$  von Edwards und Hertz. Die „Legierungsparameter“  $E_{p\sigma}$  und  $x_{p\sigma}$  ( $p = 1, 2$ ) lassen wir allerdings zunächst unbestimmt:

$$0 = \sum_{p=1,2} x_{p\sigma} \frac{E_{p\sigma} - \Sigma_{\sigma}(E) - T_0}{1 - \frac{1}{\hbar} \tilde{G}_{ii\sigma}(E)[E_{p\sigma} - \Sigma_{\sigma}(E) - T_0]}. \quad (3.90)$$

Die modifizierte Green-Funktion  $\tilde{G}_{ii\sigma}(E)$  ist analog zur EHA durch Gleichung (3.82) gegeben. Ausgehend von (3.90) gelangt man zur EHA durch Einsetzen der Legierungsparameter der AA (3.73). Der Übergang zu den Legierungsparametern der MAA (3.78) liefert jedoch keine Verbesserung in der Hochenergieentwicklung der Selbstenergie. Zudem wird dann nicht einmal mehr das Verhalten für kleine  $U$  korrekt reproduziert. Folgendes Verfahren ist dagegen erfolgreich [75]: Analog zur zweiten Herleitung der MAA (vgl. (3.79), (3.80)) können die Energieniveaus  $E_{p\sigma}$  und Konzentrationen  $x_{p\sigma}$  mit Hilfe der exakten Summenregeln (3.30) und (3.31) bestimmt werden. Die Entwicklung von (3.90) nach  $1/E$  liefert das Ergebnis (3.79), wobei die Momente  $M_{ii\sigma}^{(m)}$  durch die Momente  $\tilde{M}_{ii\sigma}^{(m)}$  (3.86) der modifizierten Green-Funktion  $\tilde{G}_{ii\sigma}(E)$  ersetzt werden müssen. Auflösen nach  $E_{p\sigma}$  und  $x_{p\sigma}$  ergibt [75]:

$$\begin{aligned} E_{p\sigma}^{(\text{IAA})} &= T_0 + \frac{1}{2}(U + B_{-\sigma} - B_{-\sigma}^{(1)}) + \\ &\quad (-)^p \sqrt{\frac{1}{4} \left( U + B_{-\sigma} - B_{-\sigma}^{(1)} \right)^2 + U n_{-\sigma} \left( B_{-\sigma}^{(1)} - B_{-\sigma} \right)}, \\ x_{1\sigma}^{(\text{IAA})} &= \frac{B_{-\sigma} - B_{-\sigma}^{(1)} + T_0 + U(1 - n_{-\sigma}) - E_{2\sigma}^{(\text{IAA})}}{E_{2\sigma}^{(\text{IAA})} - E_{1\sigma}^{(\text{IAA})}}, \\ x_{2\sigma}^{(\text{IAA})} &= 1 - x_{1\sigma}^{(\text{IAA})}. \end{aligned} \quad (3.91)$$

Die „Legierungsparameter“ (3.91) sichern automatisch das korrekte Hochenergieverhalten der Selbstenergie und der Green-Funktion und damit auch das korrekte Verhalten der IAA im Limes  $U/W \gg 1$ . Die Energieniveaus und Konzentrationen der IAA (3.91) sind leicht gegenüber der MAA (3.78) variiert. Zu den Legierungsparametern der MAA gelangt man mit der Ersetzung  $B_{-\sigma}^{(1)} \rightarrow T_0$ . Verschwindet die Differenz  $B_{-\sigma} - B_{-\sigma}^{(1)}$  in (3.91) so ergeben sich die Legierungsparameter der AA (3.73) und die IAA geht in die EHA über. Es ist leicht zu zeigen, daß sich die exakten Grenzfälle der EHA auf die IAA übertragen. Im Limes des FKM geht die IAA wegen  $B_{\downarrow} - B_{\downarrow}^{(1)} \rightarrow 0$  für  $\varepsilon_{\downarrow}(\mathbf{k}) \rightarrow T_0$  in die EHA über. Dasselbe gilt im Grenzfall



**Abbildung 3.9.:** Magnetisierung  $m$  und inverse Suszeptibilität  $\chi^{-1}$  als Funktion der Temperatur  $T$  in der EHA, IAA und MAA für das fcc-Gitter in  $D = \infty$ . Weitere Parameter:  $U = 4\text{ eV}$ ;  $n = 1.6$ ; BDOS wie in Gl. (3.92) mit  $t^* = -1\text{ eV}$ .

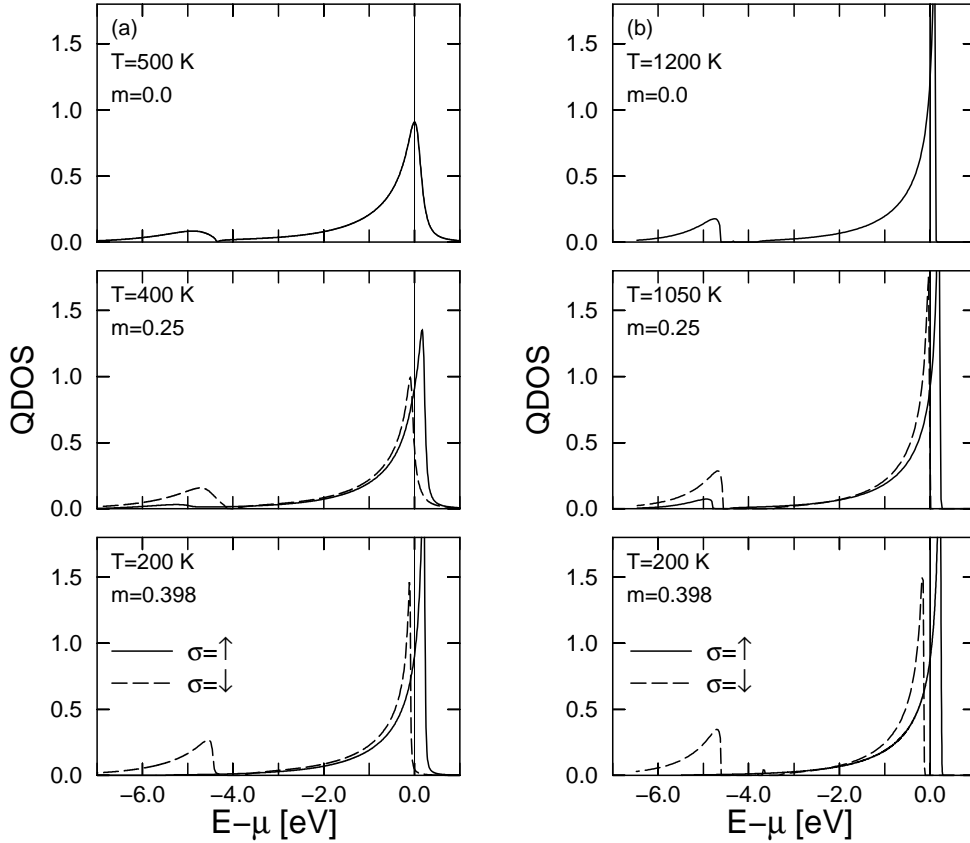
des unendlich schmalen Bandes  $W = 0$ . Auch die Ergebnisse der Störungstheorie werden von der IAA korrekt reproduziert, da die IAA bis zur Ordnung  $U^2$  mit der EHA identisch ist. In den Beweis geht ein, daß die Differenz  $B_\sigma - B_\sigma^{(1)}$  für kleine Wechselwirkungen linear mit  $U$  verschwindet [75].

In Abbildung 3.9 und 3.10 sind exemplarisch einige numerische Ergebnisse der IAA gezeigt. Eine ausführliche Diskussion der IAA für das hyperkubische Gitter und das auf unendliche Dimensionen verallgemeinerte fcc-Gitter ist in [75, 51] zu finden. Im Gegensatz zum hyperkubischen Gitter ist im fcc-Gitter in  $D = \infty$  sowohl in der IAA als auch in der EHA spontaner Ferromagnetismus möglich. Die Bloch-Zustandsdichte des nicht-bipartiten fcc-Gitters in  $D = \infty$  ist durch

$$\rho_0(E) = \frac{e^{-(1+\sqrt{2}E/t^*)/2}}{t^* \sqrt{\pi(1 + \sqrt{2}E/t^*)}} \quad (3.92)$$

gegeben [115], wobei  $|t^*| = 1\text{ eV}$  die Energieskala festlegt. Die BDOS (3.92) ist stark asymmetrisch und zeigt für  $t^* < 0$  eine wurzelartige Divergenz an der oberen Bandkante<sup>16</sup>. In Abbildung 3.9 sind die Magnetisierungskurven in der EHA und der IAA als Funktion der Temperatur für  $n = 1.6$  und  $U = 4\text{ eV}$  abgebildet [75]. Zusätzlich ist das Ergebnis der MAA-Rechnung gezeigt. Die Curie-Temperatur der IAA ist gegenüber der EHA erhöht. Das korrekte Verhalten der IAA im Limes starker Korrelation begünstigt die Stabilität von spontanem Ferromagnetismus. Der Effekt ist

<sup>16</sup> Beim Übergang  $D \rightarrow \infty$  muß die Hoppingkorrelation zwischen nächsten Nachbarn für das verallgemeinerte fcc-Gitter gemäß  $t = t^* \sqrt{z}$  reskaliert werden. Aus Gründen der Konsistenz mit den restlichen Ergebnissen wird hier  $t, t^* < 0$  angesetzt – entgegen der üblichen Konvention. Dies entspricht der Propagation von Elektronen anstatt von Löchern im Fall von  $t, t^* > 0$ . Aufgrund der Teilchen-Loch-Symmetrie des Hubbard-Modell lassen sich die Ergebnisse für Elektronen und Löcher natürlich leicht ineinander überführen.



**Abbildung 3.10.:** Quasiteilchenzustandsdichte  $\rho_\sigma(E)$  der (a) IAA und (b) MAA als Funktion der Energie  $E$  für verschiedene Temperaturen  $T \leq T_C$ . Durchgezogene Linien: Majoritätsspektrum ( $\sigma = \uparrow$ ); gestrichelte Linien: Minoritätsspektrum ( $\sigma = \downarrow$ ). Weitere Parameter:  $U = 4 \text{ eV}$ ;  $n = 1.6$ ; BDOS wie in Gl. (3.92) mit  $t^* = -1 \text{ eV}$ .

hier allerdings geringer als beim Übergang von der Hubbard I-Lösung zur SDA sowie zwischen AA und MAA. Dies liegt daran, daß im Rahmen der EHA der Korrekturterm  $B_{-\sigma}$  durch  $B_{-\sigma}^{(1)}$  bereits auf dem Niveau von Hartree-Fock berücksichtigt ist. Für  $n = 1.6$  und  $U = 4 \text{ eV}$  ist die Curie-Temperatur der IAA ( $T_C = 465 \text{ K}$ ) in sehr guter Übereinstimmung mit dem DMFT-QMC-Resultat von Ulmke ( $T_C = 455 \text{ K}$ ) [76]. Man sieht, daß die MAA dagegen die magnetische Stabilität deutlich überschätzt.

Offensichtlich ist das korrekte Verhalten im Limes schwacher Korrelation, das von der IAA reproduziert wird, durchaus von Bedeutung für die magnetische Stabilität. Der Grund für die reduzierte magnetische Stabilität in der IAA läßt sich anhand der QDOS analysieren. In Abbildung 3.10 sind die QDOS der IAA und der MAA für  $n = 1.6$  und  $U/t^* = 4$  miteinander verglichen. Trotz der quantitativ unterschiedlichen Curie-Temperatur ist das qualitative Verhalten der QDOS in beiden Theorien sehr ähnlich. Das Temperaturverhalten wird, ähnlich wie wir es in Kapitel 3.6.1 und 3.6.2 bereits diskutiert haben, durch zwei Korrelationseffekte dominiert. Eine spinabhängige Verschiebung der Schwerpunkte der Hubbard-Bänder zusammen mit einem starken spinabhängigen Transfer von spektralem Gewicht führt zu einer raschen Demagnetisierung als Funktion der Temperatur. Insbesondere bei endlichen Temperaturen sieht man, daß das Quasiteilchenspektrum der IAA gegenüber der MAA deutlich verbreitert ist. Die wurzelförmige Singularität an der oberen Band-

kante ist in der IAA stark abgeschwächt. Die Dämpfungseffekte sind in der IAA größer als in der MAA. Dies sieht man auch sehr deutlich durch einen Vergleich der Selbstenergien [51]. Die verringerte magnetische Stabilität im Rahmen der IAA läßt sich also – analog zum Übergang SDA  $\rightarrow$  MAA – durch den zunehmenden Einfluß von Quasiteilchendämpfungseffekten verstehen. Die daraus resultierende Verbreiterung der Quasiteilchenpeaks in der Spektraldichte führt zu einer Destabilisierung der magnetischen Lösungen.

### 3.6.4. Die modifizierte Störungstheorie

Es soll schließlich noch eine weitere interpolative Theorie für das Hubbard-Modell diskutiert werden, die das Konzept der Summenregeln für die Momente erfolgreich verwendet. Die modifizierte Störungstheorie (MPT: *modified perturbation theory*) interpoliert – ähnlich wie die IAA – zwischen den Grenzfällen schwacher und starker Coulomb-Wechselwirkung. Die MPT basiert auf einem interpolativen Ansatz für die Selbstenergie des SIAM. Die Anwendung der MPT auf das Hubbard-Modell verwendet daher das Konzept der DMFT, also die selbstkonsistente Abbildung des Hubbard-Modells auf das SIAM im Limes  $D = \infty$  (vgl. Kap. 3.5). Außer auf das Hubbard-Modell wurde die MPT auch mit Erfolg auf das SIAM selbst [116] und auf das Periodische Anderson-Modell [117] angewendet. Es geht hier nur darum, die generelle Idee der MPT darzustellen, für eine ausführliche Diskussion der Theorie sei auf [118, 119, 51, 116] verwiesen.

Auch für das SIAM lassen sich exakte Summenregeln für die Momente der Spektraldichte aufstellen. Die Momente und damit auch die Hochenergiekoeffizienten der Green-Funktion und der Selbstenergie ergeben sich in enger Analogie zu den entsprechenden Resultaten für das Hubbard-Modell [118, 119, 51]. Es ist bekannt, daß die Störungstheorie zweiter Ordnung um das Hartree-Fock-Niveau (SOPT-HF) für das symmetrische SIAM ( $n = 1$ ) auch im Bereich moderater Coulomb-Wechselwirkung gute Resultate liefert [120]. Dies ist – ähnlich wie für das Hubbard-Modell – dadurch zu verstehen, daß die SOPT-HF für  $n = 1$  sowohl die ersten vier Summenregeln der Momente als auch die exakte Lösung für verschwindende Hybridisierung<sup>17</sup> korrekt reproduziert. Die sogenannte *iterative Störungstheorie* (IPT: *iterative perturbation theory*) nützt diesen Vorteil der SOPT-HF im Rahmen der DMFT aus [64]. Diese positiven Eigenschaften der SOPT-HF gehen aber für  $n \neq 1$  verloren.

Um die IPT auf beliebige Bandbesetzungen zu verallgemeinern, haben Kajueter und Kotliar [121] (vgl. auch [122]) folgenden interpolativen Ansatz für die Selbstenergie des SIAM vorgeschlagen:

$$\Sigma_{\sigma}(E) = Un_{-\sigma} + \frac{a_{\sigma}\Sigma_{\sigma}^{(\text{SOC})}(E)}{1 - b_{\sigma}\Sigma_{\sigma}^{(\text{SOC})}(E)}. \quad (3.93)$$

Dabei ist  $n_{\sigma} = \langle c_{\sigma}^{\dagger}c_{\sigma} \rangle$  der Erwartungswert der Besetzungszahl am Gitterplatz der Störstelle und  $\Sigma_{\sigma}^{(\text{SOC})}(E)$  der Beitrag zweiter Ordnung der SOPT-HF für das SIAM. Für eine beliebige Wahl der Parameter  $a_{\sigma}$  und  $b_{\sigma}$  erfüllt (3.93) die ersten beiden Summenregeln ( $m = 0$  und  $m = 1$ ) der Momente [51]. Kajueter und Kotliar (KK) [121]

<sup>17</sup>Dies entspricht im Rahmen des Hubbard-Modells dem Grenzfall des unendlich schmalen Bandes ( $W = 0$ ).

bestimmen nun  $a_\sigma$  und  $b_\sigma$  so, daß zudem für beliebige Bandbesetzung die dritte Summenregel ( $m = 2$ ) sowie die Lösung im Grenzfall verschwindender Hybridisierung korrekt reproduziert werden. Für kleine Wechselwirkung ist die interpolative Selbstenergie (3.93) weiterhin identisch mit der Störungstheorie zweiter Ordnung. Die Theorie von KK steht allerdings im Widerspruch zur vierten Summenregel ( $m = 3$ ). Ähnlich wie in der EHA wird der Korrekturterm im vierten Moment, der analog zur Bandverschiebung  $B_{-\sigma}$  aufgebaut ist, nur auf Hartree-Fock-Niveau berücksichtigt [51]. Um die Theorie von KK zu verbessern bietet es sich also an, analog zu den Überlegungen der letzten Kapitel die Parameter  $a_\sigma$  und  $b_\sigma$  mit Hilfe der ersten vier Summenregeln der Momente zu bestimmen. Dieses Verfahren kann erfolgreich durchgeführt werden und führt auf die MPT [118, 119, 51]. Die MPT ist dann sowohl konsistent mit der Störungstheorie in  $U$  bis zur zweiten Ordnung als auch mit den Ergebnissen von Harris und Lange im Grenzfall starker Coulomb Wechselwirkung [118, 119]. Für Halbfüllung ( $n = 1$ ) wird die IPT reproduziert. Im Gegensatz zur IAA ist allerdings der Grenzfall des FKM in der MPT (wie auch in der Theorie von KK) nicht enthalten.

Die MPT liefert Fermi-Flüssigkeitsverhalten bei  $T = 0$  für alle Bandbesetzungen und alle Werte der Coulomb-Wechselwirkung. Das Luttinger-Theorem [86] ist für Bandbesetzungen nicht zu weit weg von Halbfüllung in sehr guter Näherung erfüllt [118, 119]. In der Zustandsdichte äußert sich dieses Niedrigenergieverhalten durch eine Kondo-artige Resonanz an der Fermikante bei tiefen Temperaturen. Im Rahmen der MPT läßt sich insbesondere das Zusammenspiel von ferromagnetischer Ordnung und Fermi-Flüssigkeitsverhalten untersuchen. Für eine ausführliche Diskussion der numerischen Ergebnisse der MPT sei auf Referenz [119] verwiesen. Die numerische Auswertung zeigt, daß im Rahmen der MPT auch in der ferromagnetischen Phase Fermi-Flüssigkeitsverhalten bei  $T = 0$  vorliegt. Die Kondo-artige Resonanz im Quasiteilchenspektrum in der Nähe des chemischen Potentials nimmt mit steigender Temperatur ab, ist jedoch bei  $T = T_C$  noch vorhanden [119]. In Bezug auf die qualitativen Eigenschaften der ferromagnetischen Lösungen scheint das Niedrigenergieverhalten bei  $\mu$  allerdings von untergeordneter Bedeutung zu sein. Für das fcc-Gitter in  $D = \infty$  sind die Curie-Temperaturen im Rahmen der MPT in sehr guter Übereinstimmung mit exakten DMFT-QMC-Resultaten [76] (vgl. auch Abb. 3.11 in Kap. 3.6.5). Die im Vergleich zur MAA reduzierte magnetische Stabilität läßt sich – ähnlich wie für die IAA – durch einen vergrößerten Einfluß der Quasiteilchendämpfung (für Energien abseits des chemischen Potentials  $\mu$ ) erklären.

#### 3.6.5. Zusammenfassung und Vergleich mit QMC-Resultaten

Wir haben in den Kapiteln 3.6.1-3.6.4 verschiedene Näherungsverfahren für das Hubbard-Modell diskutiert, die in ihrer Komplexität deutlich variieren. An dieser Stelle wollen wir die wichtigsten Gemeinsamkeiten und Unterschiede der verschiedenen Theorien hinsichtlich ihrer magnetischen Eigenschaften diskutieren. Um die Qualität der approximativen Theorien einschätzen zu können, ist insbesondere auch ein Vergleich mit exakten DMFT-QMC-Resultaten [76, 78] im Limes  $D = \infty$  interessant.

Die konzeptionelle Gemeinsamkeit der SDA, MAA, IAA und MPT liegt in ihrem

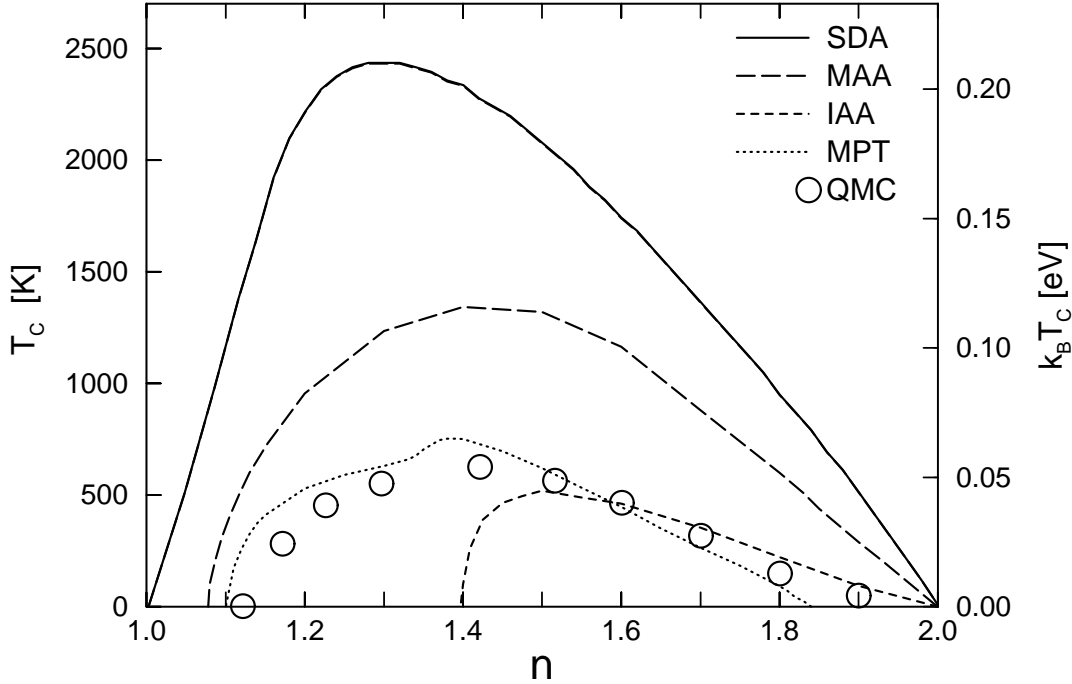
korrekten Verhalten im Limes starker Korrelation gemäß Harris und Lange<sup>18</sup> [52]. Die Resultate von Harris und Lange über die grobe Struktur der Spektraldichte (3.56)-(3.59) sind von entscheidender Bedeutung für die Stabilität und das qualitative Verhalten spontaner ferromagnetischer Lösungen im stark korrelierten Hubbard-Modell:

(i) Im Limes starker Korrelation spaltet das Quasiteilchenspektrum in ein unteres und oberes Subband auf. Stellt sich für gewisse Parameter im Rahmen der selbst-konsistenten Rechnung die Bandverschiebung  $B_{-\sigma}$  spinabhängig ein, so resultiert eine Verschiebung (Spinaufspaltung) der Schwerpunkte des ( $\sigma = \uparrow$ )- und ( $\sigma = \downarrow$ )-Spektrums der einzelnen Subbänder. Eine solche Verschiebung ist entscheidend für die Stabilität ferromagnetischer Lösungen im Hubbard-Modell. Fehlt dem System dieser zusätzliche Freiheitsgrad, so ist spontaner Ferromagnetismus nur unter sehr speziellen Bedingungen (vgl. Hubbard-I-Lösung) oder gar nicht (vgl. AA) möglich. In der EHA und der Theorie von KK ist die Bandverschiebung  $B_{-\sigma}$  bereits auf dem Niveau von Hartree-Fock berücksichtigt. Das korrekte Verhalten im Limes starker Korrelation im Rahmen der IAA und der MPT verstärkt aber auch hier deutlich die magnetische Stabilität [51].

(ii) Die spinabhängige Verschiebung der Schwerpunkte der Quasiteilchensubbänder ist für  $U/W \gg 1$  nach Harris und Lange im unteren Subband durch  $|n_{\uparrow}B_{\uparrow} - n_{\downarrow}B_{\downarrow}|$ , im oberen Subband durch  $|(1 - n_{\uparrow})B_{\uparrow} - (1 - n_{\downarrow})B_{\downarrow}|$  gegeben. Für große Wechselwirkungen ist die Bandverschiebung  $B_{-\sigma}$  proportional zur kinetischen Energie der ( $-\sigma$ )-Elektronen (vgl. (3.60)). Eine Spinabhängigkeit der kinetischen Energie der Elektronen bewirkt also eine Spinaufspaltung im Quasiteilchenspektrum. Damit ist die für spontanen Ferromagnetismus relevante Energieskala nicht etwa durch die Coulomb-Wechselwirkung  $U$ , sondern durch die kinetische Energie bzw. die Bandbreite  $W$  der BDOS gegeben. Insbesondere werden im Limes starker Korrelation die Spinaufspaltung und die Curie-Temperatur unabhängig von  $U$  und sättigen als Funktion von  $U$  auf einem endlichen Wert. Diese Überlegungen können wie folgt verdeutlicht werden: Im Hubbard-aufgespaltenen System abseits von Halbfillung liegt das chemische Potential entweder im unteren ( $n < 1$ ) oder im oberen ( $n > 1$ ) Subband. Das jeweils andere Subband ist dann entweder leer oder vollständig besetzt. Virtuelle Übergänge zwischen den Bändern werden für  $U/W \gg 1$  unterdrückt. In Bezug auf Magnetismus ist das leere bzw. besetzte Subband aber wegen des von ihm beanspruchten spektralen Gewichts weiterhin von Bedeutung. Nach Harris und Lange ist jedoch das spektrale Gewicht der Subbänder – im Gegensatz zu ihrer Position – unabhängig von  $U$ . Hier zeigt sich die Unzulänglichkeit der HF-Lösung des Hubbard-Modells für große  $U$  besonders deutlich. Im Rahmen von HF ist die Spinaufspaltung und damit auch die Curie-Temperatur für  $U \gtrsim W$  proportional zu  $U$ . Es ist bekannt, daß die HF-Lösung den magnetischen Bereich im Phasendiagramm drastisch überschätzt.

(iii) Das Temperaturverhalten der QDOS in der ferromagnetischen Phase ist im Rahmen der SDA, MAA, IAA und MPT qualitativ sehr ähnlich. Das Zusammenspiel von zwei temperaturabhängigen Korrelationseffekten führt zu einer raschen Demagnetisierung des Systems als Funktion der Temperatur: Ausgehend von

<sup>18</sup> Im Gegensatz zur SDA sind die MAA, IAA und MPT per Konstruktion lokale Theorien und reproduzieren die exakten Aussagen von Harris und Lange daher nur in der lokalen Näherung.



**Abbildung 3.11.:** Curie-Temperatur  $T_C$  als Funktion der Bandbesetzung  $n$  im Rahmen der SDA, MAA, IAA, MPT und DMFT-QMC für das fcc-Gitter in  $D = \infty$ . Die DMFT-QMC-Resultate sind aus [76] entnommen. Weitere Parameter:  $U = 4\text{ eV}$ ; BDOS wie in Gl. (3.92) mit  $t^* = -1$ .

$T = 0$  nimmt mit steigender Temperatur die Spinaufspaltung zwischen ( $\sigma = \uparrow$ )- und ( $\sigma = \downarrow$ )-Spektrum kontinuierlich ab. Dieser Effekt wird begleitet von einem starken spinabhängigen Transfer von spektralem Gewicht zwischen den oberen und unteren Subbändern. Beide Korrelationseffekte sind bereits in den Ergebnissen von Harris und Lange enthalten. Bei  $T = T_C$  verschwindet die Spinasymmetrie vollständig, wobei die Hubbard-Aufspaltung bestehen bleibt.

(iv) Eine Vielzahl von Untersuchungen an hochkorrelierten Elektronensystemen in den letzten Jahren hat gezeigt, daß eine stark asymmetrische BDOS mit einem großen spektralen Gewicht an einer der beiden Bandkanten die Stabilität von spontanem Ferromagnetismus begünstigt<sup>19</sup>. Dieses Verhalten zeigen neben Variationsrechnungen zur Stabilität des voll polarisierten Zustandes bei  $T = 0$  [68, 69, 70] auch DMFT-QMC-Rechnungen bei endlichen Temperaturen [77, 76, 78] sowie die hier vorgestellten approximativen Verfahren ( $T = 0$  und  $T \neq 0$ ) [73, 112, 75, 119, 51].

Kommen wir schließlich zum Vergleich der magnetischen Stabilität zwischen SDA, MAA, IAA und MPT. Es ist klar, daß sich über die selbstkonsistente Lösung quantitativ deutliche Unterschiede zwischen den einzelnen Theorien ergeben können. In Abbildung 3.11 ist die Curie-Temperatur für das auf  $D = \infty$  verallgemeinerte fcc-Gitter als Funktion der Bandbesetzung für die verschiedenen Theorien aufgetragen [51]. Zusätzlich sind die Resultate der DMFT-QMC-Rechnung von Ulmke [76] gezeigt. Der qualitative Kurvenverlauf ist für alle hier gezeigten Theorien sehr ähn-

<sup>19</sup> Ein hohes spektrales Gewicht an der unteren Bandkante begünstigt Ferromagnetismus für  $n < 1$ , ein hohes Gewicht an der oberen Bandkante für  $n > 1$ .

lich<sup>20</sup>. Die Curie-Temperatur verschwindet für  $n = 1$  und  $n = 2$  und hat ein Maximum zwischen  $n = 1.28$  (SDA) und  $n = 1.5$  (IAA). Außer in der MPT existieren die ferromagnetischen Lösungen für große Bandbesetzungen bis  $n = 2$ . Dies ist in Einklang mit den exakten Resultaten von Uhrig [70] im Limes  $D = \infty$ , der für  $T = 0$  die Stabilität des vollständig polarisierten Zustandes gegenüber lokalen Spin-Flip-Anregungen untersucht hat: Aufgrund der wurzelartigen Divergenz der BDOS des fcc-Gitters in  $D = \infty$  an der oberen Bandkante ist der vollständig polarisierte Zustand bis  $n = 2$  lokal stabil. Im Bereich kleiner Bandbesetzungen sieht man, daß die IAA in Bezug auf Ferromagnetismus sehr restriktiv ist. Hier sind ferromagnetische Lösungen nur für  $n > n_c = 1.4$  möglich. In der MPT und der MAA dagegen finden wir eine untere kritische Bandbesetzung von  $n_c = 1.1$  bzw.  $n_c = 1.08$  in guter Übereinstimmung mit dem DMFT-QMC-Ergebnis. Die SDA liefert magnetische Lösungen bis  $n = 1$ . Auch bei endlichen Temperaturen überschätzt die SDA die Stabilität der ferromagnetischen Lösungen. Die Curie-Temperaturen der SDA sind gegenüber den DMFT-QMC-Resultaten um etwa einen Faktor vier erhöht. Eine deutliche Verbesserung bringt die Berücksichtigung der Quasiteilchendämpfung im Rahmen der MAA. Die Verbreiterung der Quasiteilchenpeaks erhöht deren Überlapp und führt über die selbstkonsistente Rechnung zu einer Verringerung der magnetischen Stabilität. Der Einfluß der Quasiteilchendämpfung wird aber auch im Rahmen der MAA weiterhin unterschätzt [75]. Die etwas stärkeren Dämpfungseffekte in der IAA und der MPT führen auf Curie-Temperaturen, die in sehr guter Übereinstimmung mit den exakten Resultaten der DMFT-QMC-Rechnung sind.

---

<sup>20</sup> Es sei hier nur erwähnt, daß eine HF-Rechnung dagegen einen qualitativ anderen Kurvenverlauf liefert. Hier ist  $T_C$  maximal für  $n = 1$  ( $T_C \approx 10000$  K für die gleichen Parameter wie in Abb. 3.11) und fällt mit steigender Bandbesetzung kontinuierlich bis  $n = 2$  ab.



# 4. Übergang zu Systemen mit reduzierter Translationssymmetrie

## 4.1. Die Geometrie idealer Filmsysteme

In dieser Arbeit werden ausschließlich *ideale* Filme betrachtet, die aus  $d$  äquivalenten Lagen parallel zu einer Oberflächenlage aufgebaut sind. Man kann sich einen solchen idealen Film als zwischen zwei parallelen Gitterebenen eines Volumenkristalls herausgeschnitten vorstellen (vgl. Abb. 4.1). Im Inneren des Films wird die Geometrie des zugrundeliegenden Volumenkristalls beibehalten. Repräsentiert die Gitterstruktur des Volumenkristalls ein Bravais-Gitter – und dies soll hier immer der Fall sein –, so gilt dies automatisch auch für das zweidimensionale Gitter der Oberflächenlage [123]. Die Gitterplätze des Films können dann auf folgende Weise dargestellt werden:

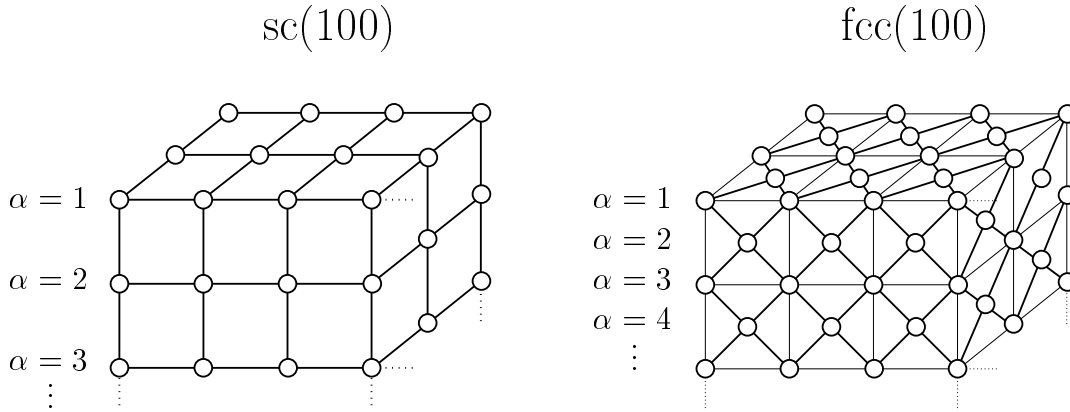
$$\mathbf{R}_{i\alpha} = \mathbf{R}_i + \mathbf{r}_\alpha. \quad (4.1)$$

Dabei ist  $\mathbf{R}_i$  ein Gittervektor des zugrundeliegenden zweidimensionalen Bravais-Gitters der Oberflächenlage mit  $N$  Gitterplätzen. Zu jedem Gittervektor  $\mathbf{R}_i$  ist eine  $d$ -atomige Basis  $\mathbf{r}_\alpha$  ( $\alpha = 1, \dots, d$ ) assoziiert, die sich auf die  $d$  Lagen des Films bezieht. Jedes der  $d \cdot N$  Atome des Films wird also eindeutig durch den Doppelindeks ( $i\alpha$ ) adressiert. Einen Volumenkristall mit Oberfläche (halbunendliches System) erhält man im Limes sehr großer Filmdicken  $d \rightarrow \infty$ . In der gesamten weiteren Arbeit beziehen sich lateinische Indizes auf die Gitterplätze innerhalb einer bestimmten Lage, während griechische Indizes die einzelnen Lagen abzählen.

Innerhalb der Lagen setzen wir im folgenden weiterhin Translationsinvarianz voraus. Wegen der reduzierten Translationssymmetrie der Filme oder des halbunendlichen Systems kann eine vollständige Translationsinvarianz dagegen nicht mehr angenommen werden. Gitterplätze aus unterschiedlichen Lagen sind im allgemeinen nicht äquivalent. Dies ist der entscheidende Unterschied zum vorangegangenen Kapitel. Erwartungswerte von Operatoren  $A_{i\alpha}$  hängen weiterhin vom Lagenindex  $\alpha$  ab:

$$\langle A_{i\alpha} \rangle = A_\alpha.$$

Aufgrund der angenommenen Translationsinvarianz innerhalb der Lagen kann für beliebige Operatoren  $A_{i\alpha}$  und  $B_{ij}^{\alpha\beta}$  eine zweidimensionale Fourier-Transformation



**Abbildung 4.1.:** Schematische Darstellung eines sc(100)- und eines fcc(100)-Films. Die dicken Linien kennzeichnen die Verbindungslinien zwischen direkt benachbarten Atomen (nächste Nachbarn).

bezüglich des Bravais-Gitters der Oberflächenlage durchgeführt werden:

$$\begin{aligned}
 A_{\mathbf{k}\alpha} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i A_{i\alpha} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} , \\
 B_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} &= \frac{1}{N} \sum_{ij} B_{ij}^{\alpha\beta} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} .
 \end{aligned} \tag{4.2}$$

Man beachte, daß hier und im folgenden  $\mathbf{k}$  immer einen zweidimensionalen Wellenvektor aus der ersten Brillouin-Zone der Oberflächenlage bezeichnet.

## 4.2. Das Vielteilchenproblem der Hubbard-Filme

Mit der Notation (4.1) lautet das Hubbard-Modell für ein Filmsystem wie folgt:

$$\mathcal{H} = \sum_{ij\alpha\beta\sigma} (T_{ij}^{\alpha\beta} - \mu\delta_{ij}^{\alpha\beta}) c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{j\beta\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\alpha\sigma} n_{i\alpha\sigma} n_{i\alpha-\sigma} . \tag{4.3}$$

Analog zum translationssymmetrischen Fall ist auch hier die zentrale Größe die retardierte Ein-Teilchen-Green-Funktion. Diese hängt für Filmsysteme zusätzlich von den Lagenindizes  $\alpha, \beta$  ab und kann als  $d \times d$  Matrix  $\hat{G}_{ij\sigma}(E)$  geschrieben werden:

$$(\hat{G}_{ij\sigma}(E))_{\alpha\beta} = G_{ij\sigma}^{\alpha\beta}(E) = \langle\langle c_{i\alpha\sigma}; c_{j\beta\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E . \tag{4.4}$$

In der Bewegungsgleichung der Film-Green-Funktion  $\hat{G}_{ij\sigma}(E)$  kann formal die Selbstenergie  $(\hat{\Sigma}_{ij\sigma}(E))_{\alpha\beta} = \Sigma_{ij\sigma}^{\alpha\beta}(E)$  des Filmsystems eingeführt werden:

$$\sum_l \left[ (E + \mu) \delta_{il} - \hat{T}_{il} - \hat{\Sigma}_{il\sigma}(E) \right] \hat{G}_{lj\sigma}(E) = \hbar \delta_{ij} . \tag{4.5}$$

Die Selbstenergie  $\hat{\Sigma}_{ij\sigma}(E)$  beinhaltet dabei alle Korrelationseffekte. Mit einer zweidimensionalen Fourier-Transformation sowie einer Matrixinversion erhält man die formale Lösung:

$$\hat{G}_{\mathbf{k}}(E) = \hbar \left[ E + \mu - \hat{T}_{\mathbf{k}} - \hat{\Sigma}_{\mathbf{k}\sigma} \right]^{-1}. \quad (4.6)$$

Dies entspricht der Verallgemeinerung des Ergebnisses (3.13) auf die Filmgeometrie. Dabei ist  $(\hat{T}_{\mathbf{k}})_{\alpha\beta} = T_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}$  die Dispersionsmatrix, die sich durch Fourier-Transformation aus den Hoppingintegralen  $T_{ij}^{\alpha\beta}$  ergibt:

$$T_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_{ij} T_{ij}^{\alpha\beta} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}. \quad (4.7)$$

Mit Hilfe der Film-Green-Funktion  $\hat{G}_{ij\sigma}(E)$  können alle für unsere Betrachtung relevanten Größen berechnet werden. Zum Beispiel ergibt sich die Ein-Teilchen-Spektraldichte elementweise aus der Green-Funktion:

$$S_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha\beta}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha\beta}(E + i0^+). \quad (4.8)$$

Die Diagonalelemente von  $G_{ij\sigma}^{\alpha\beta}(E)$  bestimmen die spin- und lagenabhängige lokale Quasiteilchenzustandsdichte (LQDOS: *local quasiparticle density of states*):

$$\rho_{\alpha\sigma}(E) = \frac{1}{N\hbar} \sum_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k}\sigma}^{\alpha\alpha}(E - \mu) = -\frac{1}{\pi\hbar} \text{Im} G_{ii\sigma}^{\alpha\alpha}(E + i0^+ - \mu). \quad (4.9)$$

$\hat{G}_{ii\sigma}(E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \hat{G}_{\mathbf{k}\sigma}(E)$  wird im weiteren auch als die *lokale* Green-Funktion des Filmsystems bezeichnet. Über die LQDOS  $\rho_{\alpha\sigma}(E)$  sind zum Beispiel mit Hilfe des Spektraltheorems die lagenabhängige Bandbesetzung,

$$n_{\alpha\sigma} = \langle n_{i\alpha\sigma} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dE f_{-}(E) \rho_{\alpha\sigma}(E), \quad (4.10)$$

und die Magnetisierung,

$$m_{\alpha} = n_{\alpha\uparrow} - n_{\alpha\downarrow}, \quad (4.11)$$

zugänglich. Die mittlere Bandbesetzung sowie die mittlere Magnetisierung des Films sind gemäß  $n = \frac{1}{d} \sum_{\alpha\sigma} n_{\alpha\sigma}$  und  $m = \frac{1}{d} \sum_{\alpha} m_{\alpha}$  definiert. Für die innere Energie  $E_0 = \langle \mathcal{H} \rangle / (Nd)$  der Hubbard-Filme ergibt eine zu (3.27) analoge Rechnung:

$$E_0 = -\frac{1}{2Nd\hbar} \sum_{\mathbf{k}\alpha\beta\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_{-}(E) [E\delta^{\alpha\beta} + T_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}] S_{\mathbf{k}\sigma}^{\beta\alpha}(E - \mu). \quad (4.12)$$

Bevor in Kapitel 4.4 geeignete Näherungsverfahren für die Film-Green-Funktion bzw. die Selbstenergie diskutiert werden, ist es instruktiv, zunächst den Fall wechselwirkungsfreier Filme (kinetischer Anteil in (4.3)) genauer zu untersuchen. So kann an einem einfachen Beispiel der Übergang zu einer Filmgeometrie veranschaulicht werden.

### 4.3. Wechselwirkungsfreie Filme

Die Hoppingintegrale  $T_{ij}^{\alpha\beta}$ , die den kinetischen Anteil der Hubbard-Filme festlegen, sind im Prinzip frei wählbar und können insbesondere auch lagenabhängig angesetzt werden. Wir wollen im folgenden einen einfachen Spezialfall diskutieren. Eine Verallgemeinerung ist jedoch leicht möglich. In dieser Arbeit werden ausschließlich Filme mit niedrig indizierten Oberflächenlagen, basierend auf den kubischen Kristallen sc, bcc und fcc, betrachtet. In Tabelle 4.1 sind verschiedene Filmgeometrien zusammen mit den zugehörigen Koordinationszahlen aufgeführt. Im folgenden bezeichnet  $z_{\parallel}$  die Zahl der nächsten Nachbarn in derselben Lage,  $z_{\perp}$  die Zahl der nächsten Nachbarn in den direkt angrenzenden Lagen und  $z_s$  die Oberflächenkoordinationszahl. Außerdem beschränken wir uns hier auf Hopping nur zwischen nächsten Nachbarn und auf solche Filmgeometrien, in denen sich alle nächsten Nachbarn eines Atoms  $R_{i\alpha}$  in derselben oder in den direkt angrenzenden Lagen befinden (dann gilt:  $z_s = z_{\parallel} + z_{\perp}$  und  $z = z_{\parallel} + 2z_{\perp}$ ). Die Dispersionen  $T_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}$  lassen sich in diesem Fall schreiben als

$$T_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} \equiv \begin{cases} T_{0\alpha} + t\gamma_{\parallel}(\mathbf{k}), & \alpha = \beta \\ t\gamma_{\perp}(\mathbf{k}), & \alpha = \beta - 1 \\ t\gamma_{\perp}^*(\mathbf{k}), & \alpha = \beta + 1. \end{cases} \quad (4.13)$$

Die Dispersionsmatrix  $\hat{T}_{\mathbf{k}}$  ist folglich tridiagonal:

$$\hat{T}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} T_{01} + t\gamma_{\parallel}(\mathbf{k}) & t\gamma_{\perp}(\mathbf{k}) & 0 \\ t\gamma_{\perp}^*(\mathbf{k}) & T_{02} + t\gamma_{\parallel}(\mathbf{k}) & t\gamma_{\perp}(\mathbf{k}) \\ 0 & t\gamma_{\perp}^*(\mathbf{k}) & \ddots \\ & & & T_{0d} + t\gamma_{\parallel}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (4.14)$$

Das reelle Hoppingintegral  $t$  ( $t < 0$ ) zwischen nächsten Nachbarn ist in (4.13) und (4.14) uniform für den gesamten Film angesetzt.  $T_{0\alpha} = T_{ii}^{\alpha\alpha}$  bezeichnet den Schwerpunkt der Dispersion der einzelnen Lagen. Die Dispersionen  $\gamma_{\parallel}(\mathbf{k})$  und  $\gamma_{\perp}(\mathbf{k})$  lassen sich bei gegebener Filmgeometrie mit Hilfe der Transformation (4.7) bestimmen. In die Rechnung gehen die Einheitsvektoren des zweidimensionalen Bravaisgitters der Oberflächenlage sowie der Einheitsvektor der Basis  $\mathbf{r}_{\alpha}$  ein. Details dazu können im Anhang C nachgelesen werden.

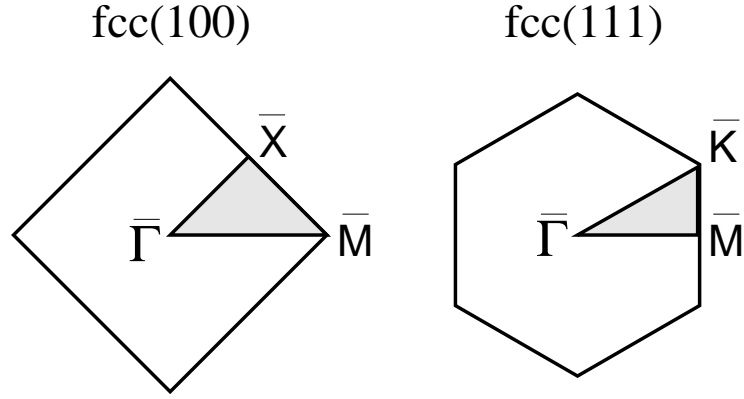
Wir wollen die beiden fcc-artigen Filmgeometrien fcc(100) und fcc(111) genauer diskutieren. Die Dispersionen  $\gamma_{\parallel}(\mathbf{k})$  und  $\gamma_{\perp}(\mathbf{k})$  lauten für die fcc(100)-Filmstruktur:

$$\begin{aligned} \gamma_{\parallel}^{\text{fcc}(100)}(\mathbf{k}) &= 2[\cos((k_x + k_y)/2) + \cos((k_x - k_y)/2)], \\ \gamma_{\perp}^{\text{fcc}(100)}(\mathbf{k}) &= 1 + e^{-i(k_x + k_y)/2} + e^{-i(k_x - k_y)/2} + e^{-ik_x}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Für die fcc(111)-Filmstruktur erhält man:

$$\begin{aligned} \gamma_{\parallel}^{\text{fcc}(111)}(\mathbf{k}) &= 2[\cos(\sqrt{3/8}k_x + \sqrt{1/8}k_y) + \\ &\quad \cos(\sqrt{3/8}k_x - \sqrt{1/8}k_y) + \cos(\sqrt{1/2}k_y)], \\ \gamma_{\perp}^{\text{fcc}(111)}(\mathbf{k}) &= 1 + e^{-i(\sqrt{3/8}k_x + \sqrt{1/8}k_y)} + e^{-i(\sqrt{3/8}k_x - \sqrt{1/8}k_y)}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Hier wurde die Gitterkonstante  $a = 1$  gesetzt. Die zugehörigen Brillouin-Zonen der Oberflächenlage sind in Abbildung 4.2 gezeigt. Für die anderen in der Tabelle 4.1



**Abbildung 4.2.:** Erste Brillouin-Zone der Oberflächenlage für die beiden fcc-artigen Filmstrukturen fcc(100) und fcc(111). Der irreduzible Bereich der Brillouin-Zone ist schattiert dargestellt. Die angezeigten Hochsymmetriepunkte sind gegeben durch: fcc(100):  $\bar{\Gamma} = (0, 0)$ ,  $\bar{M} = (2\pi, 0)$ ,  $\bar{X} = (\pi, \pi)$ ; fcc(111):  $\bar{\Gamma} = (0, 0)$ ,  $\bar{M} = (2\pi\sqrt{2/3}, 0)$ ,  $\bar{K} = (2\pi\sqrt{2/3}, 2\pi\sqrt{2/3})$ ; für die Wahl der Koordinatenachsen siehe Anhang C.

aufgeführten Filmstrukturen sind die entsprechenden Dispersionen im Anhang C angegeben.

Die lagen aufgelöste lokale Bloch-Zustandsdichte (LBDOS: *local Bloch density of states*) des wechselwirkungsfreien Systems ergibt sich unter Verwendung von (4.6), (4.8) und (4.9) mit  $\hat{\Sigma}_{\mathbf{k}\sigma} \equiv 0$  aus der Dispersionsmatrix  $\hat{T}_{\mathbf{k}}$  gemäß

$$\rho_{0\alpha}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left( \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left( E + i0^+ - \hat{T}_{\mathbf{k}} \right)^{-1} \right)_{\alpha\alpha}. \quad (4.17)$$

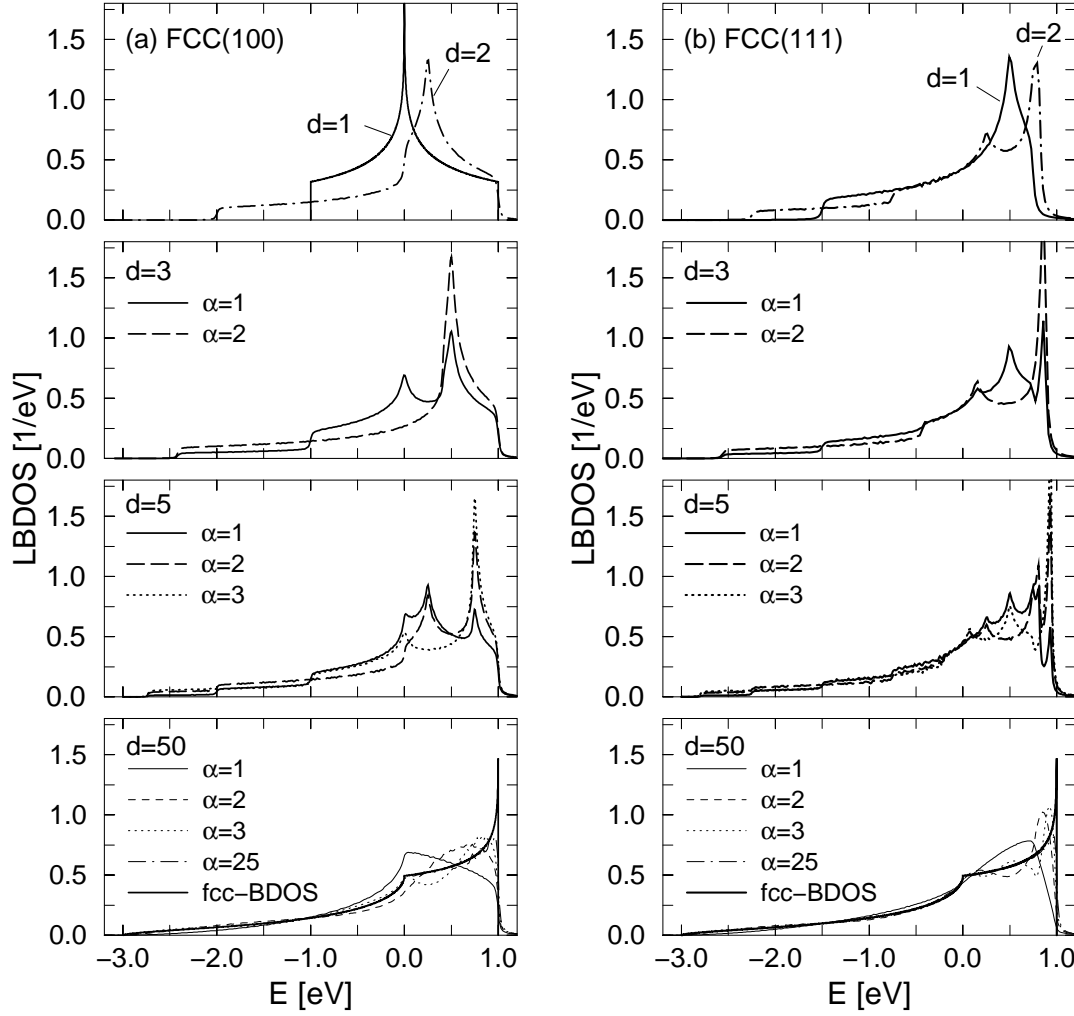
Die LBDOS muß numerisch berechnet werden. Dies erfordert die explizite Durchführung der zweidimensionalen  $\mathbf{k}$ -Summation in (4.17). Für die fcc(100)- und die fcc(111)-Filmgeometrien sind die LBDOS bei Hopping zwischen nächsten Nachbarn in Abb. 4.3 für verschiedene Filmdicken gezeigt. Sie sind stark asymmetrisch<sup>1</sup> und zeigen eine deutliche Lagenabhängigkeit für  $d \geq 3$ . Für  $d \rightarrow \infty$  geht die LBDOS der inneren Lagen in die Tight-Binding-Zustandsdichte des dreidimensionalen fcc-Gitters über (vgl. Abb. 3.1). Die Bandbreite der LBDOS ist lagenunabhängig und für endliche Filmdicken immer kleiner als die Bandbreite  $W$  der BDOS des zugehörigen Volumenkristalls.

Für die spätere Diskussion ist eine Charakterisierung der LBDOS anhand einer Momentenanalyse von Bedeutung. Die Schwerpunkte der LBDOS der einzelnen Lagen sind durch  $T_{0\alpha}$  gegeben. Die höheren (zentralen) Momente  $\Delta_{\alpha}^{(m)}$  ( $m = 2, 3, \dots$ ) werden dann wie folgt definiert:

$$\Delta_{\alpha}^{(m)} = \int_{-\infty}^{\infty} dE (E - T_{0\alpha})^m \rho_{0\alpha}(E). \quad (4.18)$$

Das zweite und dritte Moment ( $\Delta_{\alpha}^{(2)}$ : Varianz;  $\Delta_{\alpha}^{(3)}$ : Asymmetrie) der LBDOS sind für verschiedene Filmstrukturen für den Fall uniformer Bandschwerpunkte in der

<sup>1</sup>außer für eine Monolage fcc(100), die äquivalent zu einem zweidimensionalen Quadratgitter ist.



**Abbildung 4.3.:** Lagenabhängige Bloch-Zustandsdichte  $\rho_{0\alpha}(E)$  (LBDOS) der (a) fcc(100)- und (b) fcc(111)-Filmgeometrie für die Filmdicken  $d = 1, 2, 3, 5$  und  $50$ .  $\alpha = 1$  bezeichnet die Oberflächenlage. Die LBDOS ist symmetrisch zur mittleren Lage. Im Fall des halbumendlichen Systems ( $d = 50$ ) sind die äußere drei Lagen, die zentrale Lage und die BDOS des dreidimensionalen fcc-Gitters aufgetragen. Weitere Parameter:  $t = -0.25$  eV;  $T_{0\alpha} = 0$ ;  $W = 4.0$  eV.

Tabelle 4.1 angegeben. Wir stellen fest, daß für alle betrachteten Filmgeometrien die Varianz der LBDOS der Oberflächenlage im Vergleich zu den inneren Lagen reduziert ist ( $\Delta_s^{(2)} < \Delta_b^{(2)}$ ). Diese Reduktion folgt direkt aus der verringerten Koordinationszahl der Atome an der Oberfläche ( $z_s < z$ ). Die Wurzel aus der Varianz ( $\sqrt{\Delta_s^{(2)}}$ ) ist ein Maß für die effektive Bandbreite der LBDOS. Man beachte, daß für die fcc-artigen Filme zudem auch die Asymmetrie der LBDOS der Oberflächenlage deutlich kleiner ist als im Inneren der Filme ( $\Delta_s^{(3)} < \Delta_b^{(3)}$ ). Sowohl die Reduktion der Varianz als auch der Asymmetrie ist stärker für die fcc(100)- als für die fcc(111)-Filmgeometrie. Dies liegt daran, daß in der fcc(100)-Struktur an der Oberfläche mehr nächste Nachbarn fehlen als für fcc(111). Man spricht von einer *offeneren* Filmgeometrie.

Im Fall verschwindender Wechselwirkung ( $U = 0$ ) läßt sich das Filmsystem

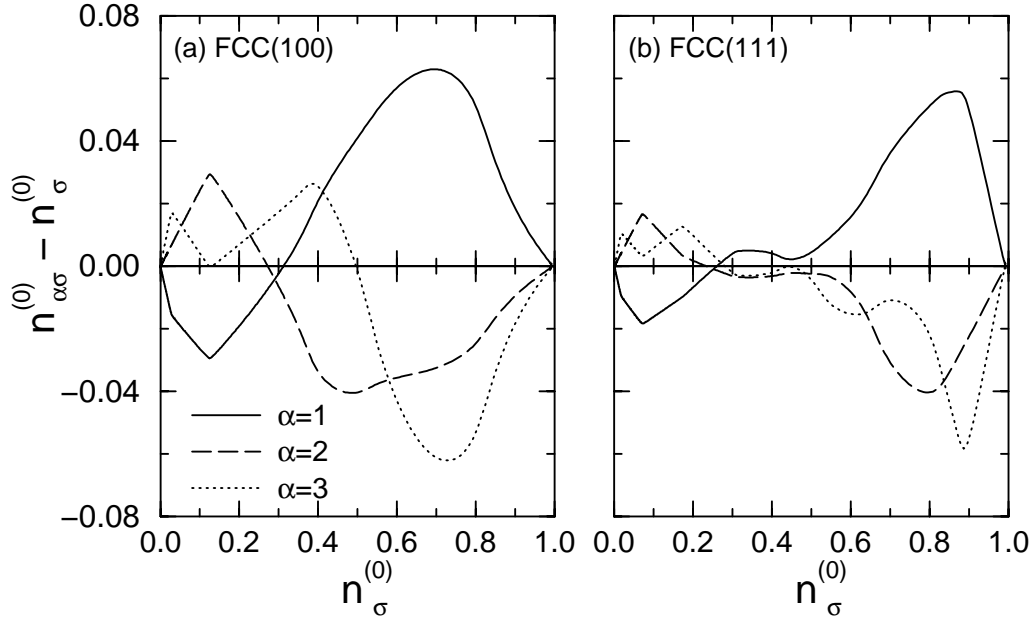
**Tabelle 4.1.:** Koordinationszahlen  $z$  für die drei kubischen Gitter sc, bcc und fcc und für verschiedene niedrig indizierte Filmgeometrien. Für die Filmsysteme bezeichnet  $z_{\parallel}$  die Zahl der nächsten Nachbarn innerhalb derselben Lage und  $z_{\perp}$  die Zahl der nächsten Nachbarn in den direkt angrenzenden Lagen.  $W$  ist die Bandbreite der BDOS des Volumenkristalls und  $t < 0$  das Hoppingintegral zwischen nächsten Nachbarn. Die Momente  $\Delta_{\alpha}^{(2)}$  und  $\Delta_{\alpha}^{(3)}$  der LBDOS sind in (4.18) definiert.  $\Delta_s^{(m)}$  bezeichnet die Momente der Oberflächenlage ( $\alpha = 1, d$ ) und  $\Delta_b^{(m)}$  die des Volumenkristalls sowie der inneren Lagen ( $2 \leq \alpha \leq d-1$ ) der Filme. Die angegebenen Momente beziehen sich auf den Fall uniformer Bandschwerpunkte ( $T_{0\alpha}$  unabhängig von  $\alpha$ ).

Volumen	sc			bcc		fcc	
$z$	6			8		12	
$W/ t $	12			16		16	
$\Delta_b^{(2)}/ t ^2$	6			8		12	
$\Delta_b^{(3)}/ t ^3$	0			0		-48	
Film	(100)	(110)	(111)	(100)	(110)	(100)	(111)
+1 $z_{\perp}$	1	2	3	4	2	4	3
0 $z_{\parallel}$	4	2	-	-	4	4	6
-1 $z_{\perp}$	1	2	3	4	2	4	3
$\Delta_s^{(2)}/ t ^2$	5	4	3	4	6	8	9
$\Delta_s^{(3)}/ t ^3$	0	0	0	0	0	-24	-30
$\Delta_s^{(2)}/\Delta_b^{(2)}$	0.833	0.677	0.500	0.500	0.750	0.667	0.750
$\Delta_s^{(3)}/\Delta_b^{(3)}$	-	-	-	-	-	0.5	0.625

natürlich exakt lösen. Es ist interessant, die lagenabhängigen Bandbesetzungen  $n_{\alpha\sigma}^{(0)}$  der wechselwirkungsfreien Filme genauer zu untersuchen. Diese ergeben sich im Grundzustand durch Auffüllen der LBDOS (4.17) mit Elektronen bis zum chemischen Potential  $\mu$ :

$$n_{\alpha\sigma}^{(0)} = \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_{-}(E) \rho_{0\alpha}(E).$$

Aufgrund der Lagenabhängigkeit der LBDOS weichen die Besetzungszahlen  $n_{\alpha\sigma}^{(0)}$  im allgemeinen von der mittleren Besetzungszahl pro Spinband  $n_{\sigma}^{(0)} = \frac{1}{d} \sum_{\alpha} n_{\alpha\sigma}^{(0)}$  ab. In Abbildung 4.4 ist die Differenz  $n_{\alpha\sigma}^{(0)} - n_{\sigma}^{(0)}$  als Funktion der mittleren Besetzungszahl  $n_{\sigma}^{(0)}$  exemplarisch für einen fcc(100)- und einen fcc(111)-Film der Dicke  $d = 5$  gezeigt. Der Ladungstransfer zwischen den Lagen des Films ist stärker für die offenere Filmstruktur fcc(100) und kann für kleine  $n_{\sigma}^{(0)}$  sogar bis zu 25% betragen. Die Kurvenverläufe in Abbildung 4.4 lassen sich qualitativ mit Hilfe der Momentenanalyse der LBDOS (Tabelle 4.1) verstehen. Aufgrund der reduzierten Varianz an der Oberfläche ist die Bandbesetzung der äußeren Lage  $n_{1\sigma}^{(0)}$  für kleine Bandbesetzungen im Vergleich zu den inneren Lagen verringert ( $n_{\alpha\sigma}^{(0)} - n_{\sigma}^{(0)} < 0$ ), für große Bandbesetzungen dagegen erhöht ( $n_{\alpha\sigma}^{(0)} - n_{\sigma}^{(0)} > 0$ ). Die Asymmetrie dieser beiden Bereiche als Funktion von  $n_{\sigma}^{(0)}$  (Abb. 4.4) resultiert aus der Asymmetrie der LBDOS. Ein ähnliches Bild finden wir auch für ein halbumendliches System (Abb. 4.5). Der



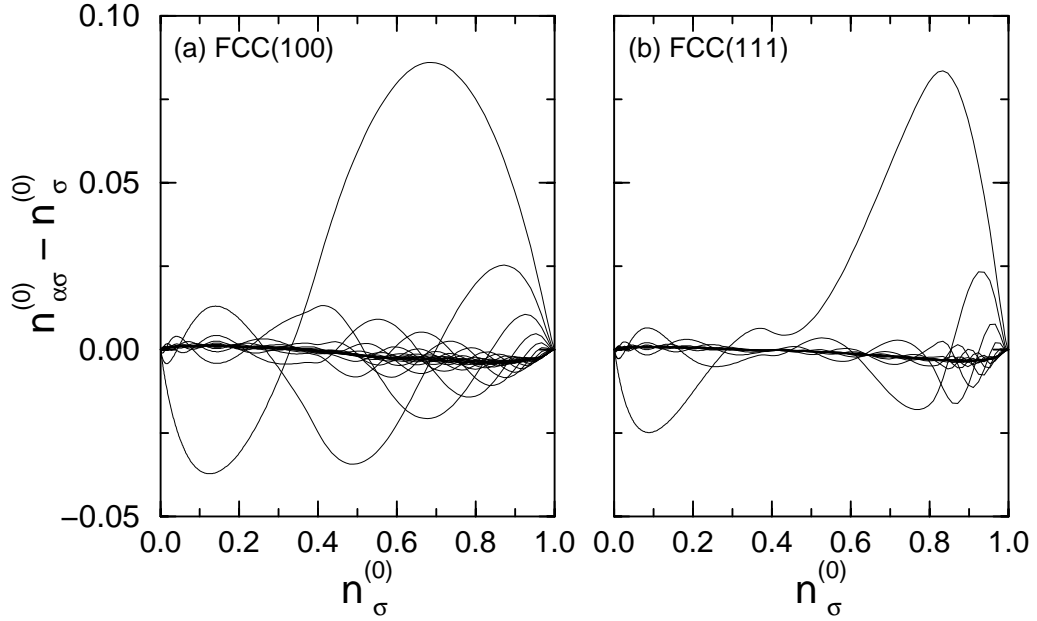
**Abbildung 4.4.:** Abweichung der Lagenbesetzung  $n_{\alpha\sigma}^{(0)}$  von der mittleren Besetzungszahl  $n_{\sigma}^{(0)}$  (Ladungstransfer) als Funktion von  $n_{\sigma}^{(0)}$  für einen 5-lagigen (a) fcc(100)- und (b) fcc(111)-Film. Weitere Parameter:  $U = 0$ ;  $T = 0$ ;  $T_{0\alpha} = 0$ .

Ladungstransfer nimmt mit steigendem Lagenindex  $\alpha$  schnell ab. Im Fall der offeneren (100)-Oberfläche konvergieren die Lagenbesetzungen  $n_{\alpha\sigma}^{(0)}$  langsamer gegen die mittlere Besetzungszahl pro Spinband  $n_{\sigma}^{(0)}$  als für die (111)-Oberfläche.

Eine Gleichverteilung der Ladungen („Ladungsneutralität“)

$$n_{\alpha}^{(0)} = \sum_{\sigma} n_{\alpha\sigma}^{(0)} \stackrel{!}{=} n^{(0)}, \quad \forall \alpha \quad (4.19)$$

kann – für feste mittlere Bandbesetzung oder festes chemisches Potential – durch eine geeignete Verschiebung der Bandschwerpunkte  $T_{0\alpha}$  erreicht werden. Dadurch ändern sich natürlich auch die zugehörigen lokalen Bloch-Zustandsdichten sowie deren Momente. Einige Autoren fordern in ihren Rechnungen zu Filmsystemen oder Systemen mit Oberfläche explizit die Einhaltung der Ladungsneutralität [124, 41, 42]. Um die hier vorgestellten Theorien konzeptionell einfach zu halten, werden wir im folgenden dagegen mit uniformen Bandschwerpunkten  $T_{0\alpha} = 0$  ( $\forall \alpha$ ) rechnen und somit Ladungstransfer zwischen den Lagen zulassen. Allerdings kann es an einigen Stellen sinnvoll sein, zum Vergleich auch Rechnungen mit erzwungener Ladungsneutralität durchzuführen. So kann man in Zweifelsfällen unterscheiden, ob ein beobachteter Effekt durch elektronische Korrelationen oder etwa allein durch Ladungstransfereffekte hervorgerufen wird.



**Abbildung 4.5.:** Abweichung der Lagenbesetzung  $n_{\alpha\sigma}^{(0)}$  von der mittleren Besetzungszahl  $n_{\sigma}^{(0)}$  (Ladungstransfer) als Funktion von  $n_{\sigma}^{(0)}$  für ein halbbunendliches fcc-Gitter mit einer (a) (100)- und (b) (111)-Oberfläche. Der Lagenindex  $\alpha$  nimmt von außen nach innen zu. Weitere Parameter:  $U = 0$ ;  $T = 0$ ;  $T_{0\alpha} = 0$ ;  $d = 50$ .

## 4.4. Approximative Theorien für Hubbard-Filme

Das Ziel dieses Kapitels ist es, geeignete Approximationsverfahren für das Hubbard-Modell mit einer Filmgeometrie zu finden. Aufgrund der gebrochenen Translations-symmetrie der Filmsysteme wird die Lösung des nicht-trivialen Vielteilchenproblems des Hubbard-Modells noch erheblich erschwert. Um die Hubbard-Filme im Detail zu untersuchen, benötigen wir daher möglichst einfache Approximationsverfahren. Allerdings sollen Korrelationseffekte auf einem deutlich höheren Niveau als in der Hartree-Fock-Näherung, die bereits auf Hubbard-Filme angewendet wurde [50, 80], berücksichtigt werden. Ähnlich wie im translationssymmetrischen Fall sind wir im Hinblick auf spontanen Ferromagnetismus an einer korrekten Beschreibung des Grenzfalles starker Coulomb-Wechselwirkung ( $U \gg W$ ) interessiert. Es ist daher sinnvoll, sich an den in Kapitel 3 vorgestellten Approximationsverfahren zu orientieren. Im folgenden soll eine Methode vorgestellt werden, die es erlaubt, die Näherungsmethoden für das translationssymmetrische Hubbard-Modell in einfacher Weise auf die Behandlung von Filmsystemen zu verallgemeinern. Von zentraler Bedeutung sind auch hier die Summenregeln der Momente, die sich über die Hochenergieentwicklung der Film-Green-Funktion oder der Film-Selbstenergie überprüfen lassen. Sowohl für die SDA als auch die MAA wird in diesem Kapitel die Verallgemeinerung auf Filmsysteme explizit durchgeführt.

**Die lokale Näherung für Hubbard-Filme.** Um das Vielteilchenproblem der Hubbard-Filme zu vereinfachen, verwenden wir zunächst die lokale Näherung für

die Film-Selbstenergie:

$$\Sigma_{ij\sigma}^{\alpha\beta}(E) \longrightarrow \delta_{\alpha\beta}\delta_{ij}\Sigma_{\alpha\sigma}(E). \quad (4.20)$$

Die Selbstenergiematrix  $\hat{\Sigma}_{\mathbf{k}\sigma}$  wird dadurch diagonal. Die lokale Näherung ist exakt für den Grenzfall großer Koordinationszahl  $z$  ( $D \rightarrow \infty$ , vgl. Kap. 3.5) und wird allgemein als ein vernünftiger Ansatz für die Beschreibung korrelierter Elektronensysteme in  $D = 3$  [125, 65] und sogar in  $D = 2$  [126, 127] angesehen.

In der lokalen Näherung ergibt sich die Green-Funktion des Filmsystems zu:

$$\hat{G}_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \hbar \begin{pmatrix} E + \mu - T_{\mathbf{k}}^{11} - \Sigma_{1\sigma}(E) & -T_{\mathbf{k}}^{12} & \dots \\ -T_{\mathbf{k}}^{21} & E + \mu - T_{\mathbf{k}}^{22} - \Sigma_{2\sigma}(E) & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}^{-1}, \quad (4.21)$$

$$\hat{G}_{i\sigma}(E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \hat{G}_{\mathbf{k}\sigma}(E). \quad (4.22)$$

Mit (4.20) läßt sich zum Beispiel die innere Energie des Filmsystems (4.12), ähnlich wie im Fall des translationssymmetrischen Systems, vereinfachen:

$$E_0 = -\frac{1}{\pi d\hbar} \text{Im} \sum_{\alpha\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_{-}(E) \left[ \left( E - \frac{1}{2} \Sigma_{\alpha\sigma}(E - \mu) \right) G_{i\sigma}^{\alpha\alpha}(E - \mu) - \hbar \right]. \quad (4.23)$$

Die Rechnung dazu verläuft analog zu (3.28).

Es ist klar, daß die lokale Näherung langreichweitige Spinfluktuationen bzw. Spinwellen-artige Anregungen, die gerade für die hier betrachteten Filmsysteme wichtig werden können, vernachlässigt. In dieser Beziehung ist die lokale Näherung für das Hubbard-Modell äquivalent zur konventionellen Mean-Field-Näherung für das Heisenberg-Modell. Insbesondere wird eine Theorie für das Hubbard-Modell, die die lokale Näherung verwendet, nicht in der Lage sein, das Mermin-Wagner-Theorem [8] zu reproduzieren. Das Mermin-Wagner-Theorem, angewendet auf das Hubbard-Modell [9, 53], verbietet bei endlichen Temperaturen spontane magnetische Ordnung in einer und zwei Dimensionen. Um diesen Punkt zu verdeutlichen, betrachten wir noch einmal das translationssymmetrische Hubbard-Modell. In einer „lokalen“ Theorie geht die Bloch-Dispersion  $\varepsilon(\mathbf{k})$  und damit auch die Dimension des Systems effektiv nur über die Bloch-Zustandsdichte  $\rho_0(E)$  ein. Für eine geeignete Wahl der Hoppingparameter  $T_{ij}$  kann man nun unabhängig von der Dimension beliebige BDOS – insbesondere auch beliebig stark asymmetrische BDOS – konstruieren. Im Rahmen der lokalen Näherung exakte DMFT-QMC-Rechnungen mit Modell-Zustandsdichten [78] zeigen aber, daß eine starke Asymmetrie der BDOS zusammen mit einer großen Coulomb-Wechselwirkung ausreicht, um spontanen Ferromagnetismus bei endlichen Temperaturen zu ermöglichen. Auf der anderen Seite gilt das Mermin-Wagner-Theorem nur für vollständig isotrope Systeme und ist damit für reale Systeme irrelevant. Hier ist zum Beispiel aufgrund der Dipol-Wechselwirkung, der Spin-Bahn-Wechselwirkung oder auch einer nicht-verschwindenden Kopplung zwischen Substrat und Film immer eine endliche Anisotropie vorhanden. Theoretische Untersuchungen haben gezeigt, daß bereits eine sehr kleine Anisotropie zu

spontaner magnetischer Ordnung mit einer beträchtlichen kritischen Temperatur führen kann. Dies zeigen sowohl Rechnungen im zweidimensionalen Heisenberg-Modell [11, 13] als auch im Hubbard-Modell [12]. Allgemein gilt die lokale Näherung als geeigneter Startpunkt für die Untersuchung von spontanem Magnetismus in dimensionsreduzierten Systemen [50, 41, 42, 43]. Die lokale Dynamik der Hubbard-Filme, die für eine qualitativ korrekte Beschreibung von spontanem Ferromagnetismus wichtig ist (vgl. Kap. 3), wird im Rahmen der lokalen Näherung (4.20) nicht vernachlässigt.

Wir haben im Rahmen der SDA gesehen (Kap. 3.6.1), daß der nicht-lokale Anteil der Selbstenergie, der aus der vierten Summenregel der Momente resultiert, mit steigender Koordinationszahl schnell abnimmt und zum Beispiel für das kubische bcc-Gitter ( $z^{\text{bcc}} = 8$ ) sowie das fcc-Gitter ( $z^{\text{fcc}} = 12$ ) nur noch von geringer Bedeutung ist [72, 73]. Für Filmsysteme ist die Koordinationszahl an der Oberfläche reduziert, allerdings liegen zum Beispiel die Oberflächenkoordinationszahlen  $z_s$  der fcc-artigen Filmstrukturen fcc(100) und fcc(111) mit  $z_s^{\text{fcc}(100)} = 8$  und  $z_s^{\text{fcc}(111)} = 9$  deutlich über der Koordinationszahl des zweidimensionalen Quadratgitters ( $z^{\text{square}} = 4$ ) und sind vergleichbar mit der des dreidimensionalen bcc Gitters ( $z^{\text{bcc}} = 8$ ).

Auch für kleine Wechselwirkungsstärken kann man den Fehler durch die lokale Näherung für die Selbstenergie abschätzen [82, 83, 84]. Im Rahmen der Störungstheorie 2. Ordnung lassen sich die Ergebnisse in der lokalen Näherung mit der vollständigen Rechnung vergleichen. Dies ist für einfach kubische Gitter in  $D = 1, 2, 3$  [82, 83] sowie für ein halbumendliches sc-Gitter ( $D = 3$ ) mit Oberfläche [84] durchgeführt worden. Sowohl für das translationssymmetrische sc-Gitter als auch für das halbumendliche System sind die Fehler durch die lokale Näherung – insbesondere in der Quasiteilchenzustandsdichte – sehr gering und deutlich kleiner als in zwei Dimensionen. Im Fall des halbumendlichen Systems sind die Abweichungen an der Oberfläche im Vergleich zum Volumen zwar geringfügig erhöht. Dies gilt aber nur für die äußerste Lage.

### Hochenergieentwicklung der Film-Green-Funktion und der Film-Selbstenergie.

Wie wir in Kapitel 3 gesehen haben, ist für die Beschreibung von spontanem Ferromagnetismus das korrekte Verhalten einer approximativen Theorie im Limes  $U \gg W$  gemäß Harris und Lange [52] essentiell. Dies impliziert, daß mindestens die ersten vier Summenregeln der Momente korrekt reproduziert werden. Für die hier betrachteten Filmsysteme lassen sich die entsprechenden Summenregeln am einfachsten über die Hochenergieentwicklung der Film-Green-Funktion bzw. der Film-Selbstenergie untersuchen. Analog zum translationssymmetrischen System sind die Hochenergiekoeffizienten der Film-Green-Funktion  $\hat{G}_{\mathbf{k}}(E)$  gerade über die Momente  $(\hat{M}_{\mathbf{k}\sigma}^{(m)})_{\alpha\beta} = M_{\mathbf{k}\sigma}^{(m)\alpha\beta}$  des Film-Systems (4.3) gegeben:

$$\hat{G}_{\mathbf{k}}(E) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\hat{M}_{\mathbf{k}\sigma}^{(m)}}{E^{m+1}}. \quad (4.24)$$

Ähnlich wie in (3.31) können die Momente auch für die Hubbard-Filme exakt berechnet werden,

$$M_{\mathbf{k}\sigma}^{(m)\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_{ij} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \left\langle \left[ \underbrace{\dots [c_{i\alpha\sigma}, \mathcal{H}]_{-}, \dots, \mathcal{H}]_{-}}_{m\text{-mal}}, c_{j\beta\sigma}^{\dagger} \right]_{+} \right\rangle, \quad (4.25)$$

und stellen somit rigorose Summenregeln dar. Allerdings darf hier bei der Berechnung der Momente die Translationsinvarianz nur innerhalb der Lagen angesetzt werden. Mit der vereinfachenden Notation  $(\hat{T}_{\mathbf{k}})_{\alpha\beta} = \tilde{T}_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} = T_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} - \delta^{\alpha\beta} \mu$  lauten die ersten vier Momente des Filmsystems (4.3) in der lokalen Näherung:

$$\begin{aligned} M_{\mathbf{k}\sigma}^{(0)\alpha\beta} &= \delta^{\alpha\beta}, \\ M_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)\alpha\beta} &= \tilde{T}_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} + \delta^{\alpha\beta} U n_{\alpha-\sigma}, \\ M_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)\alpha\beta} &= \sum_{\gamma} \tilde{T}_{\mathbf{k}}^{\alpha\gamma} \tilde{T}_{\mathbf{k}}^{\gamma\beta} + U \tilde{T}_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} (n_{\alpha-\sigma} + n_{\beta-\sigma}) + \delta^{\alpha\beta} U^2 n_{\alpha-\sigma}, \\ M_{\mathbf{k}\sigma}^{(3)\alpha\beta} &= \sum_{\gamma\delta} \tilde{T}_{\mathbf{k}}^{\alpha\gamma} \tilde{T}_{\mathbf{k}}^{\gamma\delta} \tilde{T}_{\mathbf{k}}^{\delta\beta} + U \sum_{\gamma} \tilde{T}_{\mathbf{k}}^{\alpha\gamma} \tilde{T}_{\mathbf{k}}^{\gamma\beta} (n_{\alpha-\sigma} + n_{\gamma-\sigma} + n_{\beta-\sigma}) + \\ &\quad + U^2 \tilde{T}_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} (n_{\alpha-\sigma} + n_{\beta-\sigma} + n_{\alpha-\sigma} n_{\beta-\sigma}) \\ &\quad + \delta^{\alpha\beta} U^2 n_{\alpha-\sigma} (1 - n_{\alpha-\sigma}) (B_{\alpha-\sigma} - \mu) + \delta^{\alpha\beta} U^3 n_{\alpha-\sigma}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Als (einzige) Konsequenz der lokalen Näherung wurde im vierten Moment  $M_{\mathbf{k}\sigma}^{(3)\alpha\beta}$  die nicht-lokale höhere Korrelationsfunktion, die der Bandbreitenkorrektur (3.38) entspricht, vernachlässigt. Die resultierende lokale Bandverschiebung  $B_{\alpha-\sigma}$  ist analog zu (3.37) definiert:

$$B_{\alpha-\sigma} = T_{0\alpha} + \frac{1}{n_{\alpha-\sigma}(1 - n_{\alpha-\sigma})} \sum_{j\beta}^{i\alpha \neq j\beta} T_{ij}^{\alpha\beta} \langle c_{i\alpha-\sigma}^{\dagger} c_{j\beta-\sigma} (2n_{i\alpha\sigma} - 1) \rangle. \quad (4.27)$$

Für eine lokale Selbstenergie erhält man unter Verwendung der Bewegungsgleichung (4.5) in einer zu (3.40) und (3.41) analogen Rechnung:

$$\begin{aligned} B_{\alpha-\sigma} &= T_{0\alpha} + \frac{1}{n_{\alpha-\sigma}(1 - n_{\alpha-\sigma})} \frac{1}{\hbar} \text{Im} \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_{-}(E) \left( \frac{2}{U} \Sigma_{\alpha-\sigma}(E - \mu) - 1 \right) \times \\ &\quad \left[ (E - \Sigma_{\alpha-\sigma}(E - \mu) - T_{0\alpha}) G_{ii-\sigma}^{\alpha\alpha}(E - \mu) - \hbar \right]. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Die Bandverschiebung läßt sich also exakt über die Film-Green-Funktion und die Film-Selbstenergie ausdrücken und kann daher selbstkonsistent bestimmt werden.

Für das Folgende ist die Auswirkung von (4.24), (4.26) auf das Hochenergieverhalten der Selbstenergie des Filmsystems von Bedeutung. Wir wollen deshalb mit Hilfe von (4.24), (4.26) das korrekte Hochenergieverhalten der lokalen Selbstenergie  $\hat{\Sigma}_{\sigma}(E)$  bestimmen. Dazu setzen wir an:

$$\hat{\Sigma}_{\sigma}(E) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\hat{C}_{\sigma}^{(m)}}{E^m}, \quad \text{mit} \quad (\hat{C}_{\sigma}^{(m)})_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} C_{\alpha\sigma}^{(m)}. \quad (4.29)$$

Durch Einsetzen von (4.29) in (4.6) und anschließender Entwicklung in  $1/E$  ergibt sich für die Hochenergieentwicklung der Green-Funktion:

$$\frac{1}{\hbar}\hat{G}_{\mathbf{k}}(E) \approx \frac{1}{E} \left[ 1 - \frac{1}{E}(\hat{T}_{\mathbf{k}} + \hat{C}_{\sigma}^{(0)}) - \frac{1}{E^2}\hat{C}_{\sigma}^{(1)} - \frac{1}{E^3}\hat{C}_{\sigma}^{(2)} - \dots \right]^{-1} \quad (4.30)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{E} \\ &+ \frac{1}{E^2}[\hat{T}_{\mathbf{k}} + \hat{C}_{\sigma}^{(0)}] \\ &+ \frac{1}{E^3}[(\hat{T}_{\vec{k}} + \hat{C}_{\sigma}^{(0)})^2 + \hat{C}_{\sigma}^{(1)}] \\ &+ \frac{1}{E^4}[(\hat{T}_{\vec{k}} + \hat{C}_{\sigma}^{(0)})^3 + (\hat{T}_{\vec{k}} + \hat{C}_{\sigma}^{(0)})\hat{C}_{\sigma}^{(1)} + \hat{C}_{\sigma}^{(1)}(\hat{T}_{\vec{k}} + \hat{C}_{\sigma}^{(0)}) + \hat{C}_{\sigma}^{(2)}] \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (4.31)$$

Mit (4.31) erhalten wir also die ersten vier Hochenergiekoeffizienten der Green-Funktion, ausgedrückt durch die Hochenergiekoeffizienten der Selbstenergie. Ausmultiplizieren der höheren Potenzen in (4.31) liefert folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} \hat{M}_{\mathbf{k}\sigma}^{(0)} &= 1, \\ \hat{M}_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)} &= \hat{T}_{\vec{k}} + \hat{C}_{\sigma}^{(0)}, \\ \hat{M}_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)} &= (\hat{T}_{\vec{k}})^2 + \hat{T}_{\vec{k}}\hat{C}_{\sigma}^{(0)} + \hat{C}_{\sigma}^{(0)}\hat{T}_{\vec{k}} + (\hat{C}_{\sigma}^{(0)})^2\hat{C}_{\sigma}^{(1)}, \\ \hat{M}_{\mathbf{k}\sigma}^{(3)} &= (\hat{T}_{\vec{k}})^3 + (\hat{T}_{\vec{k}})^2\hat{C}_{\sigma}^{(0)} + \hat{T}_{\vec{k}}\hat{C}_{\sigma}^{(0)}\hat{T}_{\vec{k}} + \hat{C}_{\sigma}^{(0)}(\hat{T}_{\vec{k}})^2 \\ &\quad + \hat{C}_{\sigma}^{(0)}\hat{T}_{\vec{k}}\hat{C}_{\sigma}^{(0)} + U[\hat{T}_{\vec{k}}\hat{C}_{\sigma}^{(0)} + \hat{C}_{\sigma}^{(0)}\hat{T}_{\vec{k}}] \\ &\quad + (\hat{C}_{\sigma}^{(0)})^3 + 2\hat{C}_{\sigma}^{(0)}\hat{C}_{\sigma}^{(1)} + \hat{C}_{\sigma}^{(2)}. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Über einen Vergleich von (4.32) mit den exakten (lokalen) Momenten des Filmsystems (4.26) können nun die ersten drei Hochenergiekoeffizienten der Film-Selbstenergie bestimmt werden. Durch geeignetes Umschreiben der Matrixprodukte in (4.32) erhält man:

$$\begin{aligned} C_{\alpha}^{(0)} &= U n_{\alpha-\sigma}, \\ C_{\alpha}^{(1)} &= U^2 n_{\alpha-\sigma} (1 - n_{\alpha-\sigma}), \\ C_{\alpha}^{(2)} &= U^2 n_{\alpha-\sigma} (1 - n_{\alpha-\sigma}) \left( B_{\alpha-\sigma} - \mu + U(1 - n_{\alpha-\sigma}) \right). \end{aligned} \quad (4.33)$$

Die Ausdrücke  $C_{\alpha}^{(0)}$ - $C_{\alpha}^{(2)}$  entsprechen in ihrer Struktur den Hochenergiekoeffizienten (3.44)-(3.46) im Rahmen des translationssymmetrischen Hubbard-Modells in der lokalen Näherung (3.64). Wir finden also das wichtige Ergebnis, daß die Hochenergiekoeffizienten der Film-Selbstenergie für jede Lage separat vollständig analog zum translationssymmetrischen System aufgebaut sind. Insbesondere tritt in (4.33) – im Gegensatz zu den Momenten (4.26) – keine explizite Kopplung zwischen den Lagen auf.

**Methode des effektiven Mediums.** Unser Ziel ist es, die im Kapitel 3 entwickelten Lösungsverfahren für das translationssymmetrische Hubbard-Modell auf die Behandlung von Filmsystemen zu übertragen. Aufgrund der Kopplung zwischen den

Lagen in (4.6), die durch das Interlagenhopping ( $T_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}$ ,  $\alpha \neq \beta$ ) vermittelt wird, ist dies allerdings nicht direkt möglich. Das Ergebnis (4.33) legt es nun nahe, die Selbstenergie  $\hat{\Sigma}_{\sigma}(E)$  des Filmsystems mit Hilfe der Methode des effektiven Mediums<sup>2</sup> zu bestimmen. Die Idee dabei ist, für einen Moment das Hopping zwischen den Lagen als ausgeschaltet zu betrachten ( $T_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} \rightarrow 0$ , für  $\alpha \neq \beta$ ). Die einzelnen Lagen des Films sind dann nicht mehr gekoppelt, und jede Lage für sich bildet ein translationssymmetrisches System. Die Bestimmung der Selbstenergie kann dann analog zu den Methoden von Kapitel 3 erfolgen. Wichtig ist allerdings, daß anschließend alle zu bestimmenden Erwartungswerte mit Hilfe der „vollen“ Film-Green-Funktion ((4.22), (4.21)), also bei eingeschaltetem Hopping zwischen den Lagen, berechnet werden. Im Rahmen einer selbstkonsistenten Rechnung wird dann die Selbstenergie im allgemeinen natürlich lagenabhängig.

Aufgrund des Ergebnisses (4.33) ist es klar, daß beim Übergang zu einem Filmsystem mit Hilfe der Methode des effektiven Mediums das korrekte Hochenergieverhalten einer approximativen Theorie erhalten bleibt: Erfüllt eine Theorie für das translationssymmetrische Hubbard-Modell die ersten vier Summenregeln der Momente, so tut dies auch ihr mit der Methode des effektiven Mediums konstruiertes Analogon für den Hubbard-Film. Die Methode des effektiven Mediums stellt also keine zusätzliche Näherung dar. Sie beschreibt gewissermaßen die einfachste Möglichkeit, die Ansätze aus Kapitel 3 in mit den Summenregeln konsistenter Weise auf Filmsysteme zu verallgemeinern. Die Konsistenz mit den Summenregeln der Momente für das Filmsystem ((4.24), (4.26)) läßt sich also auf konzeptionell einfache Weise sicherstellen. Dies ist vor allem im Hinblick auf die Beschreibung von spontanem Ferromagnetismus wichtig.

Wir werden diese Überlegung im folgenden noch präzisieren, indem wir die SDA (Kap. 3.6.1) sowie die MAA (Kap. 3.6.2) auf Filmsysteme generalisieren. Zum Vergleich wird zudem die HF-Lösung für Filmsysteme angegeben. Im Gegensatz zur HF-Lösung sind die SDA und die MAA im Einklang mit den ersten vier Summenregeln der Momente für das translationssymmetrische Hubbard-Modell und reproduzieren die Ergebnisse von Harris und Lange im Limes starker Korrelation. Der Vergleich mit den konzeptionell aufwendigeren Theorien IAA und MPT sowie mit exakten DMFT-QMC-Resultaten im Limes unendlicher Dimensionen hat gezeigt (vgl. Kap. 3.6.5), daß die SDA und die MAA das Verhalten ferromagnetischer Lösungen im Hubbard-Modell qualitativ sehr gut beschreiben. Es liegt also nahe, sich bei der Behandlung der Filmsysteme zunächst auf die SDA und die MAA zu beschränken.

#### 4.4.1. Die Hartree-Fock-Näherung für Filmsysteme

Die Hartree-Fock Näherung kann natürlich gemäß (3.48) direkt am Hamilton-Operator (4.3) durchgeführt werden. Als Selbstenergie erhält man dann analog zu (3.49):

$$\Sigma_{\alpha\sigma}^{\text{HF}} = U n_{\alpha-\sigma}. \quad (4.34)$$

---

<sup>2</sup>Die Methode des effektiven Mediums wird auch mit Erfolg auf die Beschreibung von Antiferromagnetismus angewendet [128, 72]. Die hier vorgestellten Überlegungen lassen sich direkt auf die Behandlung von zwei äquivalenten Untergittern übertragen.

In der Hartree-Fock-Näherung wird der Einfluß der elektronischen Korrelationen nur auf einem niedrigen Niveau berücksichtigt.

Es ist interessant anzumerken, daß die Hartree-Fock-Näherung leicht derart verallgemeinert werden kann, daß beliebige Winkeleinstellungen der Lagenmagnetisierungen möglich sind. Um den Magnetisierungsvektor  $\mathbf{m}_\alpha = \langle \boldsymbol{\sigma}_{i\alpha} \rangle$  (mit  $\boldsymbol{\sigma}_{i\alpha} = \sum_{\tau\tau'} c_{i\alpha\tau}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\tau\tau'} c_{i\alpha\tau'}$ ;  $\boldsymbol{\sigma}$ : Vektor der Paulimatrizen) zu berechnen, muß die verallgemeinerte Film-Green-Funktion  $G_{ij;\sigma\sigma'}^{\alpha\beta}(E) = \langle\langle c_{i\alpha\sigma}; c_{j\beta\sigma'}^\dagger \rangle\rangle_E$  bestimmt werden. Im Rahmen einer verallgemeinerten Hartree-Fock-Entkopplung (analog zu [129]) ist dies möglich. Es stellt sich heraus, daß sich, ohne Berücksichtigung von miteinander konkurrierenden Anisotropiebeiträgen, die Lagenmagnetisierungen immer parallel (ferromagnetische Ordnung) oder antiparallel (lagenweise antiferromagnetische Ordnung) zu einer beliebigen Spinvorzugsrichtung einstellen.

#### 4.4.2. Die SDA für Hubbard-Filme

Die Methode des Spektraldichteansatzes, die in Kapitel 3.6.1 für das translations-symmetrische Hubbard-Modell diskutiert wurde, basiert auf einem physikalisch motivierten Zweipolansatz für die Ein-Teilchen-Spektraldichte, dessen freie Parameter über die ersten vier Momente der Spektraldichte festgelegt werden. Eine direkte Verallgemeinerung des Zweipolansatzes ist nicht möglich, da für Filmsysteme die Spektraldichte aufgrund des kinetischen Anteils des Hamilton-Operators (4.3) im allgemeinen eine kompliziertere Struktur aufweist. Über einen Einpolansatz für die lokale Film-Selbstenergie oder mit Hilfe der Methode des effektiven Mediums läßt sich die SDA hingegen erfolgreich auf Filmsysteme verallgemeinern [130, 131, 132]. Die Struktur der lokalen lagenabhängigen Selbstenergie  $\Sigma_{\alpha\sigma}^{(\text{SDA})}(E)$  des Filmsystems wird dabei direkt aus dem translationssymmetrischen System (3.69) in der lokalen Näherung (3.64) übernommen. Alle auftretenden Erwartungswerte erhalten – allerdings zunächst formal – eine Lagenabhängigkeit. Die SDA-Selbstenergie des Filmsystems lautet damit [132]:

$$\Sigma_{\alpha\sigma}^{(\text{SDA})}(E) = U n_{\alpha-\sigma} \frac{E + \mu - B_{\alpha-\sigma}}{E + \mu - B_{\alpha-\sigma} - U(1 - n_{\alpha-\sigma})}. \quad (4.35)$$

Mit diesem Ansatz für die Selbstenergie ist insbesondere sichergestellt, daß die ersten vier Momente (4.26) des Filmsystems korrekt reproduziert werden. Die SDA für Filmsysteme ist mit (4.35) vollständig definiert. Die Gleichungen (4.10), (4.6), (4.28) und (4.35) bilden ein geschlossenes Gleichungssystem, dessen Lösung selbstkonsistent bestimmt werden kann. Es gibt in (4.35) keine direkte Kopplung der Selbstenergien der einzelnen Lagen. Eine solche Kopplung wird allerdings implizit über die Green-Funktion (4.6) vermittelt. Die Selbstenergie  $\Sigma_{\alpha\sigma}^{(\text{SDA})}(E)$  und damit das Quasiteilchenspektrum erhält eine echte Lagenabhängigkeit, sobald sich im Rahmen der selbstkonsistenten Lösung des geschlossenen Gleichungssystems (4.35), (4.22), (4.10) und (4.28) die Bandbesetzung  $n_{\alpha\sigma}$  und die Bandverschiebung  $B_{\alpha\sigma}$  lagenabhängig einstellen.

Analog zu (3.69) ist die SDA-Selbstenergie des Filmsystems eine reelle Größe. Quasiteilchendämpfung wird vernachlässigt. Aufgrund des Pols in der Selbstenergie spaltet das Quasiteilchenspektrum in zwei Subbänder auf. Anhand der Gleichungen

(4.6) und (4.8) sieht man, daß die Spektraldichte des Films in jedem Subband im allgemeinen aus mehreren  $\delta$ -Peaks besteht. Die Zahl der Peaks entspricht dabei der Anzahl der Lagen des Films, wobei aus Symmetriegründen einige Peaks verschwindendes spektrales Gewicht haben können. Im Gegensatz zum translationssymmetrischen Hubbard-Modell kann man die Positionen und die Gewichte der Quasiteilchenpeaks im allgemeinen nicht mehr analytisch angeben. Eine Verallgemeinerung der SDA zur Beschreibung beliebiger Winkeleinstellungen der Lagenmagnetisierungen ist bisher nicht gelungen.

### 4.4.3. Die MAA für Hubbard-Filme

Die SDA für Filmsysteme vernachlässigt den Einfluß von Quasiteilchendämpfungseffekten. Als eine physikalisch motivierte Erweiterung der SDA, die diesen Mangel beseitigt, bietet sich die modifizierte Legierungsanalogie an (Kap. 3.6.2). Um eine Verallgemeinerung der Methode der Legierungsanalogie auf Filmsysteme zu erreichen, wird jede Lage des Hubbard-Films (4.3) separat auf eine fiktive Zwei-Niveau-Legierung mit den Energieniveaus  $E_{p\sigma}^{(\alpha)}$  und den zugehörigen Konzentrationen  $x_{p\sigma}^{(\alpha)}$  ( $p = 1, 2$ ) abgebildet [133,134]. Die Wahl der Legierungsparameter entscheidet über die Qualität der Approximation. In der MAA für Filmsysteme werden die Energieniveaus und Konzentrationen in Analogie zum translationssymmetrischen System (3.78) angesetzt. Dies sichert insbesondere die Konsistenz mit den ersten vier Momenten (4.26) des Filmsystems [133]:

$$\begin{aligned}
 E_{p\sigma}^{(\alpha)} &= \frac{1}{2} \left[ T_{0\alpha} + U + B_{\alpha-\sigma} + \right. \\
 &\quad \left. (\pm)^p \sqrt{(U + B_{\alpha-\sigma} - T_{0\alpha})^2 + 4U n_{\alpha-\sigma} (T_{0\alpha} - B_{\alpha-\sigma})} \right], \\
 x_{1\sigma}^{(\alpha)} &= \frac{B_{\alpha-\sigma} + U(1 - n_{\alpha-\sigma}) - E_{1\sigma}^{(\alpha)}}{E_{2\sigma}^{(\alpha)} - E_{1\sigma}^{(\alpha)}}, \\
 x_{2\sigma}^{(\alpha)} &= 1 - x_{1\sigma}^{(\alpha)}.
 \end{aligned} \tag{4.36}$$

$E_{p\sigma}^{(\alpha)}$  und  $x_{p\sigma}^{(\alpha)}$  sind implizit über die Bandbesetzung  $n_{\alpha\sigma}$  und die Bandverschiebung  $B_{\alpha\sigma}$  lagenabhängig. Man beachte, daß im Gegensatz dazu im Rahmen der konventionellen Legierungsanalogie für das Filmsystem eine Lagenabhängigkeit der Energieniveaus  $E_{p\sigma}^{(\alpha)}$  (für uniformes  $T_{0\alpha}$ ) ausgeschlossen ist. Denn in der konventionellen Legierungsanalogie, in der die Energieniveaus und Konzentrationen anhand des Grenzfalles des unendlich schmalen Bandes bestimmt werden, gilt  $E_{1\sigma}^{(AA,\alpha)} = T_{0\alpha}$  und  $E_{1\sigma}^{(AA,\alpha)} = T_{0\alpha} + U$ .

Die Auswertung des über die Parameter  $E_{p\sigma}^{(\alpha)}$  und  $x_{p\sigma}^{(\alpha)}$  festgelegten Legierungsproblems gelingt mit Hilfe der CPA-Theorie [107, 108, 109]. Gemäß der Methode des effektiven Mediums wird die implizite CPA-Gleichung für die Selbstenergie (3.74) dabei für jede Lage separat angesetzt:

$$0 = \sum_{p=1,2} x_{p\sigma}^{(\alpha)} \frac{E_{p\sigma}^{(\alpha)} - \Sigma_{\alpha\sigma}(E) - T_0}{1 - \frac{1}{\hbar} G_{ii\sigma}^{\alpha\alpha}(E) [E_{p\sigma}^{(\alpha)} - \Sigma_{\alpha\sigma}(E) - T_0]}. \tag{4.37}$$

Da in (4.37) die Selbstenergie  $\Sigma_{\alpha\sigma}(E)$  zusätzlich implizit über die lokale Green-Funktion (4.22) auftritt, muß die CPA-Gleichung (4.37) zusammen mit (4.22) für gegebene Legierungsparameter  $E_{p\sigma}^{(\alpha)}$  und  $x_{p\sigma}^{(\alpha)}$  selbstkonsistent gelöst werden. Dabei geht über die lokale Green-Funktion (4.22) das vollständige Hopping des Systems ein. Im Rahmen der selbstkonsistenten Berechnung der Selbstenergie entsteht also in (4.37) eine Kopplung zwischen den einzelnen Lagen.

Analog zum translationssymmetrischen System erhält man eine vollständig selbstkonsistente Lösung der MAA für das Filmsystem über zwei ineinander verschränkte Selbstkonsistenzschleifen. Für gegebene Startwerte  $n_{\alpha-\sigma}$  und  $B_{\alpha-\sigma}$  können mit (4.36), (4.37) und (4.22) zunächst die Selbstenergie und die lokale Green-Funktion selbstkonsistent bestimmt werden. Über (4.10) und (4.28) lassen sich dann neue Werte für  $n_{\alpha-\sigma}$  und  $B_{\alpha-\sigma}$  berechnen. Diese beiden Schritte müssen bis zur kompletten Selbstkonsistenz wiederholt werden.



# 5. Ferromagnetismus in dünnen Hubbard-Filmen und an Oberflächen

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der numerischen Auswertung der Hubbard-Filme vorgestellt. Im Vordergrund steht dabei der Einfluß der Filmgeometrie auf spontanen Ferromagnetismus. Aufgrund der gebrochenen Translationssymmetrie an der Oberfläche erhalten wichtige magnetische Größen eine Lagenabhängigkeit. Im Rahmen stark korrelierter Hubbard-Filme sollen insbesondere die folgenden Fragestellungen untersucht werden:

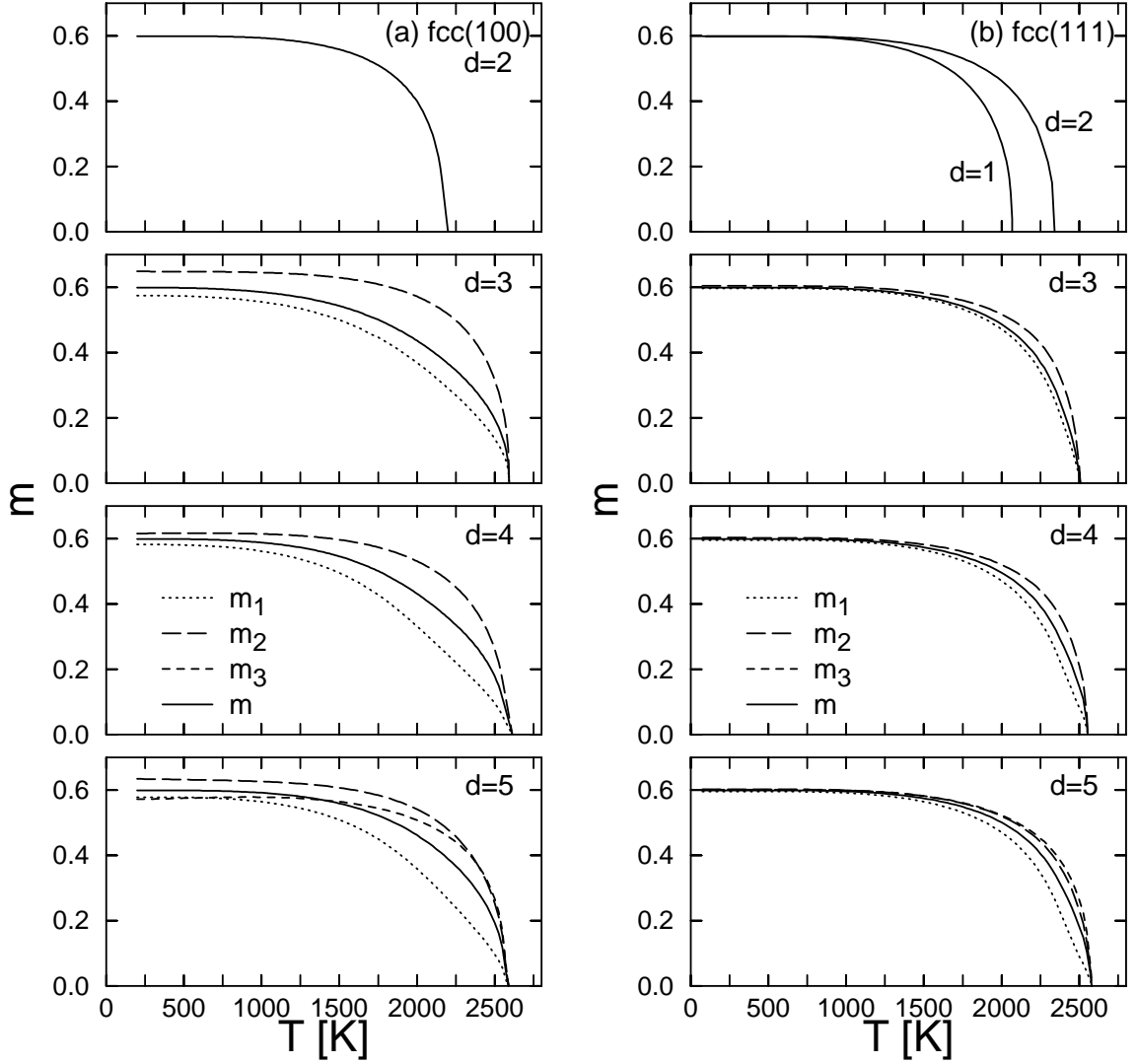
- Wie verhält sich die Lagenmagnetisierung der Hubbard-Filme als Funktion der Temperatur? Ist die magnetische Stabilität in der äußeren Lage erhöht oder erniedrigt? Wir haben gesehen, daß die effektive Bandbreite der LBDOS an der Oberfläche reduziert ist. Daraus resultiert eine erhöhte effektive Wechselwirkung in der äußeren Lage. Intuitiv (bzw. anhand des Stoner-Bildes für Bandmagnetismus) wäre also eine erhöhte Stabilität an der Oberfläche zu erwarten.
- Wie verhält sich die Lagenmagnetisierung als Funktion der Filmstärke? Hier ist insbesondere auch der Übergang zum halbunendlichen System ( $d \rightarrow \infty$ ) interessant.
- Welches Verhalten zeigt die Curie-Temperatur stark korrelierter Hubbard-Filme als Funktion der Filmstärke?
- Welchen Einfluß hat die mittlere Bandbesetzung  $n$  auf das magnetische Verhalten dünner Filme? Im Gegensatz zum Heisenberg-Modell läßt sich im Hubbard-Modell die Bandbesetzung beliebig vorgeben.
- Welchen Einfluß hat die konkrete Geometrie der Filme? Durch unterschiedliche Orientierungen der Filmstruktur kann die Oberflächenkoordinationszahl variiert werden.
- Welche Korrelationseffekte zeigen sich in der spin-, lagen- und temperaturabhängigen elektronischen Struktur der betrachteten Filme?

Um das Vielteilchenproblem der Hubbard-Filme zu lösen, verwenden wir die im vorangegangenen Kapitel vorgestellten Verallgemeinerungen der SDA und der MAA. Dabei liefert die SDA einen ersten, qualitativ korrekten Einblick in die magnetischen

Eigenschaften dünner Hubbard-Filme [132]. Diese Ergebnisse können mit Hilfe der MAA, die zusätzlich Quasiteilchendämpfungseffekte berücksichtigt, weiter verfeinert werden [133]. Um den Einfluß von Korrelationseffekten auf die magnetischen Eigenschaften dimensionsreduzierter Systeme deutlich zu machen, werden wir die SDA- und MAA-Ergebnisse mit Resultaten von HF-Rechnungen vergleichen. Im Rahmen von HF werden Korrelationseffekte auf einem deutlich niedrigeren Niveau behandelt. Zudem ist an einigen Stellen der Vergleich mit den magnetischen Eigenschaften dünner Heisenberg-Filme interessant. In der Mean-Field-Näherung [53, 10] können diese ohne großen numerischen Aufwand bestimmt werden.

Im Rahmen der hier betrachteten idealen Filme wird der Einfluß des Substrats, auf dem alle *realen* Filme aufgebracht sind, vollständig vernachlässigt. Realstrukturrechnungen für dünne Übergangsmetall-Filme zeigen, daß in Bezug auf die elektronischen und magnetischen Eigenschaften die Kopplung zwischen Substrat und Film im allgemeinen sehr gering ist [35, 36]. Wir gehen davon aus, daß das Substrat lediglich die Gitterkonstante  $a$  des Filmsystems vorgibt. Die Filmsysteme sind dann insbesondere symmetrisch zur mittleren Lage. Prinzipiell ließe sich der Einfluß der Grenzschicht Film/Substrat bzw. Film/Vakuum zumindest qualitativ durch veränderte Parameter (Hoppingintegral, Bandschwerpunkte, Coulomb-Wechselwirkung) in einer oder beiden Oberflächenlagen der Filmsysteme simulieren. Es ist bekannt, daß eine hinreichend starke Veränderung der Hoppingparameter an der Oberfläche (vgl. auch (4.14)) zu Tamm-artigen [135] Oberflächenzuständen führt [136]. Zudem lassen sich die in Kap. 4.4 vorgestellten approximativen Theorien problemlos auf Schichtsysteme, bestehend aus stark und schwach korrelierten Lagen, verallgemeinern. Solche Untersuchungen sind jedoch in der vorliegenden Arbeit nicht beabsichtigt. Um die hier untersuchten Modell-Filme konzeptionell einfach zu halten, werden alle Modellparameter ( $t$ ,  $T_{0\alpha}$ ,  $U$ ) uniform für den gesamten Film angesetzt. Die Coulomb-Wechselwirkung wählen wir aus dem Bereich starker Kopplung  $U \gg W$ . Die Blochbandbreite des zugehörigen Volumenkristalls  $W$  bestimmt im folgenden die Energieskala (vgl. Tab. 4.1). Aufgrund der uniformen Bandschwerpunkte  $T_{0\alpha}$  lassen wir insbesondere Ladungstransfer zwischen den Lagen zu. Der Ladungstransfer ist im allgemeinen von geringer Bedeutung. Um die Auswirkungen einer Nichtgleichverteilung der Ladung auf das magnetische Verhalten zu untersuchen, werden wir in Einzelfällen zum Vergleich auch Rechnungen mit explizit geforderter Ladungsneutralität  $n_\alpha = \sum_\sigma n_{\alpha\sigma} \stackrel{!}{=} n$  durchführen. Die Bandschwerpunkte  $T_{0\alpha}$  müssen dafür geeignet lagenabhängig angepaßt werden (vgl. Kapitel 4.3).

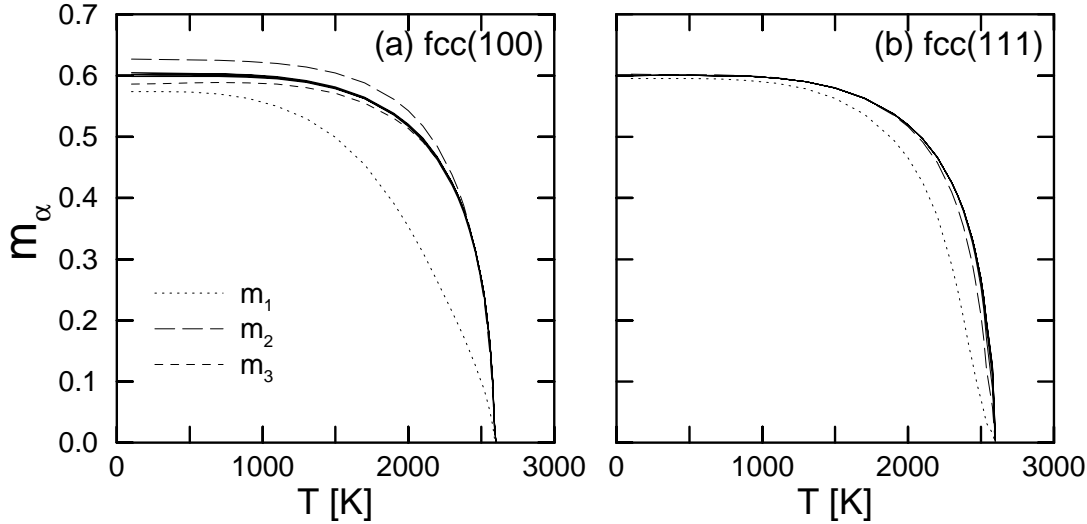
Wie wir in Kapitel 3 gesehen haben, begünstigt die nicht-bipartite fcc-Gitterstruktur aufgrund ihrer stark asymmetrischen Bloch-Zustandsdichte die Stabilität von spontanem Ferromagnetismus im Hubbard-Modell. Wir werden uns im folgenden daher hauptsächlich auf dünne Filme mit einer fcc(100)- und fcc(111)-Geometrie konzentrieren. Für beide Filmstrukturen liegen alle direkt benachbarten Atome in derselben oder in der angrenzenden Lage (vgl. Tab. 4.1). Bei einer Beschränkung auf Hopping zwischen nächsten Nachbarn erleichtert dies die numerische Auswertung. Die fcc(100)- und fcc(111)-Filmgeometrien unterscheiden sich bezüglich ihrer Oberflächenkoordinationszahl ( $z_s^{\text{fcc}(100)} < z_s^{\text{fcc}(111)} < z^{\text{fcc}}$ ). Es ist daher zu erwarten, daß der Einfluß der reduzierten Translationssymmetrie in den beiden Systemen unterschiedlich stark ausgeprägt ist. Neben der ferromagnetischen Phase



**Abbildung 5.1.:** Lagenmagnetisierung  $m_\alpha$  und mittlere Magnetisierung  $m$  dünner Hubbard-Filme verschiedener Dicke  $d$  als Funktion der Temperatur  $T$ . SDA-Rechnung für Filme in der (a) fcc(100)- und (b) fcc(111)-Geometrie.  $\alpha = 1$  bezeichnet die Oberflächenebene. Die Lagenmagnetisierung ist symmetrisch zur mittleren Lage. Weitere Parameter: Bandbesetzung  $n = 1.4$ ; effektive Coulomb-Korrelation  $U/W = 3$ ; Bloch-Bandbreite des Volumenkristalls  $W = 4\text{eV}$ .

ist in den Hubbard-Filmen auch eine antiferromagnetische Phase möglich. Insbesondere erweist sich für moderate Kopplung ( $U \approx W$ ) und Bandbesetzungen nicht zu weit weg von Halbfüllung ( $n = 1$ ) eine lagenweise antiferromagnetische Ordnung als stabil. Wir werden eine solche lagenweise antiferromagnetische Phase im folgenden allerdings nicht weiter diskutieren.

Zur numerischen Berechnung der lokalen Green-Funktion (4.22) muß die zweidimensionale  $\mathbf{k}$ -Summation über die erste Brillouin-Zone der Oberflächenebene explizit durchgeführt werden. Eine Umformung der  $\mathbf{k}$ -Summation in eine Energieintegration über die LBDOS ist für Filme der Dicke  $d > 2$  nicht möglich. Für jeden  $\mathbf{k}$ -Punkt ist außerdem die Inversion einer  $d \times d$ -Matrix erforderlich. Numerische Details zur  $\mathbf{k}$ -Summation und zur Matrixinversion können im Anhang A nachgelesen

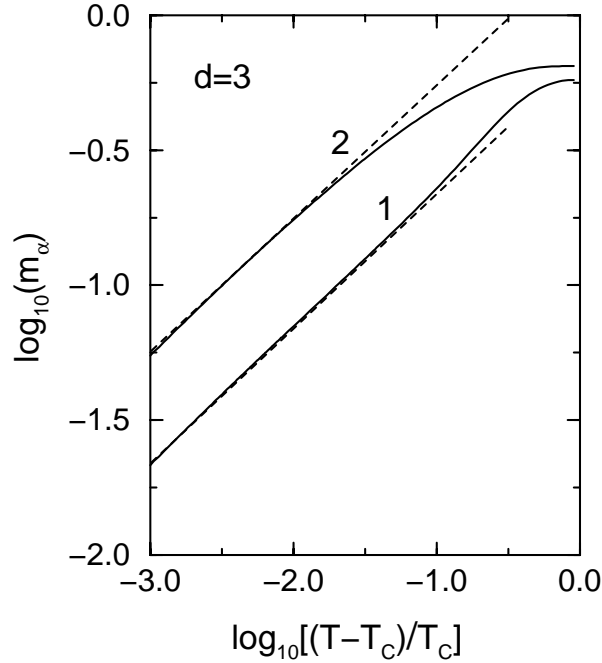


**Abbildung 5.2.:** Lagenmagnetisierung  $m_\alpha$  in der SDA als Funktion der Temperatur  $T$  für ein halbusendliches fcc-Gitter mit einer (a) (100)- und (b) (111)-Oberfläche.  $\alpha = 1$  bezeichnet die Oberflächenlage. Maximal die ersten drei Lagen können vom Volumensystem unterschieden werden. Weitere Parameter:  $n = 1.4$ ;  $U/W = 3$ ;  $W = 4$  eV;  $d = 20$ .

werden. Zur Optimierung der Rechenzeiten hat es sich als sinnvoll erwiesen, alle benötigten Erwartungswerte ( $n_{\alpha\sigma}$ ,  $B_{\alpha\sigma}$ , ...) mit Hilfe von Matsubara-Summen auf der imaginären Energieachse zu berechnen. Eine ausführliche Beschreibung der Umformung auf Matsubara-Summen findet sich im Anhang B. Um die Zahl der Iterationsschritte bis zum Erreichen der selbstkonsistenten Lösung zu verringern, wurde das Broyden-Verfahren zur Nullstellensuche in mehrdimensionalen nichtlinearen Gleichungssystemen verwendet [137].

In Abbildung 5.1 ist die Lagenmagnetisierung  $m_\alpha$  sowie die mittlere Magnetisierung  $m$  dünner fcc(100)- und fcc(111)-Filme, berechnet mit Hilfe der SDA, als Funktion der Temperatur aufgetragen [132]. Abbildung 5.2 zeigt die Lagenmagnetisierung für ein halbusendliches fcc-Gitter. Für die hier betrachtete Bandbesetzung von  $n = 1.4$  ist spontaner Ferromagnetismus für fcc(100)-Filme ab der Doppellage, für Filme in der fcc(111)-Struktur sogar schon ab einer Monolage möglich (Abb. 5.1). Während aus Symmetriegründen Mono- und Doppellagensysteme gleichförmig magnetisiert sind, zeigt sich für  $d \geq 3$  eine deutliche Lagenabhängigkeit der Magnetisierung. Für  $T \rightarrow 0$  finden wir für beide Filmgeometrien ferromagnetische Sättigung ( $n_{\alpha\uparrow} = 1$ ,  $m_\alpha = 2 - n_\alpha = 1 - n_{\alpha\downarrow}$ ). Die Besetzungszahl  $n_{\alpha\downarrow}$  und damit die Lagenmagnetisierung  $m_\alpha$  lassen sich in diesem Grenzfall exakt anhand des wechselwirkungsfreien Systems bestimmen<sup>1</sup>. Die Lagenabhängigkeit der Magnetisierungen bei  $T = 0$  resultiert daher allein aus einem endlichen Ladungstransfer zwischen den einzelnen Lagen des Films und soll hier nicht weiter betrachtet werden. Als Funktion der Temperatur zeigen die inneren Lagen das typische Brillouin-artige Verhalten. Man beachte, daß die Magnetisierung der Oberflächenlage für beide Filmgeometrien

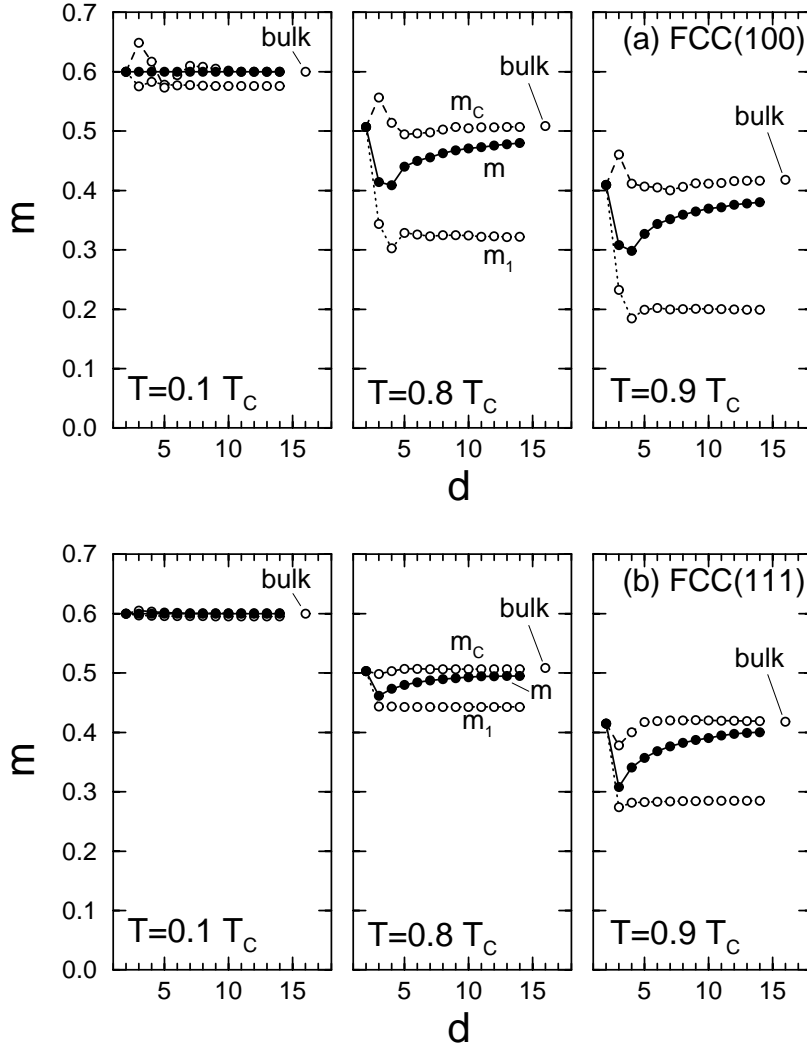
<sup>1</sup> Im ( $\sigma = \downarrow$ )-Spektrum verschwinden aufgrund des vollständig besetzten ( $\sigma = \uparrow$ )-Spektrums effektiv alle Korrelationseffekte. Das wechselwirkungsfreie System wurde in Kapitel 4.3 ausführlich diskutiert (siehe z.B. Abb. 4.3 und 4.4).



**Abbildung 5.3.:** Temperaturabhängigkeit der Lagenmagnetisierung  $m_\alpha$  eines dreilagigen fcc(100)-Films in logarithmischer Auftragung im kritischen Temperaturbereich. Der kritische Exponent der Magnetisierung ergibt sich zu  $\beta = \frac{1}{2}$  für alle Lagen (gestrichelte Linien). Weitere Parameter: SDA-Rechnung;  $n = 1.4$ ;  $U/W = 3$ .

als Funktion der Temperatur schneller abnimmt als die Magnetisierung der inneren Lagen. Die Oberflächelage zeigt die Tendenz zu einer reduzierten Curie-Temperatur. Daraus resultiert ein nahezu lineares Temperaturverhalten der Magnetisierung der äußeren Lage bei höheren Temperaturen. Entgegen der intuitiven Erwartung ist die magnetische Stabilität in der Oberflächelage reduziert, obwohl dort die effektive Korrelation erhöht ist. Wir werden weiter unten sehen, daß dies ein reiner Korrelationseffekt ist. Die Reduktion der Oberflächenmagnetisierung bei endlichen Temperaturen ist stärker für die offenere fcc(100)-Struktur und nimmt mit wachsender Filmdicke zu (Abb. 5.1 und 5.2). Aufgrund der Kopplung zwischen den Lagen, die durch das Hopping der Elektronen vermittelt wird, behält die äußere Lage jedoch eine endliche Magnetisierung bei, und es stellt sich eine gemeinsame Curie-Temperatur  $T_C$  für den gesamten Film ein.

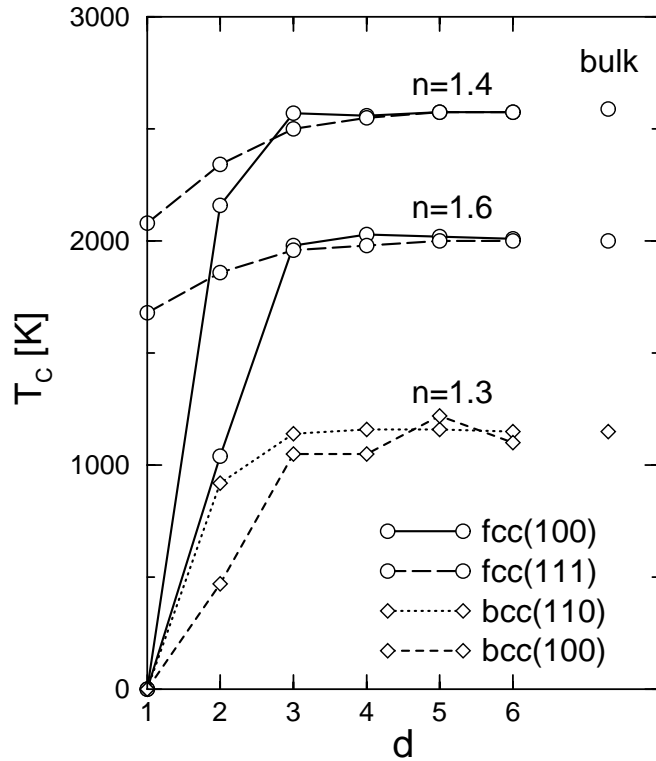
Die Magnetisierungskurven in Abbildung 5.1 zeigen einen Phasenübergang zweiter Ordnung als Funktion der Temperatur. Für den zugehörigen kritischen Exponenten der Magnetisierung finden wir  $\beta = \frac{1}{2}$  (Abbildung 5.3, [132]). Dies macht den Mean-Field-Charakter des hier betrachteten Zugangs deutlich. Der Grund dafür liegt in der lokalen Näherung für die Selbstenergie. Der kritische Exponent  $\beta$  ist unabhängig vom Lagenindex  $\alpha$  und von der Filmdicke  $d$ . Dies gilt auch im Limes sehr großer Filmdicken, also im Fall eines halbumendlichen Systems. Im Gegensatz zum Heisenberg-Modell in der Mean-Field-Näherung finden wir im halbumendlichen System keine Anzeichen für unterschiedliche kritische Exponenten der Magnetisierung an der Oberfläche und im Volumen. Man beachte, daß der kritische



**Abbildung 5.4.:** Magnetisierung der Oberflächenlage  $m_1$ , der zentralen Lage  $m_c$  und die mittlere Magnetisierung  $m$  dünner Filme als Funktion der Filmdicke  $d$ . SDA-Rechnung für Filme in der (a) fcc(100)- und (b) fcc(111)-Geometrie. Es sind drei verschiedene Temperaturen  $T = 0.1 T_C$ ,  $T = 0.8 T_C$ ,  $T = 0.9 T_C$  gezeigt. Zusätzlich sind die entsprechenden Magnetisierungen für den Fall des Volumenkristalls (bulk) angegeben. Weitere Parameter:  $n = 1.4$ ;  $U/W = 3$ .

Bereich, in dem die kritischen Exponenten eindeutig festgelegt werden können, sehr klein ist.

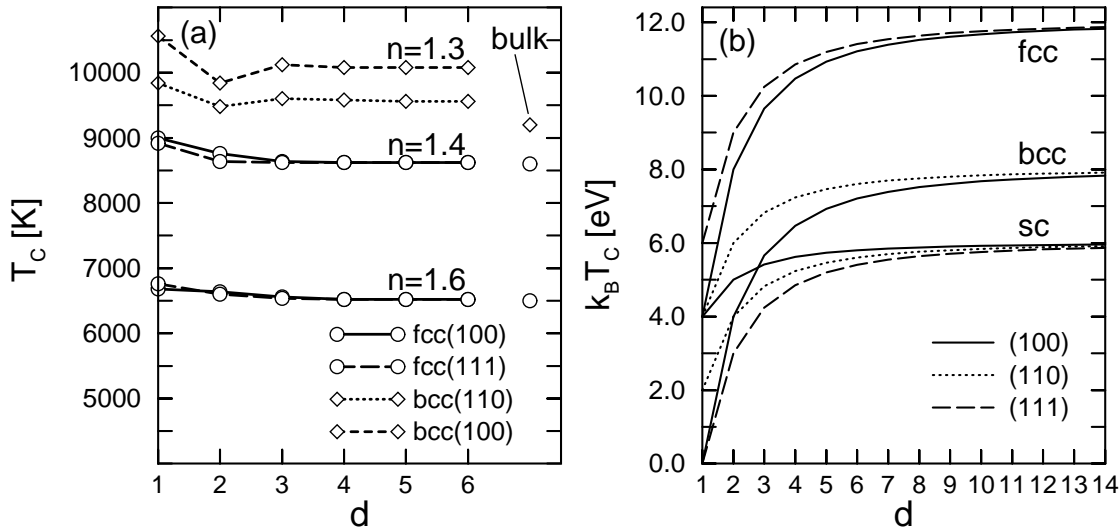
In Abbildung 5.4 ist die Magnetisierung der äußeren und der zentralen Lage sowie die mittlere Magnetisierung für Filme in der fcc(100)- und der fcc(111)-Geometrie als Funktion der Filmdicke gezeigt [132]. Anhand dieser Auftragung kann der Übergang zu einem halboneindlichen System analysiert werden. Bei endlichen Temperaturen ist die Magnetisierung der äußeren Lage im Vergleich zu der zentralen Lage reduziert. Dies gilt nicht nur für dünne Filme ( $d \approx 3 - 6$ ; vgl. auch Abb. 5.1), für die wegen der gegenseitigen Beeinflussung der beiden Oberflächenlagen leichte Oszillationen als Funktion der Filmdicke auftreten, sondern auch im Limes  $d \rightarrow \infty$ , für den beide Oberflächen effektiv nicht mehr gekoppelt sind. Für dicke Filme stimmt die Magnetisierung der zentralen Lage gut mit der zugehörigen Magnetisierung des



**Abbildung 5.5.:** Curie-Temperatur  $T_C$  als Funktion der Filmdicke  $d$  für verschiedene Filmgeometrien und unterschiedliche Bandbesetzungen  $n$ . SDA-Rechnung mit  $U/W = 3$ . Weitere Parameter:  $n = 1.4$ ;  $W = 4$  eV.

Volumenkristalls (bulk) überein. Man beachte, daß die Magnetisierung der Oberflächenlage für steigende Filmdicke auf einem endlichen Niveau sättigt. Die Sättigung tritt bereits ab einer Filmdicke von  $d \approx 5$  ein. Der Sättigungswert der Oberflächenmagnetisierung hängt deutlich von der betrachteten Filmgeometrie ab. Man sieht wiederum den stärkeren Oberflächeneffekt für die fcc(100) Filmgeometrie im Vergleich zu fcc(111)-Filmen.

Die zugehörigen Curie-Temperaturen sind in Abbildung 5.5 als Funktion der Filmdicke für die Bandbesetzungen  $n = 1.4$  und  $n = 1.6$  aufgetragen. Zusätzlich sind die  $T_C(d)$ -Kurven für dünne bcc(100)- und bcc(110)-Filme bei  $n = 1.3$  gezeigt. Die Curie-Temperaturen steigen mit wachsender Filmdicke an. Für sehr dünne Filme sind die Unterschiede zwischen den verschiedenen Filmgeometrien am stärksten. Für die fcc(100), bcc(110)- und bcc(100)-Struktur zeigt eine einzelne Monolage keinen spontanen Magnetismus. Sowohl die fcc(100)- als auch die bcc(110)-Monolage sind äquivalent zu einem zweidimensionalen Quadratgitter. In der SDA ist für das Quadratgitter zwar spontaner Ferromagnetismus möglich, allerdings nur für große Wechselwirkungsstärken und in einem eingeschränkten Bereich der Bandbesetzung nahe bei  $n = 0.7$  bzw.  $n = 1.3$ . Der Fall einer bcc(100)-Monolage ist in dem Sinne singulär, als hier alle nächsten Nachbarn in den angrenzenden Lagen liegen (vgl. Tab. 4.1) und deshalb für die Monolage bei Beschränkung auf Hopping zwischen nächsten Nachbarn kein Hopping zwischen den Atomen möglich ist. Für den Grenzfall verschwindenden Hoppings haben wir aber in Kapitel 3.4 gesehen, daß spontaner Ferromagnetismus ausgeschlossen ist. Im Fall der fcc(111)-Monolage finden wir da-



**Abbildung 5.6.:** (a) Curie-Temperatur  $T_C$  dünner Hubbard-Filme berechnet mit der Hartree-Fock-Näherung als Funktion der Filmdicke  $d$ . Filmgeometrien und Bandbesetzungen wie in Abbildung 5.5. Für  $n = 1.3$  bilden die Filme ab  $d = 3$  in der Nähe der kritischen Temperatur eine lagenweise antiferromagnetische Ordnung aus. Die kritische Temperatur entspricht hier der Néel-Temperatur. Weitere Parameter:  $n = 1.4$ ;  $U = W$ ;  $W = 4 \text{ eV}$ . (b)  $T_C(d)$  dünner Heisenberg-Filme berechnet mit der Mean-Field-Näherung für verschiedene Filmgeometrien. Spinquantenzahl  $S = \frac{1}{2}$ ;  $k_B$ : Boltzmann-Konstante.

gegen spontanen Ferromagnetismus mit einer beträchtlichen Curie-Temperatur. Die Monolage der fcc(111)-Struktur entspricht einem zweidimensionalen Dreiecksgitter, dessen Bloch-Zustandsdichte eine starke Asymmetrie aufweist (vgl. Abb. 4.3). Wir haben in Kapitel 3 gesehen, daß im Rahmen der lokalen Näherung eine stark asymmetrische BDOS die Stabilität ferromagnetischer Lösungen begünstigt. Als Funktion der Filmdicke konvergieren die Curie-Temperaturen schon ab  $d \approx 3 - 5$  gegen die entsprechenden Werte des Volumenkristalls. Die größten Schwankungen zeigen dabei Filme in der bcc(100)-Geometrie, die eine sehr offene Filmstruktur darstellt. Der Ladungstransfer zwischen den Lagen des Films ist hier zudem deutlich stärker als für die übrigen Filmgeometrien. Die Curie-Temperaturen der bcc-artigen Filme, sowie auch die entsprechende Curie-Temperatur des Volumenkristalls liegen niedriger als für die fcc-Systeme. Die starke Asymmetrie der LBDOS der fcc-Filme erhöht deren magnetische Stabilität im Vergleich zu den Filmen in der bcc-Struktur, deren LBDOS symmetrisch ist. Analog zum translationssymmetrischen System ist die Curie-Temperatur der fcc-artigen Filme für  $n = 1.4$  höher als für  $n = 1.6$ .

Zum Vergleich sind in Abbildung 5.6(a) entsprechende  $T_C(d)$ -Kurven, berechnet im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung für Hubbard-Filme für den Fall moderater Coulomb-Wechselwirkung  $U = W$ , gezeigt. Im Gegensatz zu den SDA-Resultaten nehmen in HF die Curie-Temperaturen mit wachsender Filmdicke ab. Dies gilt für alle Bandbesetzungen und alle betrachteten Filmgeometrien sowie auch für alle untersuchten Coulomb-Wechselwirkungen. Mit wachsender Coulomb-Wechselwirkung wird allerdings die relative Erhöhung der Curie-Temperatur der Monolage geringer ( $T_C(d = 1)/T_C(d = \infty) \rightarrow 1$ , für  $U \rightarrow \infty$ ,  $W = \text{const.}$ ) und die Curie-Temperatur hängt nicht mehr von der Filmdicke ab. Man beachte, daß die

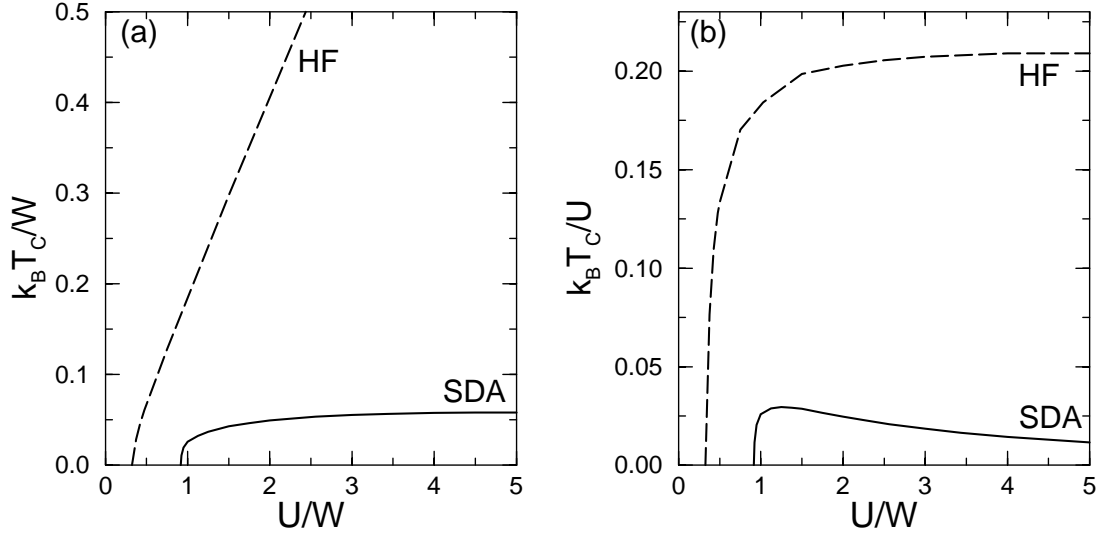
---

HF-Lösung ein offensichtlich unbefriedigendes Ergebnis für die bcc(100)-Monolage liefert. Trotz verschwindenden Hoppings zwischen den Atomen ist hier spontaner Ferromagnetismus möglich. Die  $T_C(d)$ -Kurven der bcc-artigen Filme bei  $n = 1.3$  konvergieren nicht zu dem entsprechenden Wert des bcc Volumenkristalls. Für Bandbesetzungen nicht zu weit weg von Halbfüllung bildet sich für  $d \geq 3$  in diesen Systemen eine lagenweise antiferromagnetische Ordnung aus, die stabiler ist als die ferromagnetische (vgl. Ref. [50]). Die aufgetragene kritische Temperatur entspricht hier der Néel-Temperatur. Abbildung 5.6(b) zeigt die Curie-Temperaturen dünner Heisenberg-Filme mit der Spinquantenzahl  $S = 1/2$ , berechnet in der Mean-Field-Näherung<sup>2</sup>. Für alle Filmgeometrien steigt  $T_C(d)$  monoton an. Interessanterweise lassen sich die Curie-Temperaturen im Heisenberg-Modell im Rahmen der Mean-Field-Näherung analytisch berechnen. Für translationssymmetrische Systeme gilt  $k_B T_C = \frac{2}{3} \hbar^2 J S (S + 1) z$  ( $k_B$ : Boltzmann-Konstante) [53],  $T_C$  ist also proportional zur Koordinationszahl  $z$ . Die Curie-Temperaturen für die Monolage und den Volumenkristall lassen sich also für die verschiedenen Gitterstrukturen anhand der Tabelle 4.1 bestimmen. Für Filme endlicher Dicke findet man in einer Rechnung analog zum translationssymmetrischen Fall [10]:  $\frac{4}{3} k_B T_C(d) = \hbar^2 J S (S + 1) [z_{\perp} \cos(\pi/(1 + d)) + z_{\parallel}/2]$ . Die Filmgeometrie geht in die Bestimmung der Curie-Temperatur also nur über die Koordinationszahlen  $z_{\parallel}$  und  $z_{\perp}$  ein. Im Rahmen der Mean-Field-Näherung für Heisenberg-Filme konvergieren die Curie-Temperaturen als Funktion der Filmdicke wesentlich langsamer gegen die entsprechenden Werte des Volumenkristalls als in den SDA-Resultaten für Hubbard-Filme (Abb. 5.5).

Es stellt sich die Frage, ob die in den Hubbard-Filmen beobachtete reduzierte Stabilität der Magnetisierung der Oberflächenlage (Abb. 5.1, 5.2, 5.4) sowie das Ansteigen der Curie-Temperatur als Funktion der Filmdicke (Abb. 5.5) anhand einfacher Argumente verstanden werden können. Dafür bietet sich folgendes Verfahren an: Angenommen, der wesentliche Einfluß der Filmgeometrie auf das magnetische Verhalten der Filmsysteme geht über die Struktur der LBDOS der Filmsysteme ein. Dann macht es Sinn, über die Lagenabhängigkeit der LBDOS auf Trends in den magnetischen Eigenschaften der Hubbard-Filme zu schließen. Die Basis dafür kann dann das relativ gut verstandene Verhalten der ferromagnetischen Lösungen im translationssymmetrischen Hubbard-Modell (Kap. 3) liefern (siehe unten: Argumente (i) und (ii)). Zusätzliche Aussagen ergeben sich aus dem folgenden numerischen Verfahren: Im translationssymmetrischen Hubbard-Modell in der lokalen Näherung geht die Bloch-Bandstruktur  $\varepsilon(\mathbf{k})$  nur über die BDOS  $\rho_0(E)$  ein. Trends bezüglich der Lagenabhängigkeit der Magnetisierung in Hubbard-Filmen kann man also erhalten, indem man die LBDOS der einzelnen Lagen separat als Einteilcheninput für eine Rechnung im translationssymmetrischen Hubbard-Modell verwendet ( $\rho_{0\alpha}(E) \rightarrow \rho_0(E)$  für  $\alpha = 1, \dots, d$ ). Dieses Konzept wird im folgenden mehrmals angewendet werden.

---

<sup>2</sup> Ein qualitativ sehr ähnliches Verhalten zeigen  $T_C(d)$ -Kurven für Heisenberg-Filme, berechnet im Rahmen der Tjablikow-Näherung [10, 13]. Da die Tjablikow-Näherung, die den Einfluß von Spinwellen bei tiefen Temperaturen korrekt beschreibt, das Mermin-Wagner-Theorem [8] reproduziert, muß hier ein kleiner anisotroper Beitrag zu den Heisenberg-Filmen hinzugenommen werden.



**Abbildung 5.7.:** Curie-Temperatur  $T_C$  für das dreidimensionale fcc-Gitter mit einer Bandbesetzung von  $n = 1.4$  als Funktion der effektiven Coulomb-Korrelation  $U/W$  in zwei unterschiedlichen Auftragungsarten: (a)  $T_C/W$  als Funktion von  $U/W$ . Dies entspricht der Variation der Curie-Temperatur als Funktion von  $U/W$  bei festgehaltener Bandbreite  $W$ . (b)  $T_C/U$  als Funktion von  $U/W$ . Dies entspricht der Variation der Curie-Temperatur als Funktion von  $U/W$  bei festgehaltener Coulomb-Wechselwirkung  $U$ . Durchgezogene Linien: SDA-Rechnung; gestrichelte Linien: Hartree-Fock-Rechnung (HF);  $k_B$ : Boltzmann-Konstante.

Wir haben in Kapitel 4.3 gesehen, daß für  $d \geq 3$  die LBDOS der Filme eine Lagenabhängigkeit bekommt. Aufgrund der verringerten Koordinationszahl an der Oberfläche ist sowohl die Varianz  $\Delta_s^{(2)}$  als auch die Asymmetrie  $\Delta_s^{(3)}$  der LBDOS der äußeren Lage im Vergleich zu den inneren Lagen reduziert (vgl. Tab. 4.1). Dasselbe gilt für den Vergleich zwischen der LBDOS einer Monolage und den inneren Lagen eines Films für  $d > 1$ . In den hier betrachteten hochkorrelierten Hubbard-Filmen sind beide Effekte wichtig in Bezug auf die magnetische Stabilität und führen zu dem gleichen Trend:

(i) Den Einfluß der Asymmetrie der Bloch-Zustandsdichte auf die magnetische Stabilität haben wir in Kapitel 3 diskutiert. Im stark korrelierten Hubbard-Modell begünstigt eine starke Asymmetrie der BDOS die Stabilität von spontanem Ferromagnetismus. Auf die Filmsysteme angewendet erklärt dies den Trend zu einer reduzierten Curie-Temperatur an der Oberfläche bzw. in der Monolage.

(ii) Im translationssymmetrischen Hubbard-Modell folgt der Einfluß einer reduzierten Varianz  $\Delta$  der BDOS direkt aus der Skalierungseigenschaft des Hubbard-Modells<sup>3</sup>. Im Limes starker Korrelation  $U \gg W$  hängen die magnetischen Eigenschaften nicht mehr von der Coulomb-Wechselwirkung  $U$  ab und die Bandbreite  $W$  der BDOS bleibt die einzige relevante Energieskala des Systems (Kap. 3.6.5(ii)). Die Curie-Temperatur skaliert daher – bei festgehaltenem  $U$  – mit  $W \sim \sqrt{\Delta}$ . Übertragen auf Filmsysteme erklärt diese Überlegung den Trend zu einer reduzierten Curie-

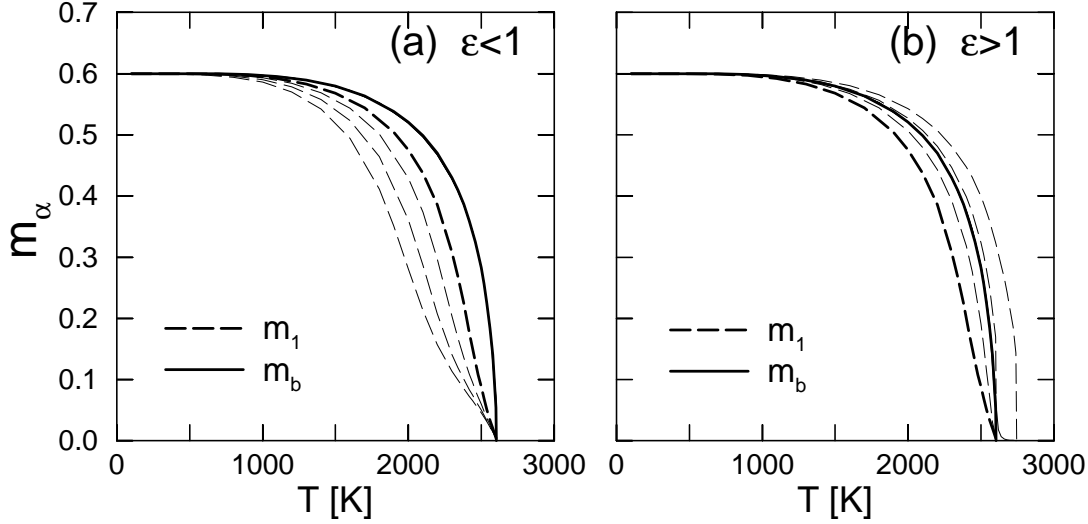
<sup>3</sup>Bei festgehaltener effektiver Korrelation  $U/W$  skalieren alle Energiegrößen mit der Bandbreite  $W$  der BDOS (Kap. 3). Für die Curie-Temperatur gilt damit  $T_C(U, rW) = rT_C(U/r, W)$  für einen beliebigen Faktor  $r > 0$ .

Temperatur der Oberflächenlage oder der Monolage, da hier die effektive Bandbreite ( $\sim \sqrt{\Delta_\alpha^{(2)}}$ ) reduziert ist. Um dieses Argument zu veranschaulichen, haben wir in Abbildung 5.7 die Curie-Temperatur für das dreidimensionale fcc-Gitter auf zwei verschiedene Arten aufgetragen. Abbildung 5.7(a) zeigt  $T_C$  als Funktion der effektiven Coulomb-Korrelation  $U/W$  in Einheiten der Bandbreite  $W$ . Dies entspricht der in Kapitel 3 diskutierten Situation, in der bei festgehaltener Bandbreite die Stärke der Coulomb-Wechselwirkung variiert wird (vgl. Abb. 3.8(b)). Als Funktion von  $U/W$  steigt  $T_C/W$  ab einer kritischen effektiven Wechselwirkung zunächst steil an, sättigt aber im Limes starker Korrelation auf einem endlichen Niveau. Unter Ausnutzung der Skalierungseigenschaft des Hubbard-Modells ergibt sich sofort eine zweite Auftragsart der  $T_C$ -Kurve. In Abbildung 5.7(b) ist  $T_C$  als Funktion von  $U/W$  in Einheiten von  $U$  gezeigt. Dies entspricht einer Änderung der effektiven Korrelation  $U/W$  durch Variation von  $W$  bei festgehaltenem  $U$  und korrespondiert daher mit der Situation in den hier betrachteten Filmsystemen: Während  $U$  für alle Lagen konstant ist, variiert die effektive Bandbreite der LBDOS ( $\sim \sqrt{\Delta_\alpha^{(2)}}$ ) in den einzelnen Lagen.  $T_C/U$  zeigt ein Maximum nur leicht oberhalb der kritischen effektiven Wechselwirkungsstärke und nimmt für  $U/W \gg 1$  proportional  $1/W$  ab. Im Limes  $W \rightarrow 0$  folgt  $T_C/U \rightarrow 0$  im Einklang mit dem exakten Resultat im Grenzfall des unendlich schmalen Bandes  $W = 0$  (Kap. 3.4). Ein analoges Bild gilt insbesondere für alle Theorien, die den Grenzfall starker Korrelation gemäß Harris und Lange (Kap. 3.4) korrekt reproduzieren. Für die Hubbard-Filme legt also auch der Effekt der verringerten Varianz der LBDOS die reduzierte magnetische Stabilität an der Oberfläche bzw. in der Monolage nahe.

Die Argumente (i) und (ii) basieren beide konzeptionell auf dem Grenzfall starker Korrelation. Eine lagenseparierte numerische Rechnung auf der Basis der LBDOS eines fünfzähligen fcc(100)-Films bestätigt die obigen Überlegungen und zeigt, daß beide Effekte ((i) und (ii)) gleichermaßen wichtig sind: Die Curie-Temperatur der „separierten“ Oberflächenlage ( $\rho_0(E) = \rho_{0,1}(E)$ ) ist im Vergleich zur mittleren Lage ( $\rho_0(E) = \rho_{0,3}(E)$ ) stärker reduziert als es allein über die verringerte effektive Bandbreite zu erwarten wäre. In Bezug auf die kompletten Film-Rechnungen ist allerdings klar, daß durchaus auch andere Effekte, die nicht über eine einfache Momentenanalyse der LBDOS erfaßt werden, eine wichtige Rolle spielen können. Zudem kann die Kopplung zwischen Lagen, die im oben vorausgesetzten Bild nur auf dem Niveau des wechselwirkungsfreien Systems (LBDOS) eingeht, einen nicht unwichtigen zusätzlichen Einfluß auf die Trends in den magnetischen Eigenschaften der Filmsysteme haben.

Es soll hier ausdrücklich betont werden, daß im Rahmen von HF (Stoner-Bild) genau das gegenteilige Verhalten vorliegt. Hier zeigt sich die Schwäche von HF besonders deutlich. In HF wächst die Curie-Temperatur bei festgehaltenem  $W$  im Limes starker Korrelation proportional zu  $U$  an (Abb. 5.7(a)). Als direkte Folge sättigt  $T_C/U$  in Abbildung 5.7(b) als Funktion von  $U/W$  auf einem hohen Niveau. Angewendet auf Filmsysteme resultiert bei endlichen  $U/W$  der Trend zu einer erhöhten magnetischen Stabilität an der Oberfläche bzw. in der Monolage. Dies wird von den numerischen Ergebnissen bestätigt. Im Limes starker Korrelation wird in HF die Curie-Temperatur unabhängig von der Bandbreite<sup>4</sup>, und eine Lagenabhängigkeit

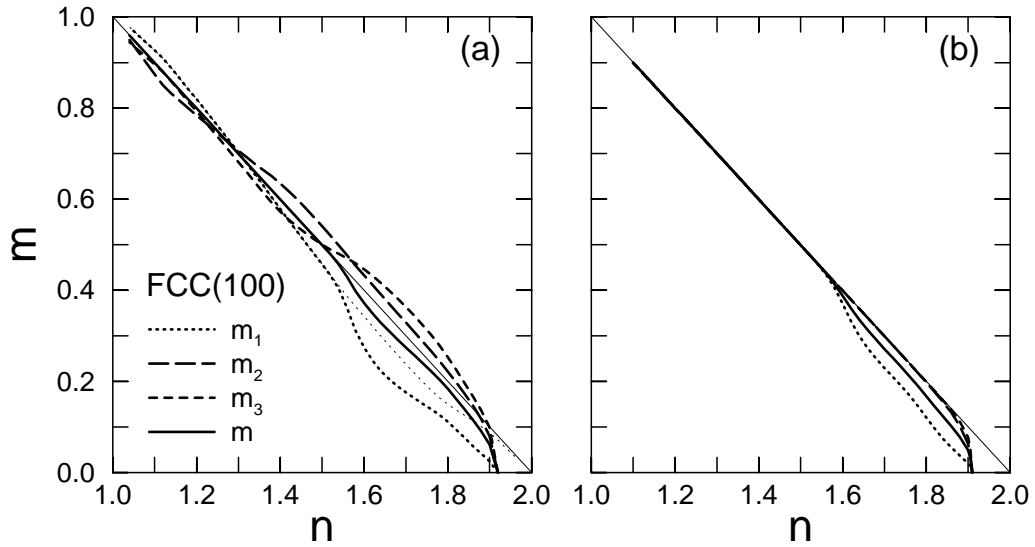
<sup>4</sup> Dies sieht man für eine kastenförmige Zustandsdichte sogar analytisch [53]



**Abbildung 5.8.:** Magnetisierung der äußeren Lage  $m_1$  und Magnetisierung einer inneren Lage  $m_b$  ( $\alpha = 10$ ) für ein halbusendliches fcc-Gitter ( $d = 20$ ) mit einer (111)-Oberfläche als Funktion der Temperatur. Das Hoppingintegral innerhalb der äußeren Lage wird dabei über einen Parameter  $\epsilon$  gemäß  $T_{\mathbf{k}}^{11} = T_{01} + \epsilon t \gamma_{\parallel}(\mathbf{k})$  variiert. Die dicken Linien entsprechen dem Fall uniformen Hoppings  $\epsilon = 1.0$ . (a)  $\epsilon = 1.0, 0.9, 0.8, 0.7$ ; (b)  $\epsilon = 1.0, 1.1, 1.2, 1.3$ . Die Abweichungen der Magnetisierung der Oberflächenlage vom ursprünglichen System ( $\epsilon = 1.0$ ) nehmen mit steigender Variation zu. Weitere Parameter: SDA-Rechnung mit explizit geforderter Ladungsneutralität;  $n = 1.4$ ;  $U/W = 3$ ;  $W = 4$  eV.

der magnetischen Eigenschaften wird vollständig unterdrückt.

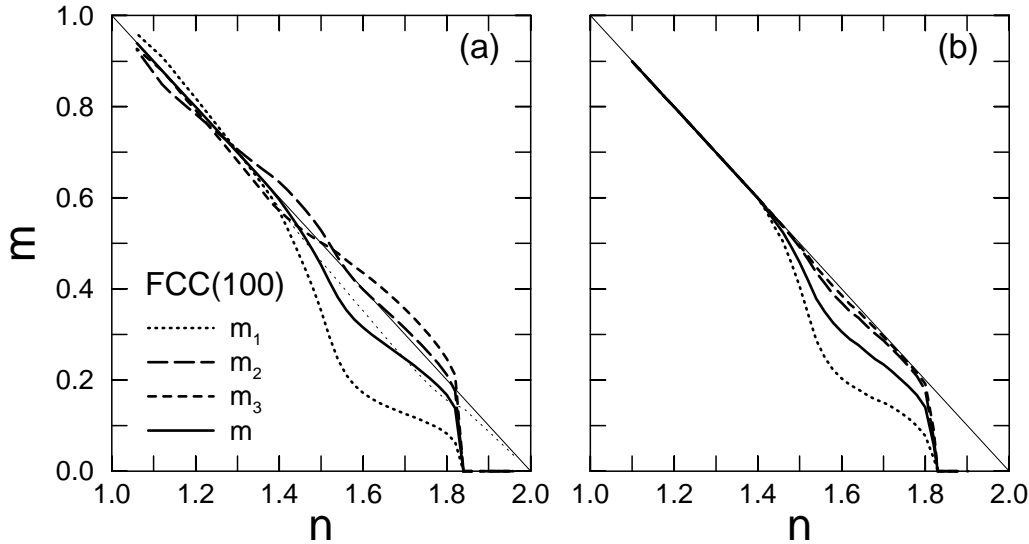
Anhand der Überlegungen zur magnetischen Stabilität dünner Hubbard-Filme läßt sich auch der Einfluß geringfügig variiert Hoppingparameter der Oberflächenlage diskutieren. Der Einfachheit halber beziehen wir uns dabei nur auf das Argument (ii). Bei einem erhöhtem Hoppingintegral in der ersten Lage wird die effektive Breite der LBDOS der Oberfläche vergrößert. Im Limes starker Korrelation resultiert aus der größeren effektiven Bandbreite die Tendenz zu einer erhöhten Curie-Temperatur der ersten Lage. Ein verringertes Hopping reduziert dagegen die magnetische Stabilität an der Oberfläche. Erste SDA- und MAA-Rechnungen mit lagenabhängigen Hoppingparametern zeigen genau dieses Verhalten. In Abbildung 5.8 ist der Einfluß veränderter Hoppingparameter an der Oberfläche auf die Magnetisierung der äußeren Lage  $m_1$  exemplarisch für ein halbusendliches fcc-Gitter ( $d = 20$ ) mit einer (111)-Oberfläche gezeigt. Das Hoppingintegral innerhalb der äußeren Lage wird dabei über einen Parameter  $\epsilon$  gemäß  $T_{\mathbf{k}}^{11} = T_{01} + \epsilon t \gamma_{\parallel}(\mathbf{k})$  variiert (vgl. (4.14)).  $\epsilon = 1.0$  entspricht also dem bisher betrachteten Fall uniformen Hoppings. Um Ladungstransfereffekte, die im Fall veränderter Hoppingparameter sehr groß werden können, zu vermeiden, wurde die Rechnung bei explizit geforderter Ladungsneutralität ( $n_\alpha \stackrel{!}{=} n$ ) durchgeführt. Man sieht deutlich, daß für  $\epsilon < 1$  die magnetische Stabilität an der Oberfläche reduziert, für  $\epsilon > 1$  dagegen erhöht ist. Für  $\epsilon = 1.3$  zeigt die Oberflächenlage sogar die Tendenz zu einer Curie-Temperatur, die größer ist als die des ursprünglichen Systems. Anhand des Stoner-Bildes für Bandmagnetismus ist es klar, daß eine HF-Rechnung genau das gegenteilige Resultat liefert.



**Abbildung 5.9.:** Lagenmagnetisierung  $m_\alpha$  und mittlere Magnetisierung  $m$  eines fünf-lagigen fcc(100)-Films als Funktion der Bandbesetzung  $n$ . (a) SDA-Rechnung; (b) SDA-Rechnung mit zusätzlich geforderter Ladungsneutralität innerhalb des Films. Die dünne durchgezogene Linie ( $2 - n$ ) gibt die mittlere Magnetisierung im voll polarisierten Zustand an. Die dünne punktierte Linie ist gegeben durch  $2 - n_1$  und entspricht der maximal möglichen Polarisation der Oberflächenlage. Weitere Parameter:  $T = 100$  K;  $U/W = 3$ ;  $W = 4$  eV.

Im folgenden soll die Abhängigkeit der Magnetisierung von der Bandbesetzung  $n$  diskutiert werden. Diese ist in Abbildung 5.9(a) für einen fünf-lagigen fcc(100)-Film gezeigt. Für  $n < 1.56$  ist der Film für die hier betrachtete tiefe Temperatur ( $T = 100$  K) vollständig polarisiert ( $m = 2 - n$ ). Aufgrund von Ladungstransfer zwischen den Lagen weichen die Lagenmagnetisierungen geringfügig von der Kurve  $m = 2 - n$  ab. Für  $n > 1.56$  sind zwar die inneren Lagen weiterhin ferromagnetisch gesättigt, aber die Oberflächenlage erreicht nicht mehr die volle Polarisation ( $m_1 < 2 - n_1$ ). Für  $n > 1.91$  verschwindet die Magnetisierung vollständig. Diese obere Schranke verschiebt sich mit wachsender Filmdicke bis  $n = 2.0$  im Einklang mit den Resultaten für das dreidimensionale fcc-Gitter. Für Filme in der fcc(111)-Geometrie ist die Abhängigkeit von der Bandbesetzung hier nicht gezeigt. Im Gegensatz zur offeneren fcc(100)-Geometrie sind in fcc(111)-Filmen für  $T \rightarrow 0$  alle Lagen vollständig polarisiert.

Wir wollen an dieser Stelle die SDA-Resultate mit den Ergebnissen im Rahmen der MAA vergleichen (Abb. 5.10(a)). Die MAA-Rechnungen wurden für sehr starke Coulomb-Wechselwirkung  $U = 12.5W$  durchgeführt. Das qualitative Verhalten der Magnetisierung als Funktion der Bandbesetzung ist in beiden Theorien ähnlich. Allerdings ist im Rahmen der MAA für Bandbesetzungen  $n > 1.5$  die Abweichung der Magnetisierung der Oberflächenlage von der ferromagnetischen Sättigung deutlich größer als in der SDA. Ähnlich wie die Trends im Temperaturverhalten läßt sich die Abhängigkeit von der Bandbesetzung über die Lagenabhängigkeit der LBDOS abschätzen. Nimmt man die LBDOS der äußeren Lage als Einteilcheninput ( $\rho_0(E) = \rho_{0,1}(E)$ ) einer separaten MAA-Rechnung, so resultiert eine obere

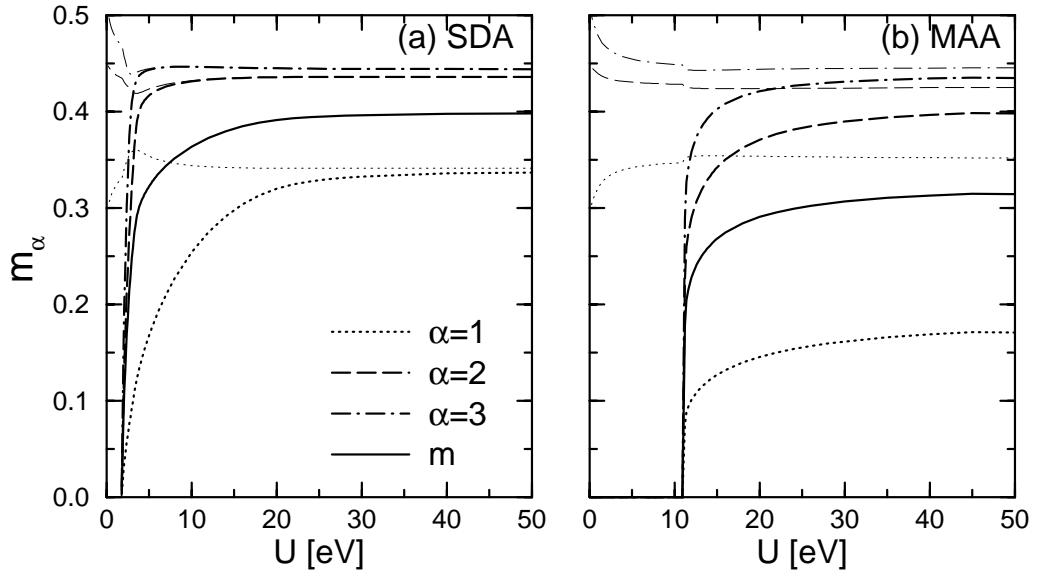


**Abbildung 5.10.:** Lagenmagnetisierung  $m_\alpha$  und mittlere Magnetisierung  $m$  eines fünf-lagigen fcc(100)-Films als Funktion der Bandbesetzung  $n$ . (a) MAA-Rechnung; (b) MAA-Rechnung mit zusätzlich geforderter Ladungsneutralität innerhalb des Films. Die dünne durchgezogene Linie ( $2 - n$ ) gibt die mittlere Magnetisierung im voll polarisierten Zustand an. Die dünne punktierte Linie ist gegeben durch  $2 - n_1$  und entspricht der maximal möglichen Polarisation der Oberflächenlage. Weitere Parameter:  $T = 100$  K;  $U/W = 3$ ;  $W = 4$  eV.

kritische Bandbesetzung, bis zu der spontaner Ferromagnetismus möglich ist, von  $n_c^{(1)} = 1.43$ . Diese obere Schranke ändert sich nur unwesentlich für noch stärkere Coulomb-Wechselwirkungen und korrespondiert direkt mit dem starken Abfall der Oberflächenmagnetisierung in Abbildung 5.10. Die endliche Magnetisierung der Oberflächenlage für  $n \gtrsim 1.5$  ist in diesem Sinne allein durch die Magnetisierung der inneren Lagen induziert<sup>5</sup>. Während die inneren Lagen fast vollständig polarisiert sind, zeigt die Oberflächenlage nur eine sehr schwache Magnetisierung. In der MAA, die in Bezug auf spontanen Ferromagnetismus restriktiver ist als die SDA, nehmen in der fcc(100)-Geometrie die Oberflächeneffekte zu [133]. Im Gegensatz zur offeneren fcc(100)-Geometrie sind in fcc(111)-Filmen für  $T \rightarrow 0$  alle Lagen vollständig polarisiert.

Um das magnetische Verhalten dünner fcc(100)-Filme bei  $n = 1.6$  noch etwas genauer zu analysieren, ist in Abbildung 5.11 die Lagenmagnetisierung  $m_\alpha$  in Abhängigkeit von der Coulomb-Wechselwirkung gezeigt. In der SDA (Abb. 5.11(a)) laufen die inneren Lagen sehr schnell in Sättigung. Die äußere Lage ist zunächst nur schwach polarisiert, steigt aber mit wachsender Wechselwirkung kontinuierlich bis zur vollständigen Sättigung an. In der MAA (Abb. 5.11(b)) zeigt die äußere Lage dagegen für alle  $U$  nur eine geringe Polarisation (weniger als 50%). Der steilere Anstieg der Oberflächenmagnetisierung in der Nähe der kritischen Wechselwirkung macht deutlich, daß in der MAA die Kopplung zwischen den Lagen stärker ist als in der SDA.

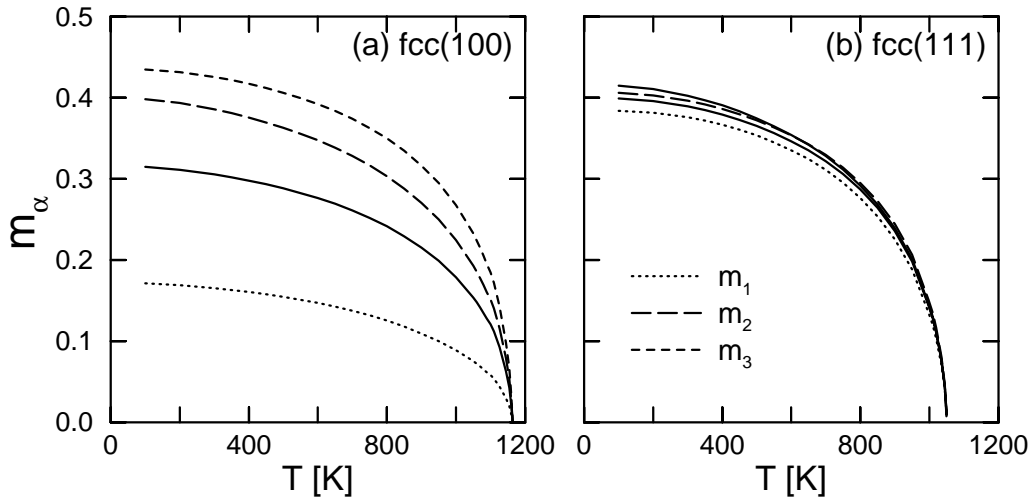
<sup>5</sup>Das Verhalten im Rahmen der SDA ist qualitativ sehr ähnlich. Hier finden wir jedoch eine höhere kritische Bandbesetzung der „separierten“ Oberflächenlage von  $n_c^{(1)} = 1.7$ .



**Abbildung 5.11.:** Lagenmagnetisierung  $m_\alpha$  und mittlere Magnetisierung  $m$  als Funktion der Coulomb-Wechselwirkung  $U$  für einen fünfzähligen fcc(100)-Film mit einer Bandbesetzung von  $n = 1.6$  berechnet in der (a) SDA und (b) MAA. Die dünnen Linien sind gegeben durch  $2 - n_\alpha$  und entsprechen der maximal möglichen Polarisierung in der jeweiligen Lage. Weitere Parameter:  $W = 4.0 \text{ eV}$ ;  $T = 100 \text{ K}$ .

Es ist interessant, zum Vergleich die Magnetisierungskurven als Funktion der Bandbesetzung bei explizit geforderter Ladungsneutralität  $n_\alpha \stackrel{!}{=} n$  zu betrachten (Abbildungen 5.9(b) und 5.10(b)). Im Fall ferromagnetischer Sättigung verschwindet natürlich die Lagenabhängigkeit der Magnetisierung. Es existiert aber weiterhin ein Bereich der Bandbesetzung, in dem die Magnetisierung von der ferromagnetischen Sättigung abweicht. Auch in diesem Bereich werden die Kurven zwar etwas glatter, ihr qualitativer Verlauf bleibt allerdings der gleiche wie in Abb. 5.9(a) und 5.10(a). Auch als Funktion der Coulomb-Wechselwirkung finden wir im Fall explizit geforderter Ladungsneutralität (hier nicht gezeigt) qualitativ das gleiche Bild wie in Abbildung 5.11. Wir können daher folgern, daß selbst für tiefe Temperaturen, für die der Ladungstransfer zwischen den Lagen am größten ist, das qualitative Verhalten der Lagenmagnetisierung durch Ladungstransfereffekte nur unwesentlich beeinflusst wird.

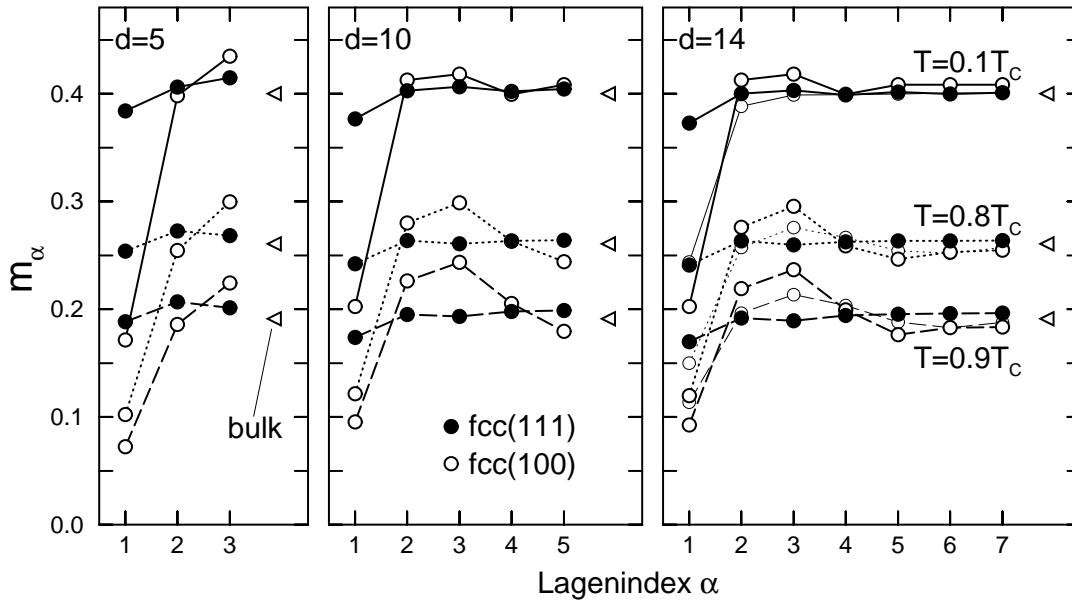
In Abbildung 5.12 sind die Magnetisierungskurven fünfzähliger Filme in der MAA als Funktion der Temperatur gezeigt [133]. Dabei wurde die Bandbesetzung  $n = 1.6$  aus dem Bereich gewählt, in dem für Filme in der fcc(100)-Geometrie die Magnetisierung der Oberflächenlage stark reduziert ist. Hier sind die Unterschiede zwischen der fcc(100)- und der fcc(111)-Filmstruktur am deutlichsten ausgeprägt. Für den fcc(100)-Film finden wir für alle Temperaturen eine sehr starke Lagenabhängigkeit der Magnetisierung. In der fcc(111)-Geometrie dagegen liegen die Magnetisierungen der einzelnen Lagen nahe zusammen und der Film ist insbesondere bei  $T = 0$  vollständig polarisiert. Man beachte, daß die drastischen Unterschiede im magnetischen Verhalten der beiden Filmstrukturen allein aus der unterschiedlich stark reduzierten Koordinationszahl der Oberfläche resultieren. Für den fcc(100)-Film (Abb. 5.12(a)) finden wir im Gegensatz zu Abbildung 5.1(a) keine Überla-



**Abbildung 5.12.:** Lagenmagnetisierung  $m_\alpha$  und mittlere Magnetisierung  $m$  eines fünf-lagigen Hubbard-Films im Rahmen der MAA als Funktion der Temperatur  $T$ . (a) fcc(100)- und (b) fcc(111)-Filmgeometrie. Weitere Parameter:  $n = 1.6$ ;  $U/W = 12.5$ ;  $W = 4 \text{ eV}$

gerung von zwei Temperaturregimen. Im SDA-Resultat bei  $n = 1.4$  resultiert das annähernd lineare Temperaturverhalten der Oberflächenlage in der Nähe von  $T_C$  aus ihrer Tendenz zu einer reduzierten aber endlichen Curie-Temperatur. In der MAA-Rechnung für den fcc(100)-Film bei  $n = 1.6$  ist die Magnetisierung der Oberflächenlage dagegen bei allen Temperaturen allein durch die inneren Lagen induziert. Obwohl die mittlere Magnetisierung für tiefe Temperaturen in der fcc(100)-Struktur geringer ist als in der fcc(111)-Struktur, ist die entsprechende Curie-Temperatur etwas erhöht ( $T_C^{(100)}(d = 5) = 1140 \text{ K}$ ,  $T_C^{(111)}(d = 5) = 1050 \text{ K}$ ). Dieser Effekt läßt sich wiederum anhand einer lagenseparierten MAA-Rechnung nachvollziehen. Als Funktion der Filmstärke konvergieren die Curie-Temperaturen zum zugehörigen Wert für das dreidimensionale fcc-Gitter ( $T_C^{\text{fcc}} = 1050 \text{ K}$ ) für  $d^{(111)} \approx 3$  und  $d^{(100)} \approx 6$ .

Es soll nun untersucht werden, wie sich die Unterschiede zwischen der fcc(100)- und der fcc(111)-Filmgeometrie auf die entsprechenden Magnetisierungsprofile ( $\hat{=}$  Magnetisierung als Funktion des Lagenindex  $\alpha$ ) auswirken. Das Magnetisierungsprofil ist in [Abbildung 5.13](#) für verschiedene Filmstärken ( $d = 5, 10, 14$ ) und jeweils drei verschiedene Temperaturen ( $T = 0.1, 0.8, 0.9 T_C$ ) aufgetragen. Die Magnetisierungsprofile sind symmetrisch zur mittleren Lage. Während die Filme in der fcc(111)-Geometrie annähernd gleichförmig magnetisiert sind, sieht man bei den fcc(100)-Filmen deutlich die starke Reduktion der Magnetisierung an der Oberfläche. Für dünne fcc(100)-Filme ( $d = 5$ ) nimmt die Magnetisierung für alle Temperaturen kontinuierlich bis zur mittleren Lage zu. Interessant ist das Verhalten der inneren Lagen für dickere fcc(100)-Filme ( $d = 10, 14$ ). Für tiefe Temperaturen ( $T = 0.1 T_C$ ) sind die inneren Lagen vollständig polarisiert und annähernd gleichförmig magnetisiert. Allerdings nimmt die Lagenabhängigkeit der Magnetisierung mit steigender Temperatur zu. Die Magnetisierung hat ein Maximum bei  $\alpha = 3$  und zeigt als Funktion des Lagenindex  $\alpha$  ein oszillatorisches Verhalten. Für eine Filmstärke von  $d = 14$  sieht man, daß die Magnetisierung der mittleren Lagen schließlich zu einem endlichen Wert konvergiert, der sehr nahe an der zugehörigen Magnetisierung des Volumenkristalls liegt. Zum Vergleich sind in [Abbildung 5.13](#) für  $d = 14$  zusätz-



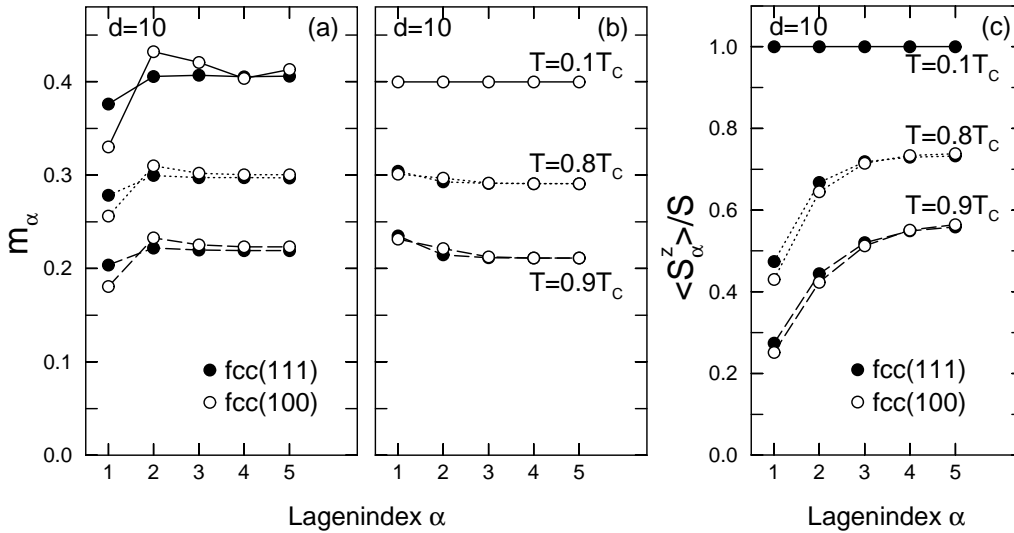
**Abbildung 5.13.:** MAA-Rechnung: Lagenmagnetisierung  $m_\alpha$  als Funktion des Lagenindex  $\alpha$  („Magnetisierungsprofil“) in fcc(100)- und fcc(111)-Filmen der Dicke  $d = 5, 10$  und  $14$ . Durchgezogene Linien:  $T = 0.1T_C$ ; punktiert Linien:  $T = 0.8T_C$ ; gestrichelte Linien:  $T = 0.9T_C$ . Die Dreiecke markieren die zugehörigen Magnetisierungen des dreidimensionalen fcc-Gitters (bulk). Zusätzlich ist für den 14-lagigen fcc(100)-Film das Magnetisierungsprofil bei erzwungener Ladungsneutralität gezeigt. Das Magnetisierungsprofil der Filme ist symmetrisch zur zentralen Lage. Weitere Parameter:  $n = 1.6$ ;  $U/W = 12.5$ .

lich die temperaturabhängigen Magnetisierungsprofile für einen fcc(100)-Film mit erzwungener Ladungsneutralität gezeigt. Die Oszillationen der Magnetisierung bei endlichen Temperaturen sind hier etwas abgeschwächt, qualitativ finden wir jedoch dasselbe Verhalten wie für die Filme mit uniformen Bandschwerpunkten.

Es ist interessant, die Magnetisierungsprofile im Rahmen der MAA mit entsprechenden HF-Resultaten sowie mit Magnetisierungsprofilen in dünnen Heisenberg-Filmen zu vergleichen. In Abbildung 5.14(a) und (b) sind die Magnetisierungsprofile für fcc(100)- und fcc(111)-Filme der Dicke  $d = 10$  für HF gezeigt. In der normalen HF-Rechnung mit uniformen Bandschwerpunkten (Abb. 5.14(a)) ist für beide Filmgeometrien die Magnetisierung der Oberflächenlage reduziert. Allerdings zeigt ein Vergleich mit den Ergebnissen bei explizit geforderter Ladungsneutralität, daß dieser Effekt allein durch den Ladungstransfer zwischen den Lagen des Films hervorgerufen wird. Im ladungsneutralen Film (Abb. 5.14(b)) ist die Magnetisierung der Oberflächenlage bei endlichen Temperaturen gegenüber den inneren Lagen erhöht. Dies gilt unabhängig von der Bandbesetzung<sup>6</sup> und verdeutlicht nocheinmal die erhöhte magnetische Stabilität an der Oberfläche im Rahmen von HF (vgl. Diskussion von Abb. 5.5-5.7).

In Bezug auf die Magnetisierungsprofile dünner Heisenberg-Filme ist bekannt [10, 13], daß in uniformen Heisenberg-Filmen ohne lagenabhängige Anisotropien die Lagenmagnetisierung monoton von der Oberflächenlage bis zur

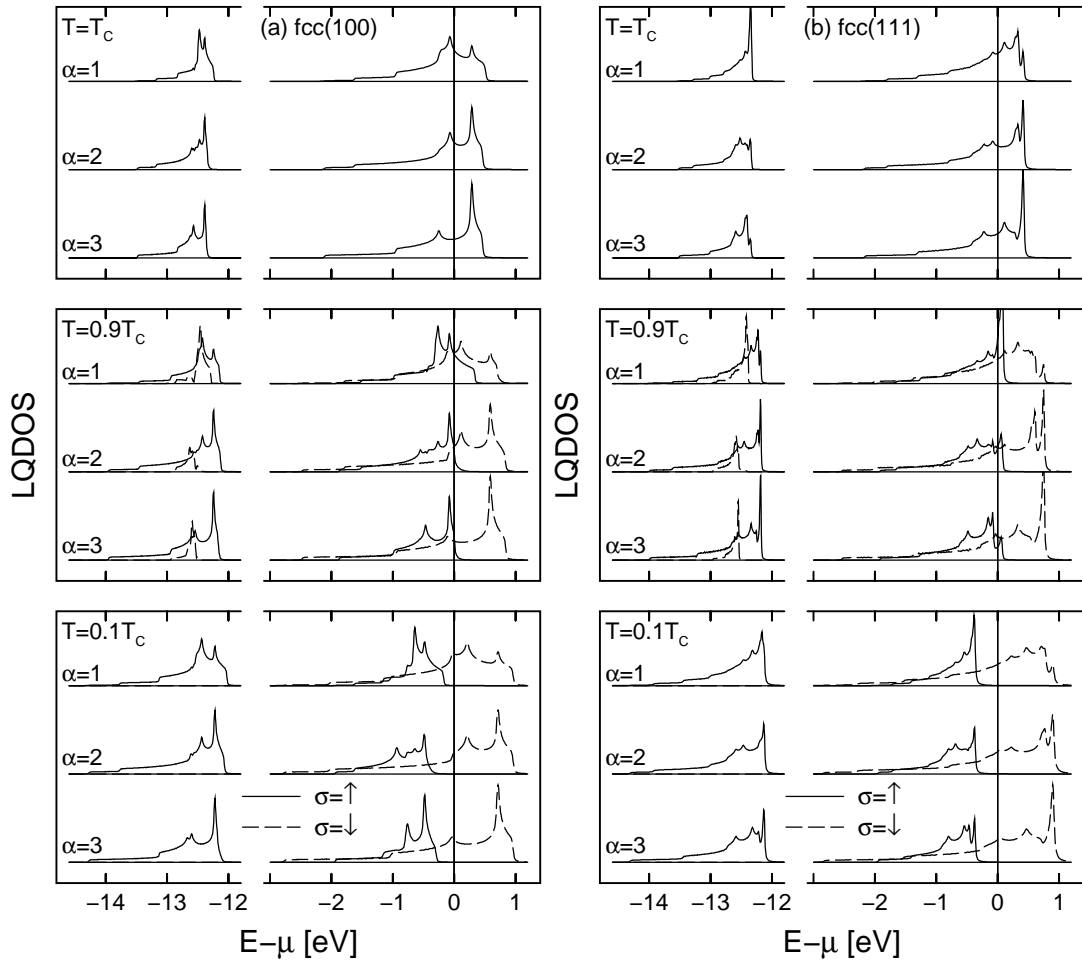
<sup>6</sup> Insbesondere gilt dies auch für den Fall ohne explizit geforderte Ladungsneutralität für Bandbesetzungen, für die Ladungstransfereffekte nur gering sind



**Abbildung 5.14.:** (a) und (b) Magnetisierungsprofil eines Hubbard-Films der Dicke  $d = 10$  im Rahmen der Hartree-Fock-Naherung. (a) normale HF-Rechnung; (b) HF-Rechnung mit erzwungener Ladungsneutralitat zwischen den Lagen des Films. Weitere Parameter:  $n = 1.6$ ;  $U = W$ . (c) Magnetisierungsprofil eines Heisenberg-Films der Dicke  $d = 10$  mit der Spinquantenzahl  $S = \frac{1}{2}$  berechnet im Rahmen der Mean-Field-Naherung. Durchgezogene Linien:  $T = 0.1T_C$ ; punktiert Linien:  $T = 0.8T_C$ ; gestrichelte Linien:  $T = 0.9T_C$ . Das Magnetisierungsprofil der Filme ist symmetrisch zur zentralen Lage.

zentralen Lage ansteigt. Der Grund fur die reduzierte magnetische Stabilitat der aueren Lage ist die verringerte magnetische Kopplung aufgrund ihrer reduzierten Koordinationszahl. In Abbildung 5.14 sind entsprechende Magnetisierungsprofile von Heisenberg-Filmen in der Mean-Field-Naherung gezeigt. Zumindest im Rahmen der Mean-Field-Naherung sind die Magnetisierungsprofile der fcc(100)- und fcc(111)-Filme nahezu identisch. Die Abhangigkeit von der Filmgeometrie ist hier also wesentlich geringer als im Fall der Hubbard-Filme im Rahmen der MAA (Abb. 5.13).

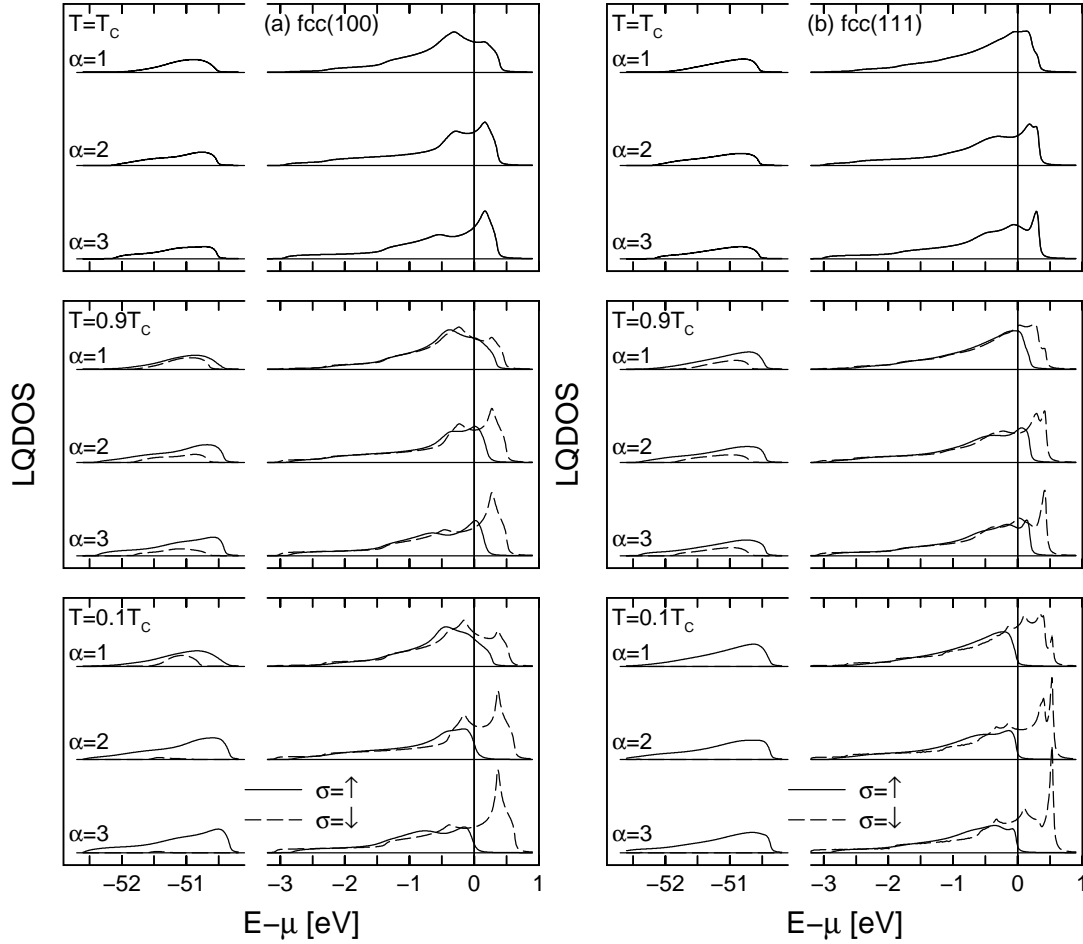
Im folgenden wird die spin-, lagen- und temperaturabhangige elektronische Struktur der Hubbard-Filme diskutiert. Mit Hilfe der lokalen Quasiteilchenzustandsdichte (LQDOS; Abb. 5.15 und 5.16) und der Quasiteilchenbandstruktur (Abb. 5.17-5.20) lassen sich die magnetischen Eigenschaften der Filmsysteme auf mikroskopischer Basis analysieren. In den Abbildungen 5.15 und 5.16 sind die LQDOS funflagiger fcc(100)- und fcc(111)-Filme, berechnet mit der SDA (Abb. 5.15) und der MAA (Abb. 5.16), fur drei verschiedene Temperaturen gezeigt. Die Parameter sind dabei passend zu den entsprechenden Magnetisierungskurven (SDA: Abb. 5.1; MAA: Abb. 5.12) gewahlt. Analog zum translationssymmetrischen Fall wird die grobe Struktur der LQDOS von zwei unterschiedlichen korrelationsinduzierten Bandaufspaltungen dominiert. Die starke Coulomb-Wechselwirkung fuhrt zu einer Aufspaltung der LQDOS in zwei Subbander, die durch einen Energiebetrag der Groenordnung  $U$  voneinander getrennt sind. Ein Elektron aus dem unteren Subband hupft im wesentlichen uber leere Gitterplatze, wahrend sich ein Elektron aus dem oberen Subband hauptsachlich uber bereits von einem Elektron mit entgegengesetztem Spin



**Abbildung 5.15.:** Spin- und lagenabhängige Quasiteilchenzustandsdichte  $\rho_{\alpha\sigma}(E)$  (LQDOS) eines fünf-lagigen Films als Funktion der Energie  $E$  für verschiedene Temperaturen  $T \leq T_C$ . SDA-Rechnung für eine (a) fcc(100)- und (b) fcc(111)-Filmgeometrie. Durchgezogene Linien: Majoritätsspektrum ( $\sigma = \uparrow$ ); gestrichelte Linien: Minoritätsspektrum ( $\sigma = \downarrow$ ).  $\alpha = 1$  bezeichnet die Oberflächenlage. Die Parameter sind passend zu Abb. 5.1 gewählt:  $n = 1.4$ ;  $U/W = 3$ ;  $W = 4 \text{ eV}$ ;  $T_{0\alpha} = 0 \forall \alpha$ .

besetzte Gitterplätze bewegt. Der zweite Prozeß erfordert die Wechselwirkungsenergie  $U$ . Die Wahrscheinlichkeit für ein  $\sigma$ -Elektron, die eine oder die andere Situation zu realisieren, bestimmt das Gewicht ( $\hat{=}$  Fläche) des zugehörigen Subbandes. Im Limes starker Korrelation skalieren die spektralen Gewichte der unteren und oberen Subbänder mit  $(1 - n_{\alpha-\sigma})$  bzw.  $n_{\alpha-\sigma}$ . Für das hier betrachtete, mehr als halbgefüllte System liegt das chemische Potential im Bereich des oberen Subbandes. Das untere Subband ist daher vollständig gefüllt. Beim Vergleich der SDA- mit den MAA-Spektren (siehe z.B. Abb. 5.15 und 5.16 bei  $T = T_C$ ) fällt auf, daß die Strukturen der LQDOS der MAA wesentlich weicher sind. Dies liegt an der Berücksichtigung der Quasiteilchendämpfung im Rahmen der MAA. Insbesondere das untere Subband verliert in der MAA-Rechnung jegliche Feinstruktur, da hier der Einfluß der Quasiteilchendämpfung sehr groß ist.

Für Temperaturen unterhalb der Curie-Temperatur  $T_C$  tritt in der LQDOS der Abbildungen 5.15 und 5.16 zusätzlich zur Hubbard-Aufspaltung eine Spinaufspal-



**Abbildung 5.16.:** Spin- und lagenabhängige Quasiteilchenzustandsdichte  $\rho_{\alpha\sigma}(E)$  (LQDOS) eines fünf-lagigen Films als Funktion der Energie  $E$  für verschiedene Temperaturen  $T \leq T_C$ . MAA-Rechnung für eine (a) fcc(100)- und (b) fcc(111)-Filmgeometrie. Durchgezogene Linien: Majoritätsspektrum ( $\sigma = \uparrow$ ); gestrichelte Linien: Minoritätsspektrum ( $\sigma = \downarrow$ ). Die Parameter sind passend zu Abb. 5.12 gewählt:  $n = 1.6$ ;  $U/W = 12.5$ ;  $W = 4 \text{ eV}$ ;  $T_{0\alpha} = 0 \forall \alpha$ .

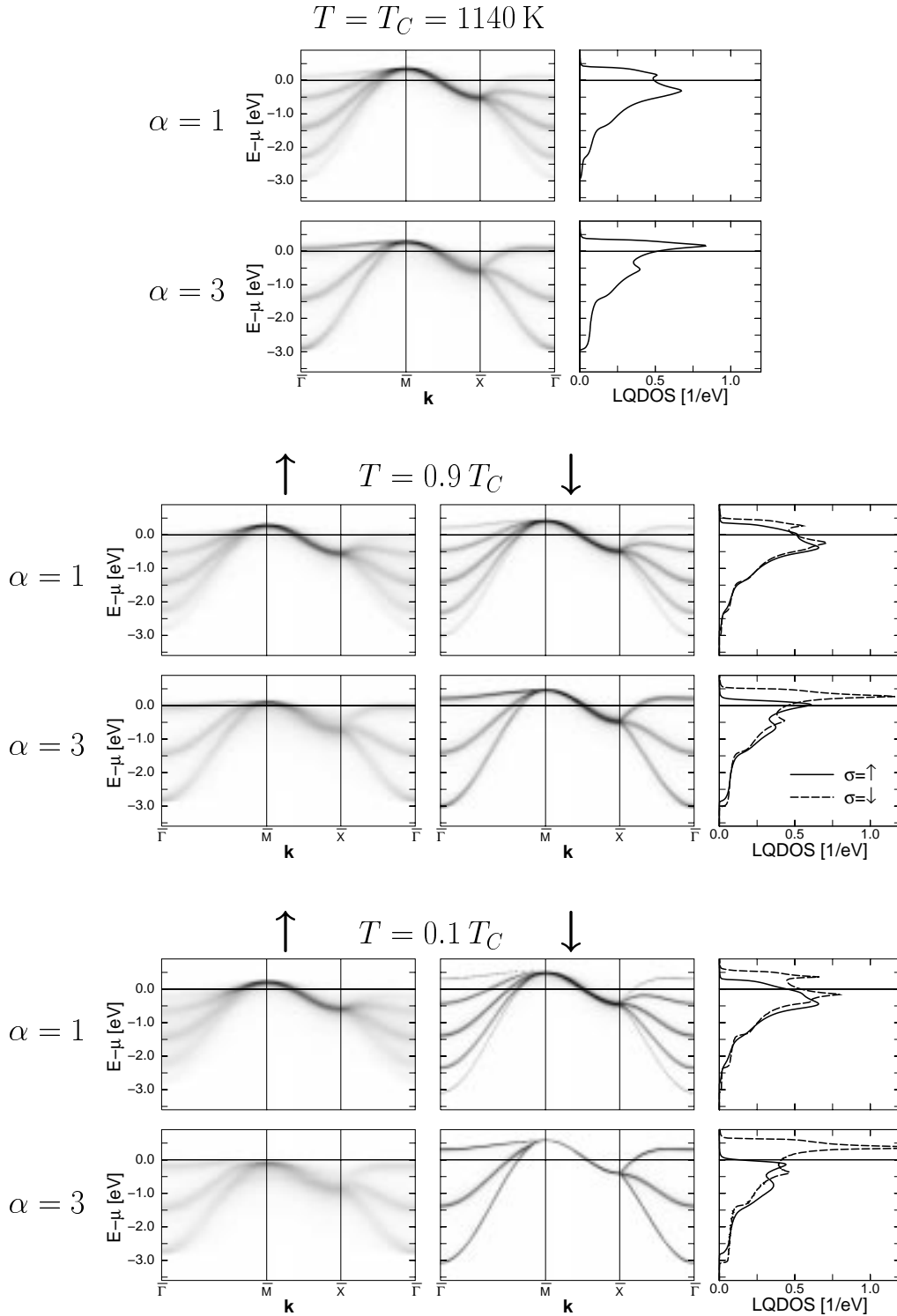
tung („Austauschspaltung“) in ein Majoritätsband ( $\sigma = \uparrow$ ) und ein Minoritätsband ( $\sigma = \downarrow$ ) auf. Die Spinaufspaltung wird induziert von einer Spinasymmetrie der Bandverschiebung  $B_{\alpha\sigma}$  und führt zu einer endlichen Magnetisierung  $m_\alpha = n_{\alpha\uparrow} - n_{\alpha\downarrow}$  der einzelnen Lagen des Films. Ausgehend von der Curie-Temperatur  $T_C$  wird das Temperaturverhalten der LDQOS von zwei Korrelationseffekten bestimmt: Mit abnehmender Temperatur werden die Schwerpunkte der Majoritäts- und Minoritäts-subbänder zunehmend gegeneinander verschoben. Diese spinabhängige Bandverschiebung wird begleitet von einer spinabhängigen Umverteilung des spektralen Gewichts zwischen den unteren und oberen Subbändern in Einklang mit der oben erwähnten Skalierung der Gewichte der Subbänder. Diese Umverteilung von spektralem Gewicht führt zu einem starken spinabhängigen Bandbreiteneffekt als Funktion der Temperatur. Im Majoritätsspektrum wird mit abnehmender Temperatur spektrales Gewicht vom oberen in das untere Subband verlagert. Im Minoritätsspektrum dagegen nimmt das Gewicht des unteren Subbandes kontinuierlich ab

und verschwindet sogar vollständig im Fall ferromagnetischer Sättigung ( $n_{\alpha\uparrow} = 1$ ,  $m_\alpha = 2 - n_\alpha$ ), da hier ein propagierendes ( $\sigma = \downarrow$ )-Elektron notwendigerweise an jedem Gitterplatz auf ein ( $\sigma = \uparrow$ )-Elektron trifft. Bei einer Bandbesetzung von  $n = 1.4$  (Abb. 5.15) ist der fünfflagige Film für beide Filmgeometrien bei tiefen Temperaturen vollständig polarisiert und das Majoritätsspektrum liegt komplett unterhalb des chemischen Potentials  $\mu$ . Für  $n = 1.6$  (Abb. 5.16) gilt dies nur für die fcc(111)-Filmstruktur. Im Fall der fcc(100)-Filmgeometrie dagegen ist für  $T = 0$  das Majoritätsband der äußeren Lage nicht vollständig besetzt, während die inneren Lagen des Films annähernd ferromagnetisch gesättigt sind. Beide Korrelationseffekte – die spinabhängige Verschiebung und der Bandbreiteneffekt – können sich in den hier betrachteten Filmsystemen potentiell lagenabhängig einstellen. Die Lagenabhängigkeit ist in der fcc(111)-Filmstruktur nur gering, während sie für die fcc(100)-Filme deutlich ausgeprägt ist. Hier ist die Spinaufspaltung in der äußeren Lage deutlich geringer als für die inneren Lagen. Dies gilt für alle Temperaturen  $T < T_C$  und erklärt die reduzierte Magnetisierung in der Oberflächenlage.

Die MAA liefert die wellenvektorabhängige Quasiteilchenbandstruktur bei gleichzeitiger Berücksichtigung von Quasiteilchendämpfung. Damit läßt sich die elektronische Struktur der Hubbard-Filme im Detail untersuchen (Abb. 5.17-5.20). Für einen fünfflagigen fcc(100)- und fcc(111)-Film ist in den Abbildungen 5.17 und 5.18 die spin- und lagen- und temperaturabhängige Spektraldichte als Funktion des Wellenvektors (vgl. Abb. 4.2) im Bereich der oberen Subbänder gezeigt [133]. Im Bereich der unteren Subbänder, die vollständig besetzt sind, ist die Spektraldichte relativ strukturlos und nur wegen des von ihr beanspruchten spektralen Gewichts wichtig (die Spektraldichte im unteren Subband ist exemplarisch am  $\bar{\Gamma}$ -Punkt in Abbildung 5.19 zu sehen [134]). Zu gegebenem Wellenvektor  $\mathbf{k}$  treten in der Spektraldichte im allgemeinen mehrere Quasiteilchenpeaks auf. Im Prinzip entspricht die Anzahl der Peaks in jedem Subband gerade der Zahl der Lagen des Films<sup>7</sup>. Aus Symmetriegründen haben jedoch in manchen Lagen einige der Quasiteilchenpeaks verschwindendes spektrales Gewicht. Zwischen  $\bar{M}$  und  $\bar{X}$  für fcc(100)-Filme und am  $\bar{K}$ -Punkt für fcc(111)-Filme verschmelzen die verschiedenen Zweige der Bandstruktur zu einem einzigen Peak (vgl. Abb. 5.17, 5.18 und 5.20). Dies liegt daran, daß für diese Wellenvektoren das Hopping zwischen den Lagen verschwindet ( $\gamma_\perp(\mathbf{k}) = 0$ ). In den Abbildungen 5.17 und 5.18 sind zusätzlich zur Quasiteilchenbandstruktur die LQDOS der Oberflächenlage und der zentralen Lage gezeigt. Die Van Hove-Singularitäten, die im Falle eines verschwindenden Gradienten aus den verschiedenen Zweigen der Bandstruktur resultieren, sind in der LQDOS deutlich zu sehen. Für tiefe Temperaturen sind die Van Hove-Singularitäten im Minoritätsspektrum scharf ausgeprägt, während sie aufgrund der endlichen Breite der Quasiteilchenpeaks im Majoritätsspektrum sowie im paramagnetischen System deutlich verbreitert sind.

Die Breite der Quasiteilchenpeaks entspricht der Lebensdauer der zugehörigen Quasiteilchen. Anhand der Abbildungen 5.17-5.20 sieht man deutlich, daß die Lebensdauer stark spin- und temperaturabhängig ist. Für tiefe Temperaturen finden wir im oberen Minoritätsband scharfe Quasiteilchenpeaks, die eine lange Lebens-

<sup>7</sup> Für dickere Filme liegen die Peaks aufgrund ihrer zunehmenden Anzahl immer dichter zusammen und bilden schließlich im Limes  $d \rightarrow \infty$  ein Kontinuum. Dieses entspricht dann der Projektion der dreidimensionalen Bandstruktur auf die zweidimensionale Brillouin-Zone der Oberfläche.



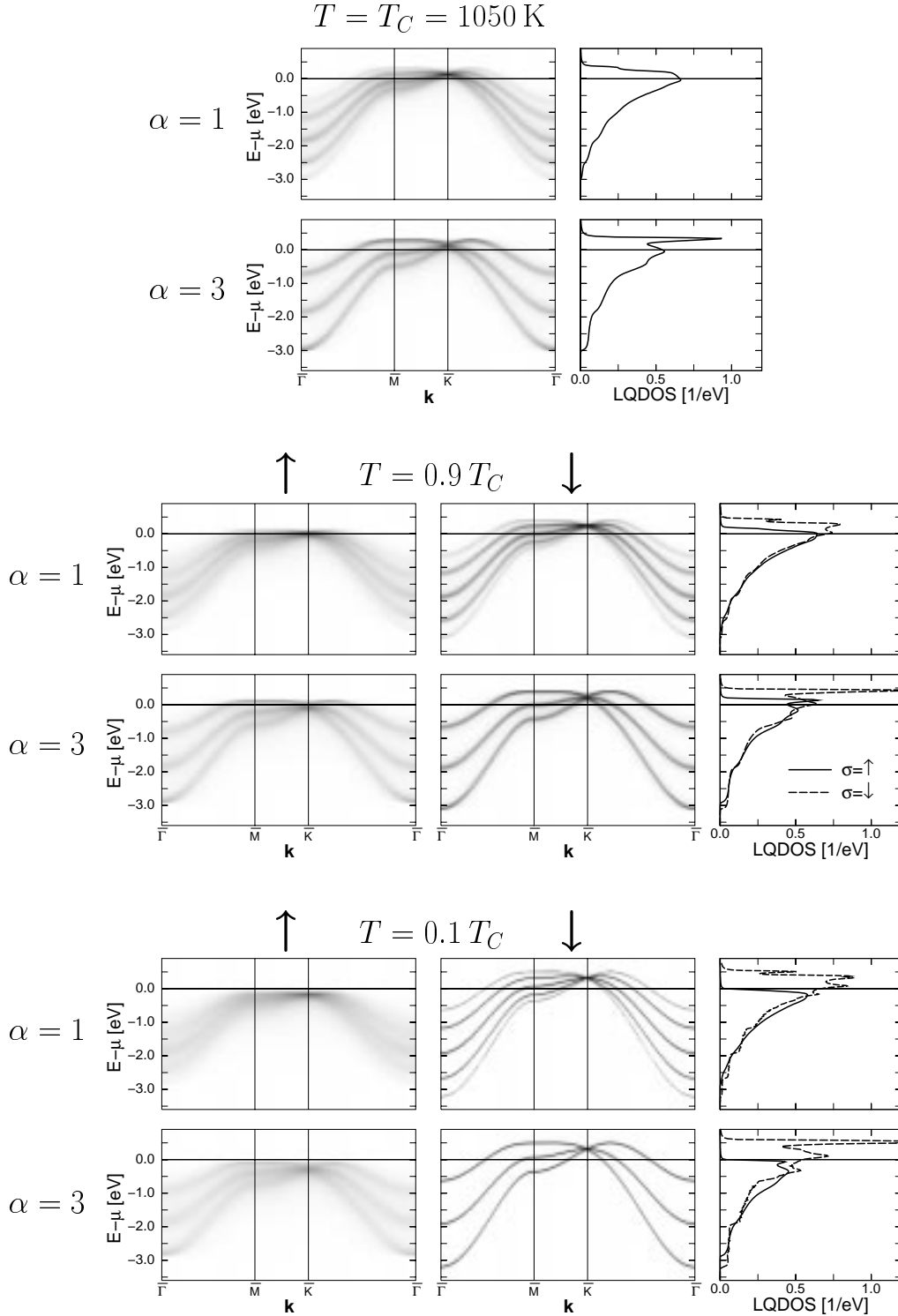
**Abbildung 5.17.:** Spin- und lagenabhängige Spektraldichte  $S_{k\sigma}^{\alpha\alpha}(E)$  eines fünf-lagigen fcc(100)-Films im Dichteplot als Funktion des Wellenvektors  $\mathbf{k}$  entlang der Hochsymmetrierichtungen der Brillouin-Zone (vgl. Abb. 4.2) für drei verschiedene Temperaturen  $T = 0.1, 0.9, 1.0 T_C$ . Zusätzlich ist die lokale Quasiteilchenzustandsdichte (LQDOS) abgebildet. Der Übersichtlichkeit halber ist hier nur das obere Subband gezeigt.  $\alpha = 1$ : Oberflächenlage;  $\alpha = 3$ : zentrale Lage. Weitere Parameter:  $n = 1.6$ ;  $U/W = 12.5$ ;  $W = 4 \text{ eV}$ ;  $T_{0\alpha} = 0 \forall \alpha$ .

dauer anzeigen. Der Grund dafür ist, daß im ferromagnetisch gesättigten Zustand ein ( $\sigma = \downarrow$ )-Elektron zwangsläufig an jedem Gitterplatz auf ein ( $\sigma = \uparrow$ )-Elektron trifft und deshalb effektiv keinen Streuprozessen unterworfen ist. Die Breite der ( $\sigma = \uparrow$ )-Quasiteilchenpeaks dagegen nimmt mit abnehmender Temperatur zu. Im unteren Subband (Abb. 5.19) ist das Quasiteilchenspektrum für beide Spinrichtungen stark gedämpft und die verschiedenen Anregungen, die aus der Lagenstruktur resultieren, sind nahezu ununterscheidbar.

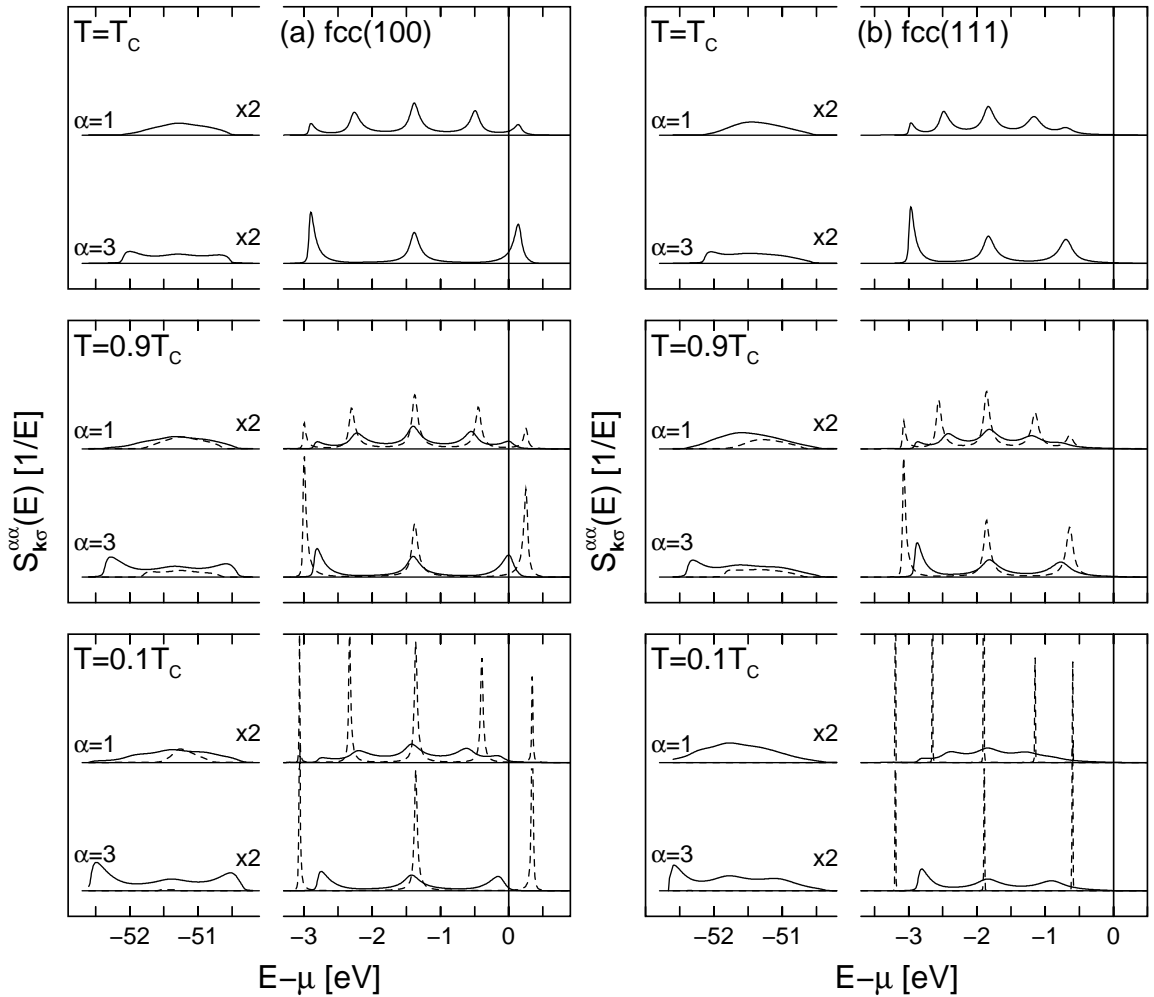
Im folgenden soll die Spinaufspaltung im Quasiteilchenspektrum der Filme genauer analysiert werden. Wie wir bereits anhand der LQDOS (Abb. 5.15 und 5.16) gesehen haben, wird die Spinasymmetrie zwischen Majoritäts- und Minoritätsspektrum durch eine spinabhängige Verschiebung der Schwerpunkte der Subbänder gegeneinander und einen zusätzlichen spinabhängigen Bandbreiteneffekt verursacht. Das Zusammenspiel dieser beiden Korrelationseffekte führt zu einer  $\mathbf{k}$ -abhängigen Spinaufspaltung zwischen den einzelnen Quasiteilchenpeaks der Spektraldichte (Abb. 5.17 und 5.18). Die Spinaufspaltung ist maximal für Quasiteilchenpeaks in der Nähe der oberen Bandkante. Für fcc(100)-Filme ist sie am stärksten in der Nähe des  $\bar{M}$ -Punktes, für Filme in der fcc(111)-Struktur zwischen  $\bar{M}$  und  $\bar{X}$ . Im Falle ferromagnetischer Sättigung kann die Spinaufspaltung in Analogie zum translationssymmetrischen System abgeschätzt werden. Sie ist maximal  $(1 - n_{\alpha\downarrow})[4t - B_{\alpha\downarrow}]$  (vgl. (3.56)-(3.59) sowie [133]), wobei  $(1 - n_{\alpha\downarrow})B_{\alpha\downarrow}$  die effektive Verschiebung zwischen den Schwerpunkten der spinaufgespaltenen oberen Subbänder angibt. Für starke Coulomb-Wechselwirkung ist  $n_{\alpha\downarrow}(1 - n_{\alpha\downarrow})B_{\alpha\downarrow}$  proportional zur kinetischen Energie der ( $\sigma = \downarrow$ )-Elektronen (3.60). Die kinetische Energie der ( $\sigma = \uparrow$ )-Elektronen verschwindet im ferromagnetisch gesättigten Zustand, da das Majoritätsband vollständig gefüllt ist.

Ähnlich wie im Fall des translationssymmetrischen Systems, verursacht das Zusammenspiel von Bandverschiebung und Bandbreiteneffekt in der Nähe des  $\bar{\Gamma}$ -Punktes eine inverse Austauschspaltung zwischen Minoritäts- und Majoritätspeaks der Spektraldichte. Dieses Verhalten ist besonders deutlich am  $\bar{\Gamma}$ -Punkt (Abb. 5.19) zu sehen. Während die Schwerpunkte der oberen ( $\sigma = \downarrow$ )-Subbänder mit abnehmender Temperatur zu höheren Energien hin verschoben werden, wird am  $\bar{\Gamma}$ -Punkt aufgrund des starken Bandbreiteneffekts der unterste Spektraldichtepeak des oberen Subbandes sogar erniedrigt. Im Majoritätsspektrum dagegen nimmt die Breite des oberen Subbandes ab und der Spektraldichtepeak an dessen unterer Bandkante wird geringfügig zu höheren Energien hin verschoben. Daraus resultiert eine inverse Austauschspaltung im Bereich der unteren Bandkante des oberen Subbandes. Die zugehörige Zustandsdichte ist allerdings sehr klein. Aus demselben Grund ist die Position des mittleren Quasiteilchenpeaks des oberen Subbandes am  $\bar{\Gamma}$ -Punkt trotz der zunehmenden Aufspaltung zwischen den Schwerpunkten des ( $\sigma = \uparrow$ )- und ( $\sigma = \downarrow$ )-Spektrums nahezu spin- und temperaturunabhängig. Dieses Verhalten gilt für beide betrachteten Filmgeometrien für  $\mathbf{k}$ -Vektoren in der Nähe von  $\bar{\Gamma}$ .

Neben der Temperatur- und der  $\mathbf{k}$ -Abhängigkeit ist insbesondere die Lagenabhängigkeit der Spinaufspaltung interessant. Anhand von Gleichung (4.14) zusammen mit (4.8), (4.6) und (4.20) sieht man, daß für  $\gamma_{\perp}(\mathbf{k}) \neq 0$  und nicht zu großem Imaginärteil der Selbstenergie die Position der Quasiteilchenpeaks in der Spektral-



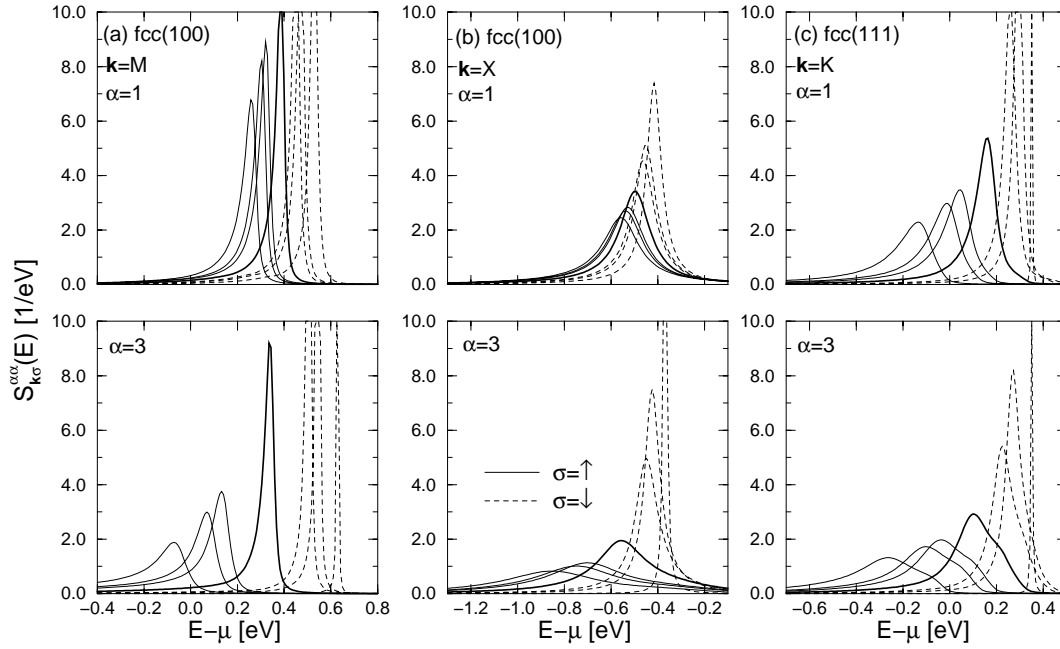
**Abbildung 5.18.:** Spin- und lagenabhängige Spektraldichte  $S_{k\sigma}^{\alpha\alpha}(E)$  eines fünf-lagigen fcc(111)-Films im Dichteplot als Funktion des Wellenvektors  $\mathbf{k}$  entlang der Hochsymmetrierichtungen der Brillouin-Zone (vgl. Abb. 4.2) für drei verschiedene Temperaturen  $T = 0.1, 0.9, 1.0 T_C$ . Zusätzlich ist die lokale Quasiteilchenzustandsdichte (LQDOS) abgebildet. Der Übersichtlichkeit halber ist hier nur das obere Subband gezeigt.  $\alpha = 1$ : Oberflächenlage;  $\alpha = 3$ : zentrale Lage. Weitere Parameter:  $n = 1.6$ ;  $U/W = 12.5$ ;  $W = 4 \text{ eV}$ ;  $T_{0\alpha} = 0 \forall \alpha$ .



**Abbildung 5.19.:** Spektraldichte  $S_{k\sigma}^{\alpha\alpha}(E)$  eines fünf-lagigen Films am  $\bar{\Gamma}$ -Punkt als Funktion der Energie  $E$  für verschiedene Temperaturen  $T \leq T_C$ . MAA-Rechnung für eine (a) fcc(100)- und (b) fcc(111)-Filmgeometrie. Durchgezogene Linien: Majoritätsspektrum ( $\sigma = \uparrow$ ); gestrichelte Linien: Minoritätsspektrum ( $\sigma = \downarrow$ ). Weitere Parameter:  $n = 1.4$ ;  $U/W = 3$ ;  $W = 4\text{eV}$ ;  $T_{0\alpha} = 0 \forall \alpha$ .

dichte lagenunabhängig ist. Dies läßt sich deutlich in den Abbildungen 5.17, 5.18 und 5.19 erkennen. Eine Lagenabhängigkeit im Quasiteilchenspektrum kann hier nur über die Verteilung des spektralen Gewichts zwischen den einzelnen Peaks der Spektraldichte auftreten. Während für die innere Lage ( $\alpha = 3$ ) die beiden äußeren Peaks das größte spektrale Gewicht tragen, ist für die Oberflächenlage ( $\alpha = 1$ ) der mittlere Peak maximal. Die Lagenabhängigkeit in den Gewichten der Quasiteilchenpeaks beeinflusst die Form der über alle  $\mathbf{k}$ -Vektoren summierten LQDOS und trägt damit zur Lagenabhängigkeit der Magnetisierung bei.

Die Spinaufspaltung kann nur für solche Wellenvektoren eine deutliche Lagenabhängigkeit ausbilden, für die  $\gamma_{\perp}(\mathbf{k}) = 0$  gilt. Dies ist für fcc(100)-Filme für  $\mathbf{k}$ -Vektoren am Rande der Brillouin-Zone zwischen  $\bar{M}$  und  $\bar{X}$  der Fall und am  $\bar{K}$ -Punkt für Filme in der fcc(111)-Geometrie (Abb. 5.17 und 5.18). In der Tat zeigt die Spinaufspaltung des fünf-lagigen fcc(100)-Films eine starke Lagenabhängigkeit am  $\bar{M}$ - und  $\bar{X}$ -Punkt. Dies ist sowohl in Abbildung 5.17 als auch in Abbildung 5.20(a)



**Abbildung 5.20.:** Spektraldichte  $S_{k\sigma}^{\alpha\alpha}(E)$  eines fünf-lagigen Films in der MAA als Funktion der Energie  $E$  für verschiedene Temperaturen  $T = 0.1, 0.8, 0.9, 1.0 T_C$ . (a) am  $\bar{M}$ -Punkt und (b) am  $\bar{X}$ -Punkt eines fünf-lagigen fcc(100) Films. (c) am  $\bar{K}$ -Punkt eines fünf-lagigen fcc(111)-Films. Dünne durchgezogene Linien: Majoritätsspektrum ( $\sigma = \uparrow$ ); dünne gestrichelte Linien: Minoritätsspektrum ( $\sigma = \downarrow$ ); dicke durchgezogene Linie: paramagnetische Lösung ( $T = T_C$ ). Die Spinaufspaltung zwischen ( $\sigma = \uparrow$ )- und ( $\sigma = \downarrow$ )-Peaks nimmt mit zunehmender Temperatur ab. Weitere Parameter:  $n = 1.4$ ;  $U/W = 3$ ;  $W = 4 \text{ eV}$ ;  $T_{0\alpha} = 0 \forall \alpha$ .

und (b), in der das Temperaturverhalten der Spektraldichte am  $\bar{M}$ - und  $\bar{X}$ -Punkt aufgetragen ist, deutlich zu sehen. Beim Vergleich der Quasiteilchenbandstruktur und der LQDOS in Abbildung 5.17 wird klar, daß die Lagenabhängigkeit der Spinaufspaltung zwischen  $\bar{M}$ - und  $\bar{X}$  einen wesentlichen Beitrag zur Lagenabhängigkeit der LQDOS liefert. Für den fünf-lagigen Film in der fcc(111)-Geometrie ist eine Lagenabhängigkeit der Spinaufspaltung nur am  $\bar{X}$ -Punkt möglich. Die Lagenabhängigkeit in der Spektraldichte sowie in der LQDOS fällt hier dementsprechend wesentlich geringer aus als für die fcc(100)-Filmgeometrie. Dies korrespondiert mit der deutlich stärkeren Lagenabhängigkeit der Magnetisierung für fcc(100)-Filme.

# 6. Temperaturgetriebener Reorientierungsübergang in dünnen metallischen Filmen

Ein wichtiger Grund für das große Interesse an magnetischen dünnen Filmen ist die Tatsache, daß aufgrund der reduzierten Translationssymmetrie die magnetische Anisotropie in dünnen Filmen um ein bis zwei Größenordnungen größer sein kann als im Volumenkristall. Die magnetische Anisotropie wird durch die Dipol-Wechselwirkung und die Spin-Bahn-Wechselwirkung verursacht. Obwohl die magnetische Anisotropie auch in Filmsystemen nur einen sehr kleinen Beitrag zur Gesamtenergie darstellt, kann das Zusammenspiel von Dipol- und Spin-Bahn-Anisotropie zu einem komplexen magnetischen Verhalten führen. Die magnetische Anisotropie in dünnen Übergangsmetall-Filmen wurde in den letzten Jahren sehr intensiv untersucht. Das Verständnis des Wechselspiels zwischen der Dipol- und der Spin-Bahn-Anisotropie ist nicht zuletzt von technologischem Interesse im Hinblick auf die magnetische Datenspeicherung in möglichst kleinen Systemen.

In diesem Kapitel wird der temperaturgetriebene Reorientierungsübergang in dünnen metallischen Filmen auf der Basis des Hubbard-Modells untersucht. Im Gegensatz zu bisher durchgeführten theoretischen Untersuchungen im Rahmen des Heisenberg-Modells, wird dabei der itinerante Charakter der 3d-Elektronen, die in den magnetischen Übergangsmetallen die kollektive Ordnung ausbilden, berücksichtigt.

## 6.1. Magnetische Anisotropie und Reorientierungsübergang

Die Richtung der Magnetisierung in dünnen magnetischen Filmen ist bestimmt durch die *magnetische Anisotropie* des Systems. Unter magnetischer Anisotropie versteht man die Abhängigkeit der freien Energie  $F$  von der Richtung der Magnetisierung  $(\theta_M, \phi_M)$ . Die spontane Magnetisierung nimmt die Richtung ein, in der die freie Energie minimal ist (*leichte* Magnetisierungsrichtung, *easy axis*). Der polare Winkel  $\theta_M$  ist dabei der Winkel zwischen der Magnetisierung und der Oberflächennormalen  $\hat{\mathbf{n}}$ , und der azimuthale Winkel  $\phi_M$  bestimmt die Richtung der Magnetisierung innerhalb der Filmebene. Eine azimuthale Anisotropie soll hier im weiteren vernachlässigt werden ( $\phi_M \equiv 0$ ). Zudem wird angenommen, daß die Richtung der

Magnetisierung für alle Lagen der Filmsysteme die gleiche ist. Im folgenden unterscheiden wir drei verschiedene Einstellungen der Magnetisierung:

$$\begin{aligned} \theta_M = 0^\circ; & \quad \text{senkrechte Magnetisierung; } \perp \\ \theta_M = 90^\circ; & \quad \text{parallele Magnetisierung; } \parallel \\ 0^\circ < \theta_M < 90^\circ; & \quad \text{gewinkelte Magnetisierung; } \swarrow \end{aligned} \quad (6.1)$$

Unter gewissen Bedingungen beobachtet man für einige Filmsysteme eine Änderung der Magnetisierungsrichtung als Funktion äußerer Parameter, wie z.B. der Filmdicke und der Temperatur. Dies wird als *magnetischer Reorientierungsübergang* bezeichnet.

Um den Reorientierungsübergang in ferromagnetischen Übergangsmetallen zu verstehen, wurden in den letzten Jahren eine Vielzahl sowohl experimenteller als auch theoretischer Untersuchungen durchgeführt. Die Filmsysteme, die einen Reorientierungsübergang zeigen, lassen sich in zwei prototypische Klassen aufteilen. Die meisten experimentell untersuchten Übergangsmetall-Filme zeigen einen Reorientierungsübergang von einer senkrechten zu einer parallelen Magnetisierung ( $\perp \rightarrow \parallel$ ) als Funktion wachsender Filmdicke oder Temperatur. Typische Beispiele sind Fe/Cu(100) [32, 2, 5], Fe/Ag(100) [33, 34] und Co/Au(111) [2]. Im Gegensatz zu diesen Filmsystemen, die wir im folgenden als „*Fe-artig*“ bezeichnen werden, finden Baberschke et al. [3, 4] für Ni/Cu(100) einen Reorientierungsübergang in umgekehrter Richtung. Als Funktion der Filmdicke schlägt die Magnetisierung bei ca. 7 Monolagen von der parallelen in die senkrechte Position ( $\parallel \rightarrow \perp$ ) um. Ein ähnliches Verhalten wird auch für Ni/Cu<sub>3</sub>Au(100)-Filme beobachtet [138]. Farle et al. [31, 4] haben gezeigt, daß ein solcher Reorientierungsübergang für spezielle Filmdicken auch als Funktion steigender Temperatur existiert. Insbesondere wurde nachgewiesen, daß der Reorientierungsübergang in Ni/Cu(100)-Filmen nicht etwa durch strukturelle Veränderungen hervorgerufen wird. Wir werden diese Klasse von Systemen im folgenden als „*Ni-artig*“ bezeichnen.

Ein einfaches Bild<sup>1</sup> zum Verständnis des Reorientierungsübergangs erhält man durch eine Entwicklung der freien Energie  $F$  des Systems nach  $\cos \theta_M$ . Unter Ausnutzung der Zeitumkehrsymmetrie<sup>2</sup> ergibt sich bis zur Ordnung  $\cos^4 \theta_M$ :

$$F(\theta_M) = F_0 - K_2 \cos^2 \theta_M - K_4 \cos^4 \theta_M - \dots \quad (6.2)$$

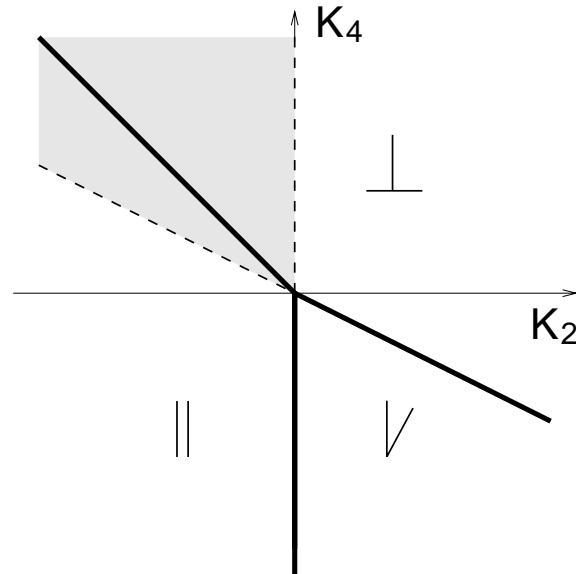
Höhere Terme der Entwicklung sind im allgemeinen vernachlässigbar klein. In kubischen Volumenkristallen verschwindet aus Symmetriegründen die Anisotropiekonstante zweiter Ordnung ( $K_2$ ). Die Anisotropiekonstanten zweiter ( $K_2$ ) und vierter ( $K_4$ ) Ordnung<sup>3</sup> hängen für die hier betrachteten Filmsysteme sowohl von der Filmdicke  $d$  als auch von der Temperatur  $T$  ab. Bei Kenntnis der Anisotropiekonstanten  $K_2$  und  $K_4$  kann man die Magnetisierungsrichtung natürlich sofort angeben. Zur Veranschaulichung sind in Abbildung 6.1 die Bereiche senkrechter ( $\perp$ ), paralleler ( $\parallel$ ) und gewinkelter ( $\swarrow$ ) Magnetisierung in Abhängigkeit von  $K_2$  und  $K_4$  dargestellt.

---

<sup>1</sup> Für eine ausführliche Zusammenfassung siehe z.B. Referenz [139].

<sup>2</sup> Die Zeitumkehrsymmetrie impliziert  $F(\theta_M) = F(-\theta_M)$ . In der Entwicklung (6.2) treten also nur gerade Potenzen von  $\cos \theta_M$  auf.

<sup>3</sup>In der Literatur hat sich bislang keine einheitliche Konvention bezüglich des Vorzeichens der Anisotropiekonstanten in (6.2) etabliert.



**Abbildung 6.1.:** In Abhängigkeit von den Anisotropiekonstanten zweiter ( $K_2$ ) und vierter ( $K_4$ ) Ordnung sind die Bereiche senkrechter ( $\perp$ ), paralleler ( $\parallel$ ) und gewinkelter ( $\vee$ ) Magnetisierung dargestellt. Die dicken durchgezogenen Linien grenzen die jeweiligen Bereiche voneinander ab. Die schattierte Fläche bezeichnet einen metastabilen Bereich, in dem die freie Energie als Funktion von  $\theta_M$  zwei Minima (bei  $\theta_M = 0^\circ$  und  $\theta_M = 90^\circ$ ) besitzt.

Zu beachten ist, daß die freie Energie für gewisse Anisotropiekonstanten als Funktion von  $\theta_M$  zwei Minima besitzt (metastabiler Bereich), die durch eine Energiebarriere voneinander getrennt sind.

Der Reorientierungsübergang läßt sich nun mit Hilfe von Abbildung 6.1 bildlich verstehen [140,3]. Als Funktion der Filmdicke oder der Temperatur ändern sich die Anisotropiekonstanten, und das System bewegt sich im Diagramm 6.1 auf einer Trajektorie von einem Anfangs- in einen Endzustand. Abseits von einem möglichen Übergangspunkt dominiert gewöhnlich die Anisotropiekonstante zweiter Ordnung ( $K_2 \gg K_4$ ) und die Magnetisierungsrichtung ist entsprechend dem Vorzeichen von  $K_2$  festgelegt. Ein Reorientierungsübergang wird durch einen Vorzeichenwechsel von  $K_2$  angezeigt. Da die Anisotropiekonstante  $K_4$  im allgemeinen sehr klein ist, hat sie nur wenig Einfluß auf die Position des Übergangspunktes. Allerdings bestimmt das Vorzeichen von  $K_4$ , ob der Reorientierungsübergang kontinuierlich oder sprunghaft stattfindet. Ein kontinuierlicher Übergang verläuft über den gewinkelten Bereich ( $K_4 < 0$ ), ein sprunghafter Übergang hingegen über den metastabilen Bereich ( $K_4 > 0$ ). Der Wert von  $K_4$  bestimmt dabei die Größe des Übergangsbereiches. Bei einem sprunghaften Reorientierungsübergang treten aufgrund der Energiebarriere zwischen den beiden Minima der freien Energie Hystereseeffekte auf. Experimentell wird in der Regel ein kontinuierlicher Reorientierungsübergang beobachtet.

**Mikroskopische Ursachen der magnetischen Anisotropie.** Auf mikroskopischer Basis gibt es zwei Ursachen für die magnetische Anisotropie – die Dipol-Wechselwirkung zwischen den magnetischen Momenten und die Spin-Bahn-

Wechselwirkung [29, 139]:

$$K_i = K_{i,\text{so}} + K_{i,\text{dip}} \quad i = 2, 4, \dots \quad (6.3)$$

Beide Wechselwirkungen führen zu einer Kopplung zwischen der Richtung der Magnetisierung und dem zugrundeliegenden Gitter. Während die Dipol-Wechselwirkung<sup>4</sup> immer eine parallele Magnetisierung begünstigt ( $K_{i,\text{dip}} < 0$ ), da so die Dipol-Streufelder minimal werden, kann die Spin-Bahn-Wechselwirkung in Abhängigkeit von der elektronischen Struktur der betrachteten Probe sowohl eine parallele als auch eine senkrechte Magnetisierung favorisieren. Ursachen der Spin-Bahn-induzierten Anisotropie sind die gebrochene Symmetrie an der Oberfläche und am Interface Substrat-Film [29] wie auch eine mögliche Verzerrung im Inneren des Films (*spannungsinduzierte* Anisotropie) [141, 142, 143]. Man beachte, daß nur ein starker positiver Anisotropiebeitrag der Spin-Bahn-Wechselwirkung, der den Dipol-Beitrag dominiert, eine senkrechte Magnetisierung ermöglicht. Ein Verständnis des Reorientierungsübergangs erfordert also das Verständnis des Wechselspiels zwischen Spin-Bahn- und Dipol-Anisotropie.

In einigen Übergangsmetall-Filmen wird experimentell sowohl ein Reorientierungsübergang als Funktion der Filmdicke als auch als Funktion der Temperatur beobachtet. An den zugehörigen Phasendiagrammen [32, 31, 4] sieht man, daß beide Reorientierungsübergänge eng zusammenhängen (Abb. 1.1). Trotzdem bedarf es unterschiedlicher Herangehensweisen, um beide Arten von Reorientierungsübergängen physikalisch zu verstehen.

**Reorientierungsübergang als Funktion der Filmdicke.** Der dickengetriebene Reorientierungsübergang gilt als relativ gut verstanden im Rahmen einer phänomenologischen Zerlegung der Anisotropiekonstanten in einen Oberflächen- und einen Volumenterm:

$$K_i(d, T) = K_i^V(T) + 2K_i^S(T)/d. \quad (6.4)$$

Diese Zerlegung wird durch viele experimentelle Resultate gestützt [2, 144, 30, 3]. Ihre Gültigkeit wird natürlich durch mögliche strukturelle Übergänge [145, 146] bei zunehmender Filmdicke begrenzt. Der Term  $2K_i^S/2$  beinhaltet alle dickenabhängigen Beiträge zur magnetischen Anisotropie, also insbesondere den Beitrag der beiden Grenzschichten<sup>5</sup>. Der Volumenterm  $K_i^V$  dagegen schließt alle dickenunabhängigen Beiträge ein. Die Dipol-Wechselwirkung trägt im wesentlichen nur zur Volumen-anisotropie ( $K_i^V$ ) bei [147], während die Spin-Bahn-Wechselwirkung für beide Anteile ( $K_i^V$  und  $K_i^S$ ) wichtig sein kann.

Auf der Basis der Zerlegung (6.4) lassen sich nun sowohl die Fe-artigen als auch die Ni-artigen Reorientierungsübergänge als Funktion der Filmdicke verstehen. Die Grundlage dafür liefern experimentelle Resultate für die zugehörigen Anisotropiekonstanten ( $K_i^S$ ,  $K_i^V$ ). Die Fe-artigen Systeme zeichnen sich durch eine große

---

<sup>4</sup> Die von der Dipol-Wechselwirkung induzierte Anisotropie wird auch als *shape*-Anisotropie bezeichnet.

<sup>5</sup> Es ist klar, daß in der experimentellen Situation die Grenzschicht Film/Vakuum im allgemeinen einen anderen Beitrag zur Anisotropie liefert als die Grenzschicht Film/Substrat.  $K_i^S$  entspricht dann dem Mittelwert beider Beiträge.

positive Oberflächenanisotropie  $K_2^S$  aus. Der Volumenterm wird dominiert vom Beitrag der Dipol-Wechselwirkung und ist daher negativ ( $K_2^V < 0$ ). In dünnen Filmen überwiegt der Einfluß der Oberflächenanisotropie und die Magnetisierung stellt sich senkrecht zur Filmebene ein. Mit zunehmender Filmdicke schlägt die Magnetisierungsrichtung in die parallele Position um, da der Volumenterm dominant wird [2]. In den Ni-artigen Systemen ist die Situation anders. Aufgrund einer starken tetragonalen Verzerrung der Ni/Cu(100)-Filme ( $\sim 5.5\%$ ) liefert die Spin-Bahn-Wechselwirkung einen großen positiven Beitrag zur Volumenanisotropie ( $|K_{2,\text{so}}^V| > |K_{2,\text{dip}}^V|$ ) [3, 4, 141, 143].  $K_2^V$  ist daher positiv und favorisiert eine senkrechte Magnetisierung. Der Oberflächenterm  $K_2^S$  ist dagegen negativ [3, 4]. Im Fall sehr dünner Filme führt die negative Oberflächenanisotropie zu einer Magnetisierungsrichtung parallel zur Filmebene. Mit wachsender Filmdicke nimmt der positive Volumenbeitrag an Gewicht zu. Dies führt zu einem Reorientierungsübergang von einer parallelen zu einer senkrechten Magnetisierung [30, 3, 4, 138].

Von theoretischer Seite wird versucht, die Anisotropiekonstanten für  $T = 0$  mit Hilfe von Realstrukturechnungen für Filmsysteme zu bestimmen. Interessant ist hier vor allem der Anisotropiebeitrag der Spin-Bahn-Wechselwirkung, der sehr empfindlich von der elektronischen Struktur abhängt. Dabei haben sich im wesentlichen zwei verschiedene Herangehensweisen etabliert: Semiempirische Tight-Binding Ansätze [148, 149, 150, 151] und spinaufgelöste ab initio Gesamtenergieberechnungen [152, 153, 38, 141, 142, 143]. Die Spin-Bahn-Wechselwirkung wird entweder selbstkonsistent oder störungstheoretisch berechnet. Insbesondere für das System Ni/Cu(100) zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment für die Anisotropiekonstanten  $K_2^V$  und  $K_2^S$  bei  $T = 0$  [143]. Aufgrund der Tatsache, daß bei der Bestimmung der magnetischen Anisotropie sehr kleine Energieunterschiede eine Rolle spielen, stellen diese Rechnungen, insbesondere für Filme von mehreren Atomlagen Dicke, immer noch eine Herausforderung dar.

**Reorientierungsübergang als Funktion der Temperatur.** In dieser Arbeit steht der Reorientierungsübergang als Funktion der Temperatur im Vordergrund. Dieser kann nicht allein über die Zerlegung (6.4) in Oberflächen und Volumenbeiträge zur Anisotropie verstanden werden. Hier ist die Temperaturabhängigkeit der Anisotropiebeiträge wichtig. Die Koeffizienten  $K_i^S$  und  $K_i^V$  müssen für jede Temperatur separat bestimmt werden. Für die Anisotropiekonstante zweiter Ordnung von Ni/Cu(100) wurde dies experimentell auch im Detail durchgeführt [31, 4], und die Resultate liefern ein in sich konsistentes Bild vom Reorientierungsübergang. Auf der anderen Seite können sie wenig dazu beitragen, den zugrundeliegenden Mechanismus, der zu einem temperaturgetriebenen Reorientierungsübergang führt, zu erklären.

Um den Reorientierungsübergang als Funktion der Temperatur zu verstehen, erweisen sich theoretische Untersuchungen an idealisierten Modellsystemen als hilfreich. Trotz der Tatsache, daß der Magnetismus der zugrundeliegenden Übergangsmetall-Filme von stark korrelierten *itineranten* 3d-Elektronen gebildet wird, wurden bisherige Untersuchungen zum temperaturgetriebenen Reorientierungsübergang ausschließlich auf der Basis dünner Heisenberg-Filme durchgeführt [154, 155, 156, 157, 48, 49, 158, 159, 160, 161]. Um die mag-

netische Anisotropie zu beschreiben, wird dabei das Heisenberg-Modell um die Dipol-Wechselwirkung und eine Single-Ion-Anisotropie erweitert. Die Single-Ion-Anisotropie modelliert dabei den Einfluß der Spin-Bahn-Wechselwirkung. Für eine geeignete Wahl der zugehörigen Kopplungskonstanten können im Rahmen der Mean-Field-Näherung für die Heisenberg-Filme beide Arten von Reorientierungsübergängen (Fe-artig, Ni-artig) beschrieben werden. Die Beiträge zur magnetischen Anisotropie werden dabei entweder in erster Ordnung Störungstheorie [159] oder vollständig selbstkonsistent [48, 49, 160] berechnet. Für  $d \geq 3$  Lagen wird in der Regel ein kontinuierlicher Reorientierungsübergang beobachtet ( $K_4 < 0$ ), der in einem sehr kleinen Temperaturintervall stattfindet. Sprunghafte Übergänge treten nur als Ausnahme für spezielle Einstellungen der Kopplungskonstanten auf [157, 48]. Der wesentliche Einfluß endlicher Temperaturen auf die Anisotropiekonstanten geht dabei über die Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung ein. Der Reorientierungsübergang wird durch eine starke Reduktion der Magnetisierung an der Oberfläche gegenüber den inneren Lagen bei endlichen Temperaturen verursacht. Dies führt zu einem stark abnehmenden Einfluß der Oberflächenanisotropie als Funktion steigender Temperatur [49, 160].

Allerdings wird im Heisenberg-Modell der itinerante Charakter der 3d-Elektronen der Übergangsmetalle vollständig vernachlässigt. Es ist daher notwendig, diese Resultate mit Rechnungen innerhalb eines Modells für Bandmagnetismus zu vergleichen. Im folgenden wird der temperaturgetriebene Reorientierungsübergang auf der Basis dünner Hubbard-Filme untersucht.

## 6.2. Erweiterung der Hubbard-Filme um anisotrope Beiträge

Um magnetische Anisotropie in dünnen ferromagnetischen Filmen beschreiben zu können, muß das Hubbard-Modell um anisotrope Beiträge erweitert werden. Der betrachtete Hamilton-Operator besteht aus drei Teilen:

$$H = H_0 + H_{\text{dip}} + H_{\text{so}}. \quad (6.5)$$

Dabei bezeichnet  $H_0$  den Hamilton-Operator (4.3) eines isotropen Hubbard-Films. Der zweite Term  $H_{\text{dip}}$  beschreibt die Dipol-Wechselwirkung zwischen den magnetischen Momenten an verschiedenen Gitterplätzen [147]:

$$H_{\text{dip}} = \frac{\omega_0}{2z_{uc}} \sum_{ij\alpha\beta}^{i,\alpha \neq j,\beta} \frac{1}{\left(\frac{r_{ij}^{\alpha\beta}}{a}\right)^3} \left[ \sigma_{i\alpha} \sigma_{j\beta} - 3(\sigma_{i\alpha} \hat{\mathbf{u}}_{ij}^{\alpha\beta})(\sigma_{j\beta} \hat{\mathbf{u}}_{ij}^{\alpha\beta}) \right]. \quad (6.6)$$

Hier bezeichnet  $r_{ij}^{\alpha\beta}$  den Abstand zwischen den Gitterplätzen  $\mathbf{R}_{i\alpha}$  und  $\mathbf{R}_{j\beta}$ ,  $\hat{\mathbf{u}}_{ij}^{\alpha\beta} = (\mathbf{R}_{i\alpha} - \mathbf{R}_{j\beta})/r_{ij}^{\alpha\beta}$  den normierten Richtungsvektor und  $\omega_0 = \mu_0 \mu_B^2 z_{uc} / (4\pi a^3)$  die Stärke der Dipol-Wechselwirkung.  $a$  ist die Gitterkonstante und  $z_{uc}$  die Zahl der Atome in der zugehörigen (kubischen) Einheitszelle des Volumenkristalls.

$\sigma_{i\alpha} = \sum_{\tau\tau'} c_{i\alpha\tau}^\dagger \sigma_{\tau\tau'} c_{i\alpha\tau'}$  bezeichnen Spinoperatoren und sind mit Hilfe der Pauli-Spinmatrizen  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  gegeben. Der thermodynamische Erwartungswert der Spinoperatoren liefert den (dimensionslosen) Magnetisierungsvektor  $\mathbf{m}_\alpha = \langle \sigma_{i\alpha} \rangle$ .

Der Beitrag der Spin-Bahn-Wechselwirkung ( $H_{\text{so}}$ ) zur magnetischen Anisotropie wird in dieser Arbeit phänomenologisch berücksichtigt. Dazu wird ein lagenabhängiges effektives Anisotropiefeld  $\mathbf{B}_\alpha^{(\text{so})}$  eingeführt, das an den Spinoperator koppelt:

$$H_{\text{so}} = - \sum_{i\alpha} \mathbf{B}_\alpha^{(\text{so})} \cdot \sigma_{i\alpha}. \quad (6.7)$$

Das effektive Anisotropiefeld  $\mathbf{B}_\alpha^{(\text{so})}$  wird dabei so gewählt, daß es in Richtung der Oberflächennormalen  $\hat{\mathbf{n}}$  zeigt. Um die richtigen Symmetrieeigenschaften sicherzustellen, setzen wir an [132]:

$$\mathbf{B}_\alpha^{(\text{so})} = \beta_\alpha (\mathbf{m}_\alpha \hat{\mathbf{n}}) \cdot \hat{\mathbf{n}}. \quad (6.8)$$

(6.7) und (6.8) entsprechen einer Mean-Field-Näherung für den Single-Ion-Beitrag der Spin-Bahn-Wechselwirkung zur Anisotropie [158]. Der lagenabhängige Kopplungsparameter  $\beta_\alpha$  bestimmt die Stärke des effektiven Anisotropiefeldes. Für das Folgende ist die Unterscheidung zwischen Oberflächen- und Volumenbeitrag wichtig:

$$\beta_\alpha = \begin{cases} \beta_S & \text{für } \alpha = 1, d \\ \beta_V & \text{sonst.} \end{cases} \quad (6.9)$$

Im Inneren der Filme wird eine mögliche Lagenabhängigkeit von  $\beta_\alpha$  nicht berücksichtigt.

### 6.3. Störungstheorie für die freie Energie

Die Richtung der Magnetisierung ist bestimmt durch das (absolute) Minimum der freien Energie  $F(\theta_M)$ . Für die in dieser Arbeit betrachteten approximativen Methoden für Hubbard-Filme erweist es sich allerdings als schwierig, die freie Energie als Funktion der Magnetisierungsrichtung zu bestimmen. Nur in HF läßt sich die freie Energie für beliebige Winkeleinstellungen der Lagenmagnetisierung berechnen. In der SDA sowie der MAA ist dies bislang nicht gelungen. Wie wir später noch genauer sehen werden, sind jedoch die Ergebnisse der HF-Rechnungen zum temperaturgetriebenen Reorientierungsübergang sehr unbefriedigend. Als Ausweg bietet es sich an, die anisotropen Beiträge zur freien Energie störungstheoretisch zu bestimmen. Die Untersuchungen an Heisenberg-Systemen haben gezeigt, daß ein störungstheoretischer Zugang sehr gute Resultate liefert. In der Tat sind realistische Werte für die Kopplungskonstanten  $\omega_0$  und  $\beta_\alpha$  in dünnen Übergangsmetall-Filmen um mehrere Größenordnungen kleiner als die Bandbreite  $W$  des Systems ( $\omega_0, \beta_\alpha \ll W$ ) [2, 3, 4].  $H_{\text{dip}}$  und  $H_{\text{so}}$  können daher als kleine Störung des isotropen Hubbard-Films  $H_0$  betrachtet werden. Störungstheorie für die freie Energie  $F$  bis zur linearen Ordnung in  $\omega_0$  und  $\beta_\alpha$  ergibt [162]:

$$F(T) = F_0(T) + \langle H_{\text{so}} \rangle_0 / (Nd) + \langle H_{\text{dip}} \rangle_0 / (Nd). \quad (6.10)$$

Hier bezeichnet  $\langle \dots \rangle_0$  den thermodynamischen Erwartungswert, berechnet im Rahmen des ungestörten (isotropen) Hubbard-Films  $H_0$ . Auf der gleichen Grundlage läßt sich eine Mean-Field-Entkopplung zur Berechnung der Zwei-Teilchen-Erwartungswerte in  $\langle H_{\text{dip}} \rangle_0$  motivieren. Im Rahmen der Störungstheorie bis zur linearen Ordnung (6.10) werden nur Anisotropiebeiträge zweiter Ordnung berücksichtigt. Eine mögliche gewinkelte Magnetisierungsrichtung in der Nähe des Reorientierungsübergangs wird vernachlässigt. Vollständig selbstkonsistente Rechnungen in Heisenberg-Systemen zeigen, daß im allgemeinen  $K_4 \ll K_2$  gilt und die Breite der Übergangsregion sehr klein ist [49, 160, 48]. Insbesondere liegt die störungstheoretisch berechnete Im Rahmen des hier vorgestellten Zugangs ist es daher ausreichend, die Energiedifferenz  $\Delta F(T)$  zwischen paralleler und senkrechter Magnetisierung zu betrachten:

$$\Delta F(T) = F(T, \theta_M = 90^\circ) - F(T, \theta_M = 0^\circ). \quad (6.11)$$

$\Delta F(T)$  werden wir im weiteren als *magnetische Anisotropieenergie* bezeichnen.  $\Delta F < 0$  zeigt an, daß die Magnetisierungsrichtung parallel zur Filmebene liegt, aus  $\Delta F > 0$  folgt eine senkrechte Magnetisierung. An der Reorientierungstemperatur  $T_R$  gilt  $\Delta F(T_R) = 0$ . Eine Auswertung von  $\Delta F$  ergibt [132]:

$$\Delta F(T) = \Delta F_{\text{so}} + \Delta F_{\text{dip}} \quad (6.12)$$

$$\Delta F_{\text{so}} = \frac{1}{d} \sum_{\alpha} \beta_{\alpha} m_{\alpha}^2 \quad (6.13)$$

$$\Delta F_{\text{dip}} = -\frac{3\omega_0}{2} \frac{1}{d} \sum_{\alpha\beta} m_{\alpha} m_{\beta} \Phi_{|\alpha-\beta|}. \quad (6.14)$$

**Tabelle 6.1.:** Für einige kubische Filmstrukturen sind die Konstanten  $\Phi_{\alpha}$  aufgeführt. Die Konstanten  $\Phi_{\alpha}$  geben die effektive Dipol-Wechselwirkung zwischen den Lagen an (vgl. (6.14) und (6.15)).

sc		
sc(100)	sc(110)	sc(111)
$\Phi_0 = 1.0782 \times \frac{4\pi}{3}$	$\Phi_0 = 0.5253 \times \frac{4\pi}{3}$	$\Phi_0 = 0.4656 \times \frac{4\pi}{3}$
$\Phi_1 = -0.0392 \times \frac{4\pi}{3}$	$\Phi_1 = 0.2494 \times \frac{4\pi}{3}$	$\Phi_1 = 0.2518 \times \frac{4\pi}{3}$
$\Phi_2 = -0.0002 \times \frac{4\pi}{3}$	$\Phi_2 = -0.0128 \times \frac{4\pi}{3}$	$\Phi_2 = 0.0170 \times \frac{4\pi}{3}$
bcc		
bcc(100)	bcc(110)	
$\Phi_0 = 0.5391 \times \frac{4\pi}{3}$	$\Phi_0 = 0.9231 \times \frac{4\pi}{3}$	
$\Phi_1 = 0.2492 \times \frac{4\pi}{3}$	$\Phi_1 = 0.0386 \times \frac{4\pi}{3}$	
$\Phi_2 = -0.0196 \times \frac{4\pi}{3}$	$\Phi_2 = -0.0004 \times \frac{4\pi}{3}$	
fcc		
fcc(100)		fcc(111)
$\Phi_0 = 0.7624 \times \frac{4\pi}{3}$		$\Phi_0 = 0.9312 \times \frac{4\pi}{3}$
$\Phi_1 = 0.1206 \times \frac{4\pi}{3}$		$\Phi_1 = 0.0341 \times \frac{4\pi}{3}$
$\Phi_2 = -0.0020 \times \frac{4\pi}{3}$		$\Phi_2 = 5.9 \cdot 10^{-5} \times \frac{4\pi}{3}$

Die Konstanten  $\Phi_\alpha$  geben die effektive Dipol-Wechselwirkung zwischen den Lagen an. Mit  $\langle \sigma_{i\alpha} \hat{\mathbf{u}}_{ij}^{\alpha\beta} \rangle = m_\alpha \cos \theta_{i\alpha j\beta}^{(\theta_M)}$  ( $\theta_{i\alpha j\beta}^{(\theta_M)}$ : Winkel zwischen  $\hat{\mathbf{u}}_{ij}^{\alpha\beta}$  und der Richtung der Magnetisierung  $\theta_M$ ) ergibt sich aus (6.6) und (6.11):

$$\Phi_{|\alpha-\beta|} = \frac{1}{z_{uc}} \frac{1}{N} \sum_{ij}^{i\alpha \neq j\beta} \frac{1}{\left(\frac{r_{ij}^{\alpha\beta}}{a}\right)^3} \left[ \cos^2 \theta_{i\alpha j\beta}^{(90^\circ)} - \cos^2 \theta_{i\alpha j\beta}^{(0^\circ)} \right]. \quad (6.15)$$

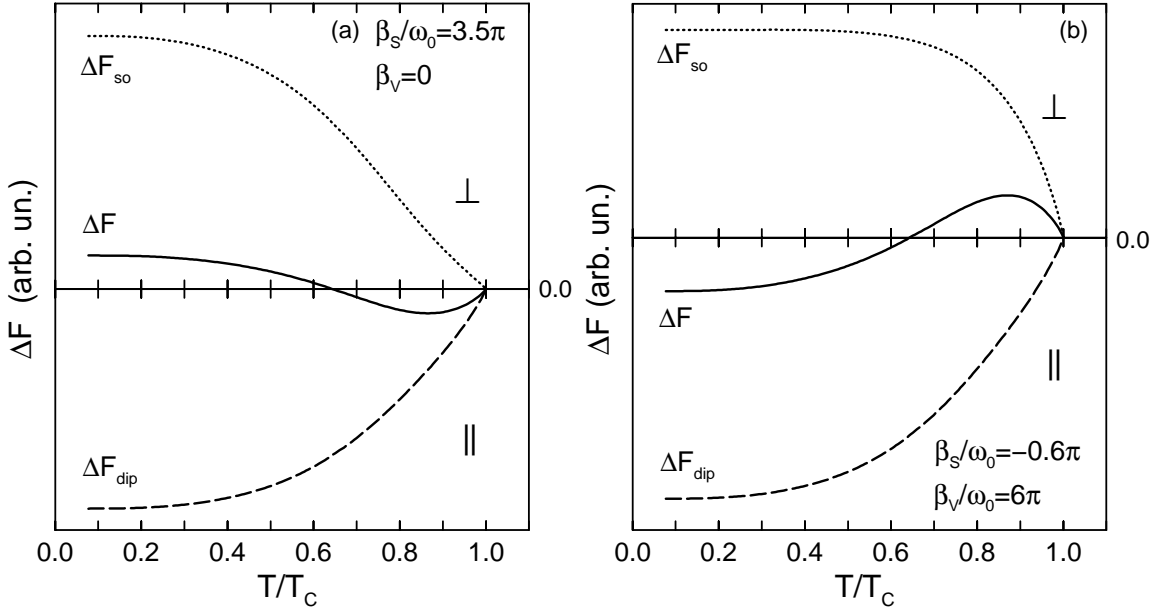
Die effektiven Dipol-Konstanten  $\Phi_\alpha$  hängen nur von der zugrundeliegenden Gitterstruktur ab und können separat berechnet werden (siehe Tabelle 6.1). Sie nehmen für steigenden Abstand  $\alpha$  zwischen den Lagen stark ab und wurden für  $\alpha \geq 3$  auf Null gesetzt. Im Limes dicker Filme wird  $\Delta F_{\text{dip}}$  identisch zum entsprechenden Ausdruck der Kontinuumstheorie. Im Rahmen der Kontinuumstheorie findet man  $\Delta F_{\text{dip}}^{\text{cont.}} = \frac{1}{2} \mu_0 M^2$  [147], wobei  $M$  die Magnetisierung pro Atom angibt.

## 6.4. Reorientierungsübergang als Funktion der Temperatur

In diesem Abschnitt wird die Temperaturabhängigkeit der magnetischen Anisotropieenergie  $\Delta F(T) = \Delta F_{\text{so}}(T) + \Delta F_{\text{dip}}(T)$  in dünnen ferromagnetischen Hubbard-Filmen diskutiert. Am Beispiel eines dreilagigen fcc(100)-Films wird gezeigt, daß sowohl ein Fe-artiger als auch ein Ni-artiger Reorientierungsübergang im Rahmen eines Bandmodells für Ferromagnetismus beschrieben werden kann [132]. Dabei zeigen sich deutliche Parallelen zum Reorientierungsübergang im Rahmen des Heisenberg-Modells [48, 49]. Im Gegensatz zum Heisenberg-Modell hängen die magnetischen Eigenschaften der Hubbard-Filme allerdings stark von den Modellparametern (Bandbesetzung  $n$ , Coulomb-Wechselwirkung  $U$ , Filmstruktur, ...) ab. Inwieweit diese Abhängigkeiten einen möglichen Reorientierungsübergang beeinflussen, wird ausführlich diskutiert. Für die Berechnung der lagenabhängigen Magnetisierungen  $m_\alpha(T)$ , die als Input benötigt werden, wird die SDA verwendet.

Im Rahmen des störungstheoretischen Zugangs zur magnetischen Anisotropieenergie  $\Delta F$  ist für einen möglichen Reorientierungsübergang nur das Verhältnis der Kopplungsparameter  $\beta_\alpha$  und  $\omega_0$  wichtig. Mit (6.9) haben wir also zwei Parameter ( $\beta_S/\omega_0$  und  $\beta_V/\omega_0$ ), um den temperaturgetriebenen Reorientierungsübergang zu beschreiben. Zumindest im Prinzip können diese Parameter anhand von Realstrukturechnungen bestimmt werden. Für die hier betrachteten Modell-Filme ist dies aber nicht sinnvoll. Allerdings ist es wichtig, sich bei der Wahl der Kopplungskonstanten zumindest qualitativ an theoretischen sowie experimentellen Vorgaben der Fe-artigen und der Ni-artigen Systeme zu orientieren (vgl. Kap. 6.1).

Abbildungen 6.2 (a) und (b) zeigen, daß für geeignete Wahl der Kopplungsparameter  $\beta_S/\omega_0$  und  $\beta_V/\omega_0$  sowohl ein Fe-artiger als auch ein Ni-artiger Reorientierungsübergang in einem dreilagigen Hubbard-Film möglich ist [132]. Um die Fe-artigen Systeme zu beschreiben (Abb. 6.2(a)), verwenden wir eine starke positive Spin-Bahn-induzierte Oberflächenanisotropie  $\beta_S/\omega_0 = 3.5\pi$  (vgl. z. B. [2]) zusammen mit

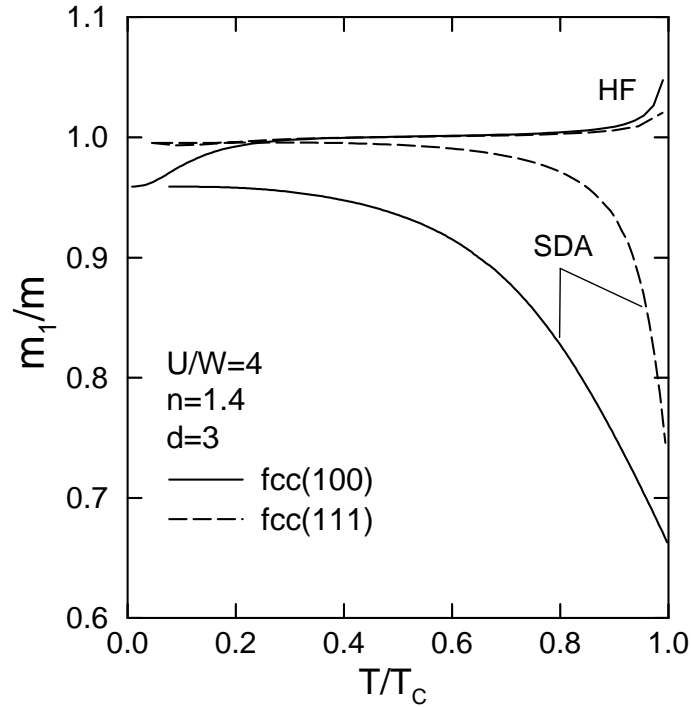


**Abbildung 6.2.:** Magnetische Anisotropieenergie  $\Delta F = \Delta F_{so} + \Delta F_{dip}$  für einen dreilagigen fcc(100)-Film als Funktion der reduzierten Temperatur  $T/T_C$ . (a) in der Fe-artigen Situation ( $\beta_S/\omega_0 = 3.5\pi$ ,  $\beta_V/\omega_0 = 0$ ) (b) in der Ni-artigen Situation ( $\beta_S/\omega_0 = -0.6\pi$ ,  $\beta_V/\omega_0 = 6\pi$ ). Weitere Parameter:  $n = 1.4$ ;  $U/W = 3$ .

$\beta_V/\omega_0 = 0$ . Der Einfluß der Spin-Bahn-Wechselwirkung auf die Volumenanisotropie wird also vernachlässigt<sup>6</sup>. Bei tiefen Temperaturen liegt die Magnetisierungsrichtung senkrecht zur Filmebene, da die Oberflächenanisotropie die Dipol-Anisotropie überwiegt ( $\Delta F = \Delta F_{so} + \Delta F_{dip} > 0$ ). Als Funktion steigender Temperatur nimmt  $|\Delta F_{so}|$  aufgrund der starken Reduktion der Magnetisierung der Oberflächenlage stärker ab als  $|\Delta F_{dip}|$ . Dies führt zu einem Vorzeichenwechsel von  $\Delta F$  und damit zu einem Umschlagen der Magnetisierungsrichtung in eine parallele Position. Diese Art von Reorientierungsübergang ist für beliebige Filmdicken  $d \geq 3$  möglich. Für dickere Filme muß allerdings das Verhältnis  $\beta_S/\omega_0$  proportional zu  $d$  reskaliert werden, um den zunehmenden Dipol-Beitrag zur Anisotropie zu kompensieren.

Zur Beschreibung des Ni-artigen Reorientierungsübergangs (Abb. 6.2(b)) wird, in Analogie zu den experimentellen Resultaten [3, 4], eine starke positive Spin-Bahn-induzierte Volumenanisotropie  $\beta_V/\omega_0 = 6\pi$  und eine negative Oberflächenanisotropie  $\beta_S/\omega_0 = -0.6\pi$  angenommen. Für tiefe Temperaturen überwiegen die Dipol-Anisotropie sowie die Spin-Bahn-induzierte Oberflächenanisotropie ( $\beta_S/\omega_0$ ) und es resultiert  $\Delta F < 0$ . Der Magnetisierungsvektor liegt also in der Filmebene. Für steigende Temperatur allerdings nimmt der Einfluß der Oberflächenanisotropie aufgrund der reduzierten Magnetisierung der Oberflächenlage ab. Der positive Volumenbeitrag der Spin-Bahn-Wechselwirkung ( $\beta_V/\omega_0$ ) wird dann dominant und führt zu einer senkrechten Magnetisierung ( $\Delta F > 0$ ). Die Parameter  $\beta_S$ ,  $\beta_V$  und  $\omega_0$  bestimmen, für welche Filmdicken diese Art von Reorientierungsübergang möglich ist.

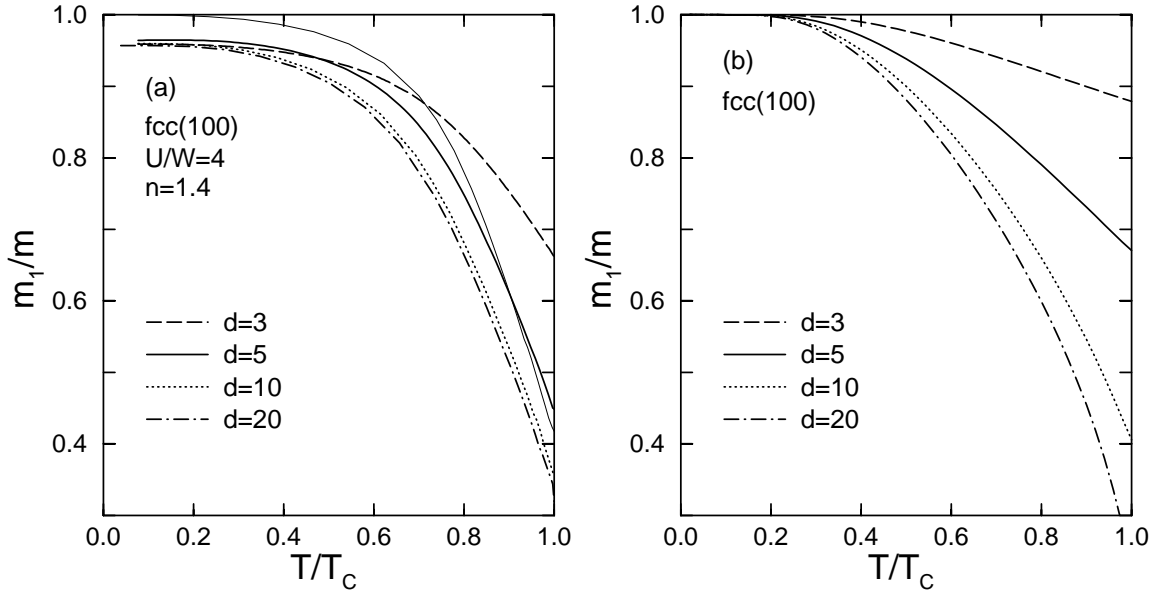
<sup>6</sup> Experimentelle Ergebnisse zeigen, daß in den Fe-artigen Systemen der Volumenbeitrag der Spin-Bahn-Anisotropie zwar nicht verschwindet, aber im allgemeinen sehr klein im Vergleich zur Dipol-Anisotropie ist. Damit beeinflußt dieser Term das qualitative Verhalten des Reorientierungsübergangs nur unwesentlich.



**Abbildung 6.3.:** Das Verhältnis  $m_1/m$  zwischen der Magnetisierung der Oberflächenschicht und der mittleren Magnetisierung eines dreilagigen Films als Funktion der reduzierten Temperatur  $T/T_C$ . Durchgezogene Linien: fcc(100)-Filmgeometrie; gestrichelte Linien: fcc(111)-Filmgeometrie. Zum Vergleich sind neben den SDA-Resultaten auch die Ergebnisse einer Hartree-Fock-Rechnung (HF) angegeben. Weitere Parameter:  $n = 1.4$ ;  $U/W = 3$ .

Für beide Arten von temperaturgetriebenen Reorientierungsübergängen (Fe-artig, Ni-artig) müssen die Kopplungsparameter so gewählt werden, daß sich das System in der Nähe eines dickengetriebenen Reorientierungsübergangs befindet.

Sowohl in der Fe-artigen als auch in der Ni-artigen Situation wird der temperaturgetriebene Reorientierungsübergang durch eine starke, temperaturabhängige Reduktion der Oberflächenmagnetisierung im Vergleich zur mittleren Magnetisierung hervorgerufen. Wir wollen deshalb im folgenden das Verhältnis  $m_1/m$  genauer untersuchen. In Abbildung 6.3 ist  $m_1/m$  für einen dreilagigen Film in der fcc(100)- und der fcc(111)-Struktur gezeigt. Im konkreten Kurvenverlauf zeigen sich deutliche Unterschiede. Für die „offenere“ fcc(100)-Geometrie nimmt  $m_1/m$  bereits für relativ kleine Temperaturen  $T \gtrsim 0.4T_C$  kontinuierlich ab und verläuft ab  $T/T_C \approx 0.7$  annähernd linear. Ein Reorientierungsübergang ist daher in einem weiten Temperaturbereich möglich. Für die fcc(111)-Filmstruktur dagegen bleibt das Verhältnis  $m_1/m$  bis  $T/T_C \approx 0.7$  beinahe konstant. Eine deutliche Reduktion der Magnetisierung der Oberflächenschicht gegenüber den inneren Schichten tritt hier erst ab  $T/T_C \approx 0.85$  auf. Als Konsequenz folgt daraus, daß ein temperaturgetriebener Reorientierungsübergang vor allem nahe bei der Curie-Temperatur zu erwarten ist. Für beide betrachteten Filmgeometrien steht der Temperaturverlauf der  $m_1/m$ -Kurven im Einklang mit den Überlegungen von Kapitel 5 zur magnetischen Stabilität an der Oberfläche dünner Filme. Wir hatten gesehen (vgl. Abb. 5.1), daß



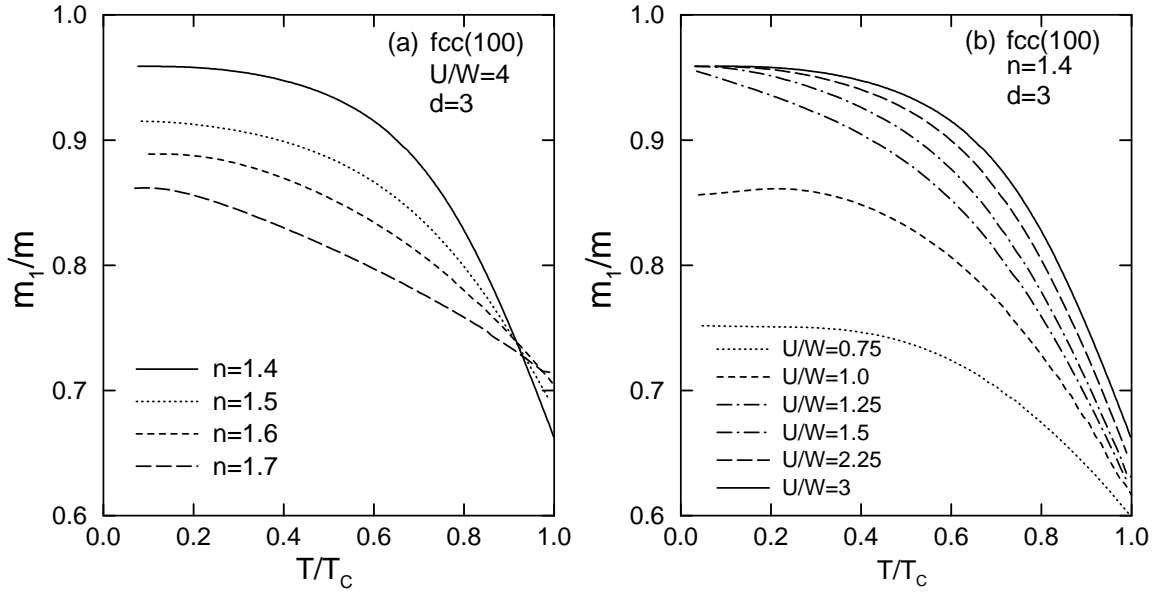
**Abbildung 6.4.:** Das Verhältnis  $m_1/m$  zwischen der Magnetisierung der Oberflächenlage und der mittleren Magnetisierung dünner fcc(100)-Filme unterschiedlicher Dicke  $d$  als Funktion der reduzierten Temperatur  $T/T_c$ . (a) SDA-Rechnung; Bandbesetzung  $n = 1.4$ ; Coulomb-Wechselwirkung  $U/W = 3$ . Zusätzlich ist das Verhältnis  $m_1/m$  für einen fünflagigen Film mit erzwungener Ladungsneutralität gezeigt (dünne durchgezogene Linie). (b) Das Verhältnis  $m_1/m$ , berechnet für dünne Heisenberg-Filme in der Mean-Field-Näherung; Spinquantenzahl  $S = 1/2$ .

die Oberflächenlage die Tendenz zu einer reduzierten Curie-Temperatur ausbildet. Schätzt man den Wert dieser „reduzierten Curie-Temperatur“ ab, so entspricht sie in etwa der Temperatur, bei der die  $m_1/m$ -Kurven in das stark abfallende, lineare Verhalten einmünden.

Zum Vergleich mit den SDA-Resultaten ist in Abbildung 6.3 auch das Verhältnis  $m_1/m$ , berechnet mit Hilfe der Hartree-Fock-Näherung, aufgetragen. Der qualitative Kurvenverlauf unterscheidet sich grundsätzlich von den eben diskutierten Ergebnissen. Im Fall ferromagnetischer Sättigung ( $T \rightarrow 0$ ) stimmt das Verhältnis  $m_1/m$  für beide Theorien zunächst überein<sup>7</sup>. Für endliche Temperaturen allerdings finden wir im Rahmen von HF keine Reduktion der Oberflächenmagnetisierung, sondern über einen weiten Temperaturbereich ( $0.1 < T/T_c < 0.9$ ) eine gleichförmige Magnetisierung ( $m_1/m \approx 1$ ). Nahe bei  $T_c$  ist die Magnetisierung der Oberflächenlage sogar gegenüber der mittleren Magnetisierung erhöht ( $m_1/m > 1$ ). Ein realistischer Reorientierungsübergang als Funktion der Temperatur, auf der Basis der experimentellen Vorgaben für die Kopplungskonstanten  $\beta_S/\omega_0$  und  $\beta_V/\omega_0$ , ist im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung daher ausgeschlossen. Dies gilt auch für alle anderen untersuchten Parameterkonstellationen.

In Abbildung 6.4(a) ist das Verhältnis  $m_1/m$  in dünnen fcc(100)-Filmen für verschiedene Filmdicken dargestellt. Der qualitative Kurvenverlauf ändert sich nicht mit

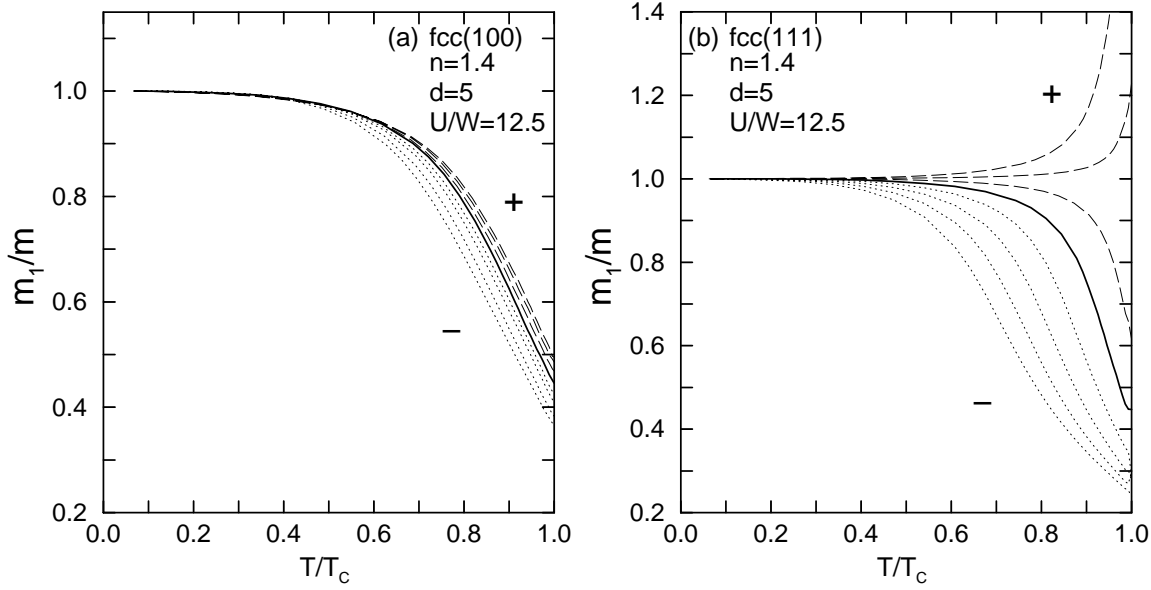
<sup>7</sup> Für den Spezialfall ferromagnetischer Sättigung lassen sich die Lagenmagnetisierungen exakt anhand des wechselwirkungsfreien Systems berechnen. In diesem Fall liefern HF und SDA das gleiche Ergebnis.



**Abbildung 6.5.:** Das Verhältnis  $m_1/m_c$  zwischen der Magnetisierung der Oberflächenlage und der mittleren Magnetisierung eines dreilagigen Films in der fcc(100)-Geometrie als Funktion der reduzierten Temperatur  $T/T_c$ . (a) Für eine Coulomb-Wechselwirkung von  $U/W = 3$  und unterschiedliche Bandbesetzungen  $n$ . (b) Für eine Bandbesetzung  $n = 1.4$  und verschiedene Coulomb-Wechselwirkungen  $U$ .

zunehmender Filmdicke. Die Reduktion der Magnetisierung der Oberflächenlage als Funktion der Temperatur ist allerdings stärker für dickere Filme.  $m_1/m(T/T_c = 1)$  nimmt als Funktion der Filmdicke ab und sättigt schließlich für  $d \rightarrow \infty$  auf einem endlichen Wert  $m_1/m(T/T_c = 1) \approx 0.35$ . In Abbildung 6.4(a) ist zusätzlich das Verhältnis  $m_1/m$  für einen fünflagigen Film mit erzwungener Ladungsneutralität gezeigt. Die Ladungsneutralität impliziert  $m_1/m = 1$  im Fall ferromagnetischer Sättigung ( $T = 0$ ). Die Reduktion der Oberflächenmagnetisierung für endliche Temperaturen fällt in diesem Fall sogar stärker aus als im Rahmen der gewöhnlichen SDA-Rechnung. Wir können folgern, daß die Reduktion von  $m_1/m$  als Funktion steigender Temperatur, die den temperaturgetriebenen Reorientierungsübergang ermöglicht, nicht etwa durch einen Ladungstransfer zwischen den einzelnen Lagen des Films hervorgerufen wird. Dies und vor allem auch der Vergleich mit den Ergebnissen der Hartree-Fock-Rechnung (Abb. 6.3) zeigt, daß hier ein echter Korrelationseffekt vorliegt.

Es ist interessant, die SDA-Resultate für die Hubbard-Filme mit Rechnungen im Rahmen des Heisenberg-Modells zu vergleichen. In Abbildung 6.4(b) ist das Verhältnis  $m_1/m$  für dünne Heisenberg-Filme mit der Spinquantenzahl  $S = 1/2$  in der Mean-Field-Näherung gezeigt. Der qualitative Verlauf von  $m_1/m$  als Funktion der reduzierten Temperatur ist in beiden Modell-Systemen sehr ähnlich. Für  $d \leq 10$  ist die Reduktion der Oberflächenmagnetisierung im Rahmen der Hubbard-Filme stärker als für die Heisenberg-Filme. Allerdings sättigt im Rahmen der Mean-Field-Rechnung für Heisenberg-Filme das Verhältnis  $m_1/m(T = T_c)$  als Funktion der Filmdicke nicht auf einem endlichen Wert, sondern wir finden  $m_1/m(T = T_c) \rightarrow 0$  für  $d \rightarrow \infty$ .



**Abbildung 6.6.:** Das Verhältnis  $m_1/m$  zwischen der Magnetisierung der Oberflächenlage und der mittleren Magnetisierung eines fünflagigen Films in der (a) fcc(100)- und (b) fcc(111)-Geometrie als Funktion der reduzierten Temperatur  $T/T_c$ . SDA-Rechnung bei explizit geforderter Ladungsneutralität. Das Hoppingmatrixelement in den beiden äußeren Lagen der Filme wird über den Parameter  $\epsilon$  gemäß  $T_{\mathbf{k}}^{11} = T_{01} + \epsilon t \gamma_{\parallel}(\mathbf{k}) = T_{\mathbf{k}}^{dd}$  variiert. Die Variation des Hoppings nimmt von außen nach innen ab. Die dicke durchgezogene Linie entspricht dem Fall  $\epsilon = 1.0$ . Die punktierten Linien beziehen sich auf  $\epsilon = 0.6, 0.7, 0.8, 0.9$ , die gestrichelten Linien auf  $\epsilon = 1.1, 1.2, 1.3$ . Weitere Parameter:  $n = 1.4$ ;  $U/W = 12.5$ .

Die Abhängigkeit des Verhältnisses  $m_1/m$  von der mittleren Bandbesetzung  $n$  sowie von der Coulomb-Wechselwirkung  $U$  ist in Abbildung 6.5 (a) bzw. (b) gezeigt. Beide Abhängigkeiten sind im Rahmen von Heisenberg-Filmen nicht zugänglich. Die Änderung von  $m_1/m$  als Funktion der Temperatur wird geringer für steigende Bandbesetzung  $n$  (Abb. 6.5(a)).  $m_1/m(T = 0)$  fällt mit wachsendem  $n$ , während  $m_1/m(T = T_c)$  leicht zunimmt. Ebenso zeigt sich eine deutliche Abhängigkeit von der Coulomb-Wechselwirkung  $U$  (Abb. 6.5(b)). Die temperaturabhängige Reduktion des Verhältnisses  $m_1/m$  vergrößert sich um einen Faktor zwei, wenn die Coulomb-Wechselwirkung von  $U = 0.75W$  auf  $U = 3W$  ansteigt. Das Temperaturverhalten von  $m_1/m$ , und damit auch die Möglichkeit eines temperaturgetriebenen Reorientierungsübergangs, hängen also stark von der betrachteten Bandbesetzung und der betrachteten Coulomb-Wechselwirkung ab. Insbesondere finden wir, daß eine starke Coulomb-Korrelation einen Reorientierungsübergang begünstigt.

Abschließend soll der Einfluß veränderter Hoppingparameter an der Oberfläche diskutiert werden. Das Hoppingmatrixelement in den beiden äußeren Lagen der Filme wird dabei über den Parameter  $\epsilon$  gemäß  $T_{\mathbf{k}}^{11} = T_{01} + \epsilon t \gamma_{\parallel}(\mathbf{k}) = T_{\mathbf{k}}^{dd}$  variiert. Wie wir in Kapitel 5 gesehen haben, reduziert in stark korrelierten Hubbard-Filmen ein verringertes Hopping an der Oberfläche ( $\epsilon < 1$ ) deren magnetische Stabilität. Es ist klar, daß ein temperaturgetriebener Reorientierungsübergang dadurch begünstigt wird. Im Vergleich zum Fall uniformen Hoppings ist zu erwarten, daß die Reorientierungstemperatur  $T_R$  abnimmt. Eine erhöhte Hop-

pingwahrscheinlichkeit an der Oberfläche ( $\epsilon > 1$ ) ist dagegen ungünstig für die Möglichkeit eines Reorientierungsübergangs. Erste numerische Rechnungen mit veränderten Hoppingparametern bestätigen dieses Verhalten. In Abbildung 6.6 ist das Verhältnis  $m_1/m$  für den Fall leicht variiertes Hoppingparameter in den beiden äußeren Lagen eines fünf-lagigen Films abgebildet. Um den Effekt zu verstärken, ist die Coulomb-Wechselwirkung aus dem Bereich sehr starker Korrelation gewählt ( $U = 12.5W$ ). Zudem ist hier die Einhaltung der Ladungsneutralität wichtig, da im Fall veränderter Hoppingparameter die Ladungstransfereffekte sehr groß werden können. Man sieht deutlich, daß das Verhältnis  $m_1/m$  bei endlichen Temperaturen für  $\epsilon < 1$  abnimmt, während es für  $\epsilon > 1$  ansteigt. Besonders deutlich ist der Effekt der variierten Oberflächenparameter für den fcc(111)-Film (Abb. 6.6(b)). Hier ist für  $\epsilon = 1.2$  und  $\epsilon = 1.3$  der Magnetismus in der Oberflächenlage sogar stabiler als für die inneren Lagen ( $m_1/m > 1$  für  $T \rightarrow T_C$ ).

Es wurde gezeigt, daß für eine geeignete Wahl der Kopplungsparameter  $\beta_S/\omega_0$  und  $\beta_V/\omega_0$  beide Arten von temperaturgetriebenen Reorientierungsübergängen (Fe-artig, Ni-artig) auf der Basis dünner Hubbard-Filme beschrieben werden können. Dabei zeigen sich deutliche Parallelen zum Reorientierungsübergang im Rahmen von Heisenberg-Filmen. Der Reorientierungsübergang wird verursacht durch eine starke Reduktion der Oberflächenmagnetisierung im Vergleich zur Magnetisierung der inneren Lagen als Funktion der Temperatur. Die Möglichkeit eines Reorientierungsübergangs in dünnen Hubbard-Filmen hängt stark von den Modellparametern ( $n$ ,  $U$ , Hoppingparameter) ab. Die reduzierte Stabilität an der Oberflächen der metallischen Filme ist ein reiner Korrelationseffekt. Dünne Filme in der Hartree-Fock-Näherung zeigen genau das gegenteilige Verhalten.



## 7. Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden die magnetischen Eigenschaften dünner metallischer Filme im Rahmen des stark korrelierten Hubbard-Modells untersucht. Das Hubbard-Modell mit einer Filmgeometrie beschreibt das nicht-triviale Zusammenspiel von kinetischer Energie, potentieller Energie und reduzierter Translationssymmetrie in itineranten Elektronensystemen.

Eine geeignete Basis für das Verständnis von Ferromagnetismus in dünnen Filmen liefert das translationssymmetrische Hubbard-Modell. Mit Hilfe verschiedener interpolativer Näherungsverfahren wurde die Stabilität ferromagnetischer Lösungen untersucht. Approximative Theorien für das Hubbard-Modell sollten sich an möglichst vielen, physikalisch aussagekräftigen Grenzfällen orientieren. Von zentraler Bedeutung für die Stabilität und das qualitative Verhalten ferromagnetischer Lösungen im Hubbard-Modell sind die Resultate von Harris und Lange [52] im Limes starker Korrelation (vgl. auch die Diskussion in Kap. 3.6.5). Diese nicht-trivialen exakten Aussagen betreffen die grobe Struktur der Spektraldichte. Eine notwendige Bedingung dafür, daß die Schwerpunkte und Gewichte der Spektraldichteteaks korrekt reproduziert werden, ist die Einhaltung der ersten vier Summenregeln der Momente. Es wurde gezeigt, daß mit Hilfe der Summenregeln der Momente bestehende approximative Theorien für das Hubbard-Modell auf eine konzeptionell klare Weise bezüglich ihres Verhaltens im Grenzfall starker Korrelation verbessert werden können (Hubbard I  $\rightarrow$  SDA; AA  $\rightarrow$  MAA; EHA  $\rightarrow$  IAA; KK  $\rightarrow$  MPT). Weitere wichtige Grenzfälle des Hubbard-Modells sind der Limes schwacher Korrelation, in dem die Störungstheorie zweiter Ordnung nicht-triviale Aussagen liefert, sowie der Limes des Falicov-Kimball-Modells. Für das FKM, in dem das Hopping für eine Spinrichtung ausgeschaltet ist (z. B.  $\varepsilon_{\uparrow}(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k})$ ;  $\varepsilon_{\downarrow}(\mathbf{k}) = T_0$ ), existiert im Limes unendlicher Dimensionen eine exakte Lösung. Die MAA und die IAA reproduzieren neben den Ergebnissen von Harris und Lange den Limes des FKM. Die IAA und die MPT interpolieren zwischen den Grenzfällen starker und schwacher Korrelation.

Qualitativ ist das Verhalten der ferromagnetischen Lösungen für alle hier betrachtete Theorien (SDA, MAA, IAA und MPT) sehr ähnlich und insbesondere in guter Übereinstimmung mit exakten DMFT-QMC-Resultaten. Die konzeptionell vergleichsweise einfache SDA überschätzt zwar den magnetischen Bereich im Phasendiagramm – der Grund dafür ist die Vernachlässigung von Quasiteilchendämpfung. Das qualitative Verhalten der ferromagnetischen Lösungen sowie die Korrelationseffekte in der temperaturabhängigen elektronischen Struktur sind aber dieselben wie in den weiterführenden Theorien. In der MAA, die Quasiteilchendämpfungseffekte einschließt, ist der ferromagnetische Bereich im Phasendiagramm bereits deutlich reduziert. Im Rahmen der IAA und der MPT stimmen die Curie-Temperaturen so-

gar quantitativ sehr gut mit den DMFT-QMC-Resultaten überein. Die IAA erweist sich allerdings als zu restriktiv in Bezug auf Ferromagnetismus für Bandbesetzungen in der Nähe von Halbfüllung.

Für große Wechselwirkungen zeigt das Quasiteilchenspektrum eine korrelationsinduzierte Aufspaltung in ein oberes und unteres Subband. Ferromagnetismus wird durch eine zusätzliche Spinaufspaltung der beiden Subbänder hervorgerufen. Die Ursache der Spinaufspaltung ist eine Spinasymmetrie der Bandverschiebung  $B_{-\sigma}$ , die aus höheren Korrelationsfunktionen aufgebaut ist und selbstkonsistent bestimmt werden muß. Für große Wechselwirkungen wird  $B_{-\sigma}$  proportional zur kinetischen Energie der  $(-\sigma)$ -Elektronen. Als wichtige Konsequenz folgt daraus, daß die für spontanen Ferromagnetismus relevante Energieskala nicht etwa durch die Coulomb-Wechselwirkung  $U$ , sondern durch die kinetische Energie bzw. die Bandbreite  $W$  der BDOS gegeben ist. Insbesondere sättigen daher die Spinaufspaltung und die Curie-Temperatur als Funktion der Coulomb-Wechselwirkung auf einem endlichen Wert. Dies gilt für alle Theorien, die die Resultate von Harris und Lange korrekt reproduzieren, und wird von exakten DMFT-QMC-Resultaten im Limes unendlich hoher Dimensionen bestätigt [78]. Das Temperaturverhalten wird von zwei temperaturabhängigen Korrelationseffekten dominiert: Eine Stoner-artige Verschiebung der Schwerpunkte der Majoritäts- und Minoritätssubbänder und ein starker spinabhängiger Transfer von spektralem Gewicht zwischen den unteren und oberen Subbändern. Das Zusammenspiel dieser beiden Effekte führt zu einer raschen Demagnetisierung des Systems als Funktion steigender Temperatur und damit zu Curie-Temperaturen in einer physikalisch sinnvollen Größenordnung. Insbesondere sind die Curie-Temperaturen deutlich geringer als in der gewöhnlichen Hartree-Fock-Theorie, die Korrelationseffekte nur auf einem niedrigen Niveau behandelt.

Aufbauend auf den Resultaten zum translationssymmetrischen System wurde das Hubbard-Modell zur Beschreibung von Ferromagnetismus in dünnen metallischen Filmen und Oberflächen verallgemeinert. In wechselwirkungsfreien Filmen ist der wesentliche Effekt der reduzierten Symmetrie eine verringerte Varianz ( $\Delta_s^{(2)} < \Delta_b^{(2)}$ ;  $\Delta_\alpha^{(2)}$ : effektive Bandbreite) sowie eine verringerte Asymmetrie ( $\Delta_s^{(3)} < \Delta_b^{(3)}$ ) der lokalen Bloch-Zustandsdichte der Oberflächenlage. Um das Vielteilchenproblem des Hubbard-Modells im Fall der reduzierten Translationssymmetrie zu lösen, wurde eine Methode vorgestellt, mit der lokale approximative Theorien für den translationssymmetrischen Fall auf Filmsysteme verallgemeinert werden können. Von entscheidender Bedeutung ist hierbei, daß die exakten Grenzfälle, an denen sich die approximativen Theorien orientieren, weiterhin korrekt reproduziert werden. Für die SDA und die MAA wurde der Übergang zu einer Filmgeometrie explizit durchgeführt.

Für Filme in der fcc(100)- und der fcc(111)-Geometrie wurde die Lagenmagnetisierung als Funktion der Temperatur und der Filmdicke diskutiert. Für  $T = 0$  und  $n = 1.4$  (SDA-Rechnung) finden wir ferromagnetische Sättigung für alle Lagen. Interessant ist vor allem das Verhalten bei endlichen Temperaturen. Hier ist die Magnetisierung der Oberflächenlage gegenüber der Magnetisierung der inneren Lagen reduziert. Entgegen der intuitiven Erwartung auf der Grundlage des Stoner-Bildes für Bandmagnetismus ist die magnetische Stabilität in der Oberflächenlage verrin-

---

gert, obwohl dort die effektive Korrelation ( $U/\Delta_s^{(2)} > U/\Delta_b^{(2)}$ ) erhöht ist. Dies gilt sowohl für dünne Filme als auch im Limes  $d \rightarrow \infty$  (halbunendliches System). Der Effekt der Oberfläche ist stärker für die offenere (100)- als für die (111)-Oberfläche. Die Curie-Temperatur steigt als Funktion der Filmdicke steil an und sättigt bereits für  $d \approx 3 - 5$  auf dem zugehörigen Volumenwert. Die verringerte magnetische Stabilität an der Oberfläche sowie in sehr dünnen Filmen ( $d \approx 1 - 3$ ) ist ein reiner Korrelationseffekt und läßt sich im Grenzfall starker Coulomb-Wechselwirkung mit Hilfe einfacher Argumente verstehen. Hartree-Fock-Rechnungen zu dünnen Filmen, die Korrelationseffekte fast vollständig vernachlässigen, liefern genau das gegenteilige Verhalten.

Desweiteren wurden die Lagenmagnetisierungen als Funktion der Bandbesetzung sowie der Coulomb-Wechselwirkung untersucht. Im Limes starker Korrelation finden wir für fcc-artige Filme spontanen Ferromagnetismus in einem großen Bereich der Bandbesetzung ( $1 < n < 2$ ). Der Einfluß der Oberfläche wird mit steigender Bandbesetzung größer. Dies ist besonders deutlich für einen fünfflagigen fcc(100)-Film bei  $n = 1.6$  (MAA-Rechnung). In der MAA, die in Bezug auf spontanen Ferromagnetismus restriktiver ist als die SDA, nehmen in der fcc(100)-Geometrie die Oberflächeneffekte zu. Hier ist die Magnetisierung der Oberflächenlage für alle Temperaturen sehr gering und deutlich kleiner als die Magnetisierung der inneren Lagen. Dieses Verhalten spiegelt sich in den Magnetisierungsprofilen wider. Im Gegensatz zu den Magnetisierungsprofilen dünner Heisenberg-Filme zeigen die Magnetisierungsprofile der Hubbard-Filme ein schwach oszillatorisches Verhalten im Bereich der inneren Lagen. In der fcc(100)-Geometrie nehmen die Abweichungen von der mittleren Magnetisierung bei endlichen Temperaturen zu.

Im Rahmen der hier betrachteten approximativen Theorien sind insbesondere auch dynamische Größen wie die lokale Quasiteilchenzustandsdichte oder die Spektraldichte zugänglich. Mit Hilfe der spin-, lagen- und temperaturabhängigen elektronischen Struktur läßt sich das magnetische Verhalten der Hubbard-Filme im Detail untersuchen. Analog zum translationssymmetrischen Fall finden wir in der ferromagnetischen Phase zwei korrelationsinduzierte Bandaufspaltungen (Hubbard-Aufspaltung, Spinaufspaltung). Die Spinaufspaltung nimmt mit steigender Temperatur ab und verschwindet vollständig bei der Curie-Temperatur. Zu gegebenem Wellenvektor treten in der Spektraldichte aufgrund der Lagenstruktur in jedem Subband mehrere Quasiteilchenpeaks auf. Das spektrale Gewicht der einzelnen Peaks ist stark lagenabhängig. Dies führt zu einer deutlichen Lagenabhängigkeit in der LQDOS. Die Position der Peaks hängt im allgemeinen jedoch nicht vom Lagenindex ab. Nur für spezielle  $\mathbf{k}$ -Punkte der Oberflächen-Brillouin-Zone, für die die einzelnen Zweige (Peaks) der Dispersion verschmelzen, ist eine Lagenabhängigkeit der Quasiteilchenenergien möglich. Das zugehörige spektrale Gewicht dieser  $\mathbf{k}$ -Punkte ist in der fcc(100)-Struktur größer als in fcc(111)-Filmen. Dies korrespondiert mit der deutlich stärkeren Lagenabhängigkeit der Magnetisierung für fcc(100)-Filme.

Die Breite der Quasiteilchenpeaks, die ein Maß für die Lebensdauer der Quasiteilchen darstellt, ist stark spin- und temperaturabhängig. Für tiefe Temperaturen finden wir scharfe Quasiteilchenpeaks im Minoritätsband und deutlich verbreiterte Peaks im Majoritätsband. Die Spinasymmetrie der Lebensdauer wird mit steigender Temperatur kontinuierlich aufgehoben.

Als eine interessante Anwendung der Theorie stark korrelierter Elektronen in dünnen metallischen Filmen wurde der temperaturgetriebene Reorientierungsübergang, der in einigen Übergangsmetall-Filmen beobachtet wird, untersucht. Bisherige Modell-Rechnungen zur Temperaturabhängigkeit der magnetischen Anisotropie basieren ausschließlich auf lokalisierten Spin-Modellen. Der itinerante Charakter der 3d-Elektronen in den Übergangsmetallen wird dadurch vollständig vernachlässigt. Um magnetische Anisotropie in einem Modell-Bandmagneten untersuchen zu können, wurde das Hubbard-Modell um die Dipol-Wechselwirkung sowie ein effektives Anisotropiefeld, das die Spin-Bahn-Wechselwirkung beschreibt, erweitert. Es wurde gezeigt, daß für eine geeignete Wahl der Kopplungsparameter sowohl ein Fe-artiger Reorientierungsübergang ( $\perp \rightarrow \parallel$ ) als auch ein Ni-artiger Reorientierungsübergang ( $\parallel \rightarrow \perp$ ) beschrieben werden kann. Die Möglichkeit eines Reorientierungsübergangs hängt stark von der Filmgeometrie, der Bandbesetzung sowie der Coulomb-Wechselwirkung ab. Die wesentliche Ursache für den Reorientierungsübergang ist die starke temperaturabhängige Reduktion der Magnetisierung der Oberflächenlage im Vergleich zu der Magnetisierung der inneren Lagen. Diese Reduktion läßt sich nur im Fall starker Coulomb-Wechselwirkung verstehen. Eine Hartree-Fock-Rechnung, die nur für schwache Korrelation motiviert ist, liefert dagegen eine erhöhte Oberflächenmagnetisierung bei endlichen Temperaturen (Stoner-Bild). Ein realistischer Reorientierungsübergang als Funktion der Temperatur ist im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung ausgeschlossen.

**Ausblick.** In dieser Arbeit wurden ausschließlich ferromagnetisch geordnete Filme betrachtet. Zusätzlich können mit den hier vorgestellten Theorien auch lagenweise antiferromagnetische Ordnungen untersucht werden. Diese sind vor allem in der Nähe von Halbfüllung ( $n = 1$ ) und für moderate Coulomb-Wechselwirkungen ( $U \approx W$ ) zu erwarten. Die Konkurrenz zwischen ferromagnetischer und lagenweiser antiferromagnetischer Ordnung kann zu einem sehr komplexen magnetischen Phasendiagramm führen.

Erste Untersuchungen für den Fall von an der Oberfläche variierten Hoppingparameter deuten auf erhöhte Oberflächeneffekte hin. Eine systematische Untersuchung solcher Effekte, die durch eine Variation der Parameter induziert sind, ist sicherlich eine interessante und lohnenswerte Aufgabe. Durch die Variation der Modellparameter ließe sich zum Beispiel auch der Einfluß einer unkorrelierten Deckschicht der Filme sowie das Verhalten von Mehrschichtsystemen aus verschiedenen Substanzen modellhaft untersuchen.

Für einen quantitativen Vergleich mit dem Experiment ist sicherlich die Berücksichtigung der Entartung der 3d-Bänder der Übergangsmetalle notwendig. Eine Verallgemeinerung der hier vorgestellten Modellrechnungen zu Filmsystemen auf Realsubstanzen wäre zum Beispiel in Analogie zu [81] möglich. Im Rahmen eines solchen Zugangs ist zu erwarten, daß sich die in den Modell-Filmen beobachteten Korrelationseffekte direkt auf reale Filme übertragen. Allgemein stellt der Übergang zu der Beschreibung realer Übergangsmetall-Filme eine interessante und spannende Herausforderung dar.

---

Alle in dieser Arbeit verwendeten Näherungsmethoden für Filmsysteme basieren auf der lokalen Näherung für die Selbstenergie. Es ist klar, daß nicht-lokale Anregungen insbesondere für Filmsysteme einen nicht unwichtigen Einfluß auf die magnetische Stabilität haben können. Während in Heisenberg-Filmen nicht-lokale Anregungen zum Beispiel im Rahmen der linearen Spinwellentheorie oder der Tjablikow-Näherung [10, 13] analysiert werden können, sind entsprechende Überlegungen im Rahmen stark korrelierter Hubbard-Filme noch nicht sehr weit fortgeschritten. Dies wäre ein zentrales Thema für weiterführende Arbeiten.



# A. Details der numerischen Auswertung

In diesem Anhang werden in knapper Form einige Details der numerischen Auswertung angesprochen. Die im folgenden vorgestellten Verfahren haben sich als erfolgreich erwiesen, sind aber natürlich keineswegs die einzig möglichen.

## A.1. Zur Lösung der impliziten Gleichungssysteme

Alle in dieser Arbeit vorgestellten approximativen Verfahren liefern ein nicht-lineares implizites Gleichungssystem, das selbstkonsistent gelöst werden muß. Die MAA und die IAA erfordern sogar die Lösung zweier ineinander verschachtelter impliziter Gleichungssysteme. Die Lösung des „inneren“ Gleichungssystems der MAA und der IAA (Selbstenergie, Green-Funktion) wurde in dieser Arbeit iterativ durchgeführt (siehe A.2). Eine iterative Lösung des („äußeren“) Gleichungssystems zur Bestimmung der Korrelationsfunktionen  $(n_\sigma, B_\sigma, \dots)$  ist allerdings sehr ineffektiv. Dies gilt insbesondere in der Nähe von Phasenübergängen. Hier bietet sich das Newton- oder das Broyden-Verfahren zur Nullstellensuche in mehrdimensionalen nicht-linearen Gleichungssystemen an [137]. Beide Verfahren reduzieren die Zahl der Iterationsschritte deutlich. Das Newton-Verfahren ist zudem in der Lage, neben den mathematisch stabilen auch die mathematisch instabilen Lösungen<sup>1</sup> zu finden. Allerdings wird das Newton-Verfahren für hochdimensionale Gleichungssysteme (z. B. im Fall der Hubbard-Filme) zunehmend ungünstiger, da hier in jedem Iterationsschritt die Jakobi-Matrix des Gleichungssystems numerisch berechnet werden muß. In diesem Fall ist das Broyden-Verfahren vorzuziehen.

Über das chemische Potential  $\mu$  wird die Bandbesetzung  $n$  festgelegt. Um Lösungen zu einer vorgegebenen Bandbesetzung zu bekommen, kann das chemische Potential, das über die Fermifunktion in die Rechnung eingeht, selbstkonsistent mitbestimmt werden. In jedem Iterationsschritt wird das chemische Potential dafür

---

<sup>1</sup> Mathematisch stabil bedeutet dabei, daß bei einer kleinen Abweichung von der exakten Lösung des Gleichungssystems das System bei der Iteration wieder gegen die exakte Lösung konvergiert. Bei einer instabilen Lösung dagegen entfernt sich das System in einem gewöhnlichen Iterationsverfahren schon bei einer minimalen Abweichung immer weiter von der exakten Lösung weg. Mathematisch instabil ist zum Beispiel die sogenannte *zweite* ferromagnetische Lösung, die für die in dieser Arbeit vorgestellten approximativen Theorien in der Nähe von Halbfüllung existiert und immer eine geringere Magnetisierung aufweist als die *erste* Lösung (vgl. Abb. 3.2 und 3.3).

geeignet angepaßt.

## A.2. Zur Berechnung der CPA-Selbstenergie

Sowohl in der MAA als auch in der IAA muß für jeden „äußeren“ Iterationsschritt die Selbstenergie  $\Sigma_\sigma(E)$  über die CPA-Gleichung<sup>2</sup> (3.74) als Funktion der Energie selbstkonsistent bestimmt werden. Denn in der CPA-Gleichung kommt die Selbstenergie  $\Sigma_\sigma(E)$  sowohl explizit als auch implizit über die lokale Green-Funktion  $G_{ii\sigma}(E)$  (3.75) vor. Für das Konvergenzverhalten hat es sich als sinnvoll erwiesen, die CPA-Gleichung (3.74) zunächst umzuformen. Beliebige Umformungen von (3.74) liefern im Falle der Konvergenz die gleiche Lösung. Für den gesamten Energiebereich außerordentlich stabil ist dabei folgende zu (3.74) äquivalente Gleichung für den Fall einer binären Legierung ( $E_{p\sigma}$ ,  $x_{p\sigma}$ ,  $p = 1, 2$ ):

$$\Sigma_\sigma + T_0 = \frac{(G_{ii\sigma}(\Sigma_\sigma + T_0) + 1)(x_{1\sigma}E_{1\sigma} + x_{2\sigma}E_{2\sigma}) - G_{ii\sigma}E_{1\sigma}E_{2\sigma}}{1 + G_{ii\sigma}(\Sigma_\sigma + T_0) - G_{ii\sigma}(x_{1\sigma}E_{2\sigma} + x_{2\sigma}E_{1\sigma})}. \quad (\text{A.1})$$

Dabei wurde das Energieargument von  $\Sigma_\sigma(E)$  und  $G_{ii\sigma}(E)$  nicht notiert. Eine Verallgemeinerung von (A.1) auf eine größere Anzahl von „Legierungsniveaus“ ( $p > 2$ ) ist leicht möglich. Insbesondere an den Bandkanten ist es für andere Umformungen von (3.74) oft schwer, iterativ eine selbstkonsistente Lösung zu finden. Das Auflösen von (3.74) nach  $\Sigma_\sigma(E)$  ist zum Beispiel nicht hilfreich. Als Startwert für  $\Sigma_\sigma(E)$  beim Iterationsverfahren kann eine beliebige komplexe Zahl verwendet werden (Im  $\Sigma_\sigma(E) < 0$  bezieht sich dabei auf die retardierte Green-Funktion).

Im sogenannten *split band limit* ( $|E_{2\sigma} - E_{1\sigma}|/W \gg 1$ ;  $W$ : Bloch-Bandbreite) besitzt  $\text{Re } \Sigma_\sigma(E)$  einen Pol zwischen  $E_{1\sigma}$  und  $E_{2\sigma}$  [107, 108]. An der Stelle des Pols bildet  $\text{Im } \Sigma_\sigma(E)$  einen  $\delta$ -Peak aus. Diese Singularität ist numerisch natürlich schwer zu reproduzieren. Allerdings liefert sie wegen des divergierenden Realteils der Selbstenergie keinen Beitrag zu der Quasiteilchenzustandsdichte  $\rho_\sigma(E) = \frac{1}{\pi h} \text{Im } G_{ii\sigma}(E - \mu)$ . Eine von Null verschiedene Quasiteilchenzustandsdichte ergibt sich in der CPA nur für Energien in der Nähe der Legierungsniveaus  $E_{p\sigma}$  (genauer für  $\min \varepsilon(\mathbf{k}) < E - E_{p\sigma} < \max \varepsilon(\mathbf{k})$ ) [107]. Im allgemeinen muß die CPA-Gleichung auch nur für solche Energien gelöst werden.

Eine Verallgemeinerung der obigen Diskussion auf die Behandlung von Filmsystemen ist leicht möglich.

## A.3. Zur Durchführung der $\mathbf{k}$ -Summation

Im vollständig translationssymmetrischen System kann die  $\mathbf{k}$ -Summation für den Fall, daß die  $\mathbf{k}$ -Abhängigkeit des Summanden nur über  $\varepsilon(\mathbf{k})$  eingeht, in eine Ener-

---

<sup>2</sup>bzw. die CPA-artige Gleichung (3.90) im Falle der IAA; dies macht aber für das folgende keinen Unterschied.

gieintegration über die Bloch-Zustandsdichte  $\rho_0(E)$  umgewandelt werden:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} F(\varepsilon(\mathbf{k})) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE \rho_0(E) F(E), \quad (\text{A.2})$$

$$\rho_0(E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - \varepsilon(\mathbf{k})). \quad (\text{A.3})$$

Numerisch ist eine eindimensionale Energieintegration natürlich sehr viel leichter zu handhaben als eine im allgemeinen mehrdimensionale  $\mathbf{k}$ -Summation. Für Filmsysteme ist eine solche Vereinfachung nicht mehr möglich<sup>3</sup>. Hier muß – zum Beispiel zur Berechnung der lokalen Green-Funktion – die zweidimensionale  $\mathbf{k}$ -Summation über den irreduziblen Bereich der ersten Brillouin-Zone der Oberflächenlage explizit durchgeführt werden.

Bei der numerischen  $\mathbf{k}$ -Summation können nur endlich viel  $\mathbf{k}$ -Punkte berücksichtigt werden. Diese sollten so gewählt sein, daß sie möglichst gleichmäßig über den irreduziblen Bereich der ersten Brillouin-Zone verteilt sind. Dies ist entweder über ein reguläres  $\mathbf{k}$ -Gitter oder über zufällig verteilte  $\mathbf{k}$ -Punkte möglich. In beiden Fällen läßt sich jedem  $\mathbf{k}$ -Punkt eine Fläche im  $\mathbf{k}$ -Raum zuordnen, die dessen Gewicht bestimmt. In der Summation sind diese Gewichte entsprechend zu berücksichtigen. Es ist sinnvoll, die Zahl der  $\mathbf{k}$ -Punkte variabel anhand der benötigten Genauigkeit zu bestimmen. In dieser Arbeit wurden maximal 5000  $\mathbf{k}$ -Punkte verwendet. Bei der Berechnung der lokalen Green-Funktion  $G_{ii\sigma}(iE_n) = 1/N \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}\sigma}(iE_n)$  an den Matsubara-Energien  $iE_n = i\pi(2n+1)/\beta$  ( $\beta = 1/(k_B T)$ ,  $n = 0, 1, \dots$ ; vgl. Anhang B) wird die  $\mathbf{k}$ -Abhängigkeit der Summanden  $G_{\mathbf{k}\sigma}(iE_n)$  mit zunehmendem Matsubara-index  $n$  geringer ( $G_{\mathbf{k}\sigma}(E)$  wird glatter im  $\mathbf{k}$ -Raum für Energien  $E$  mit einem großen Imaginärteil). Mit wachsendem  $n$  reichen daher immer weniger  $\mathbf{k}$ -Punkte aus, um  $G_{ii\sigma}(iE_n)$  im Rahmen einer gegebenen Genauigkeit zu berechnen.

## A.4. Zur Matrixinversion

Zur Berechnung der lokalen Green-Funktion ((4.21), (4.22)) des Filmsystems muß für jeden  $\mathbf{k}$ -Punkt eine Matrixinversion durchgeführt werden. Bei bis zu 5000  $\mathbf{k}$ -Punkten für jeden Energiewert  $E$  wird die Matrixinversion damit zum bestimmenden Zeitfaktor der Rechnung. Für dünne Filme kann die Green-Funktionsmatrix leicht analytisch invertiert werden, für dickere Filme gibt es eine Reihe von numerischen Methoden zur Matrixinvertierung [137]. Bei einer Beschränkung auf Hopping zwischen nächsten Nachbarn und auf solche Filmgeometrien, bei denen sich alle nächsten Nachbarn in derselben oder den beiden angrenzenden Lagen befinden, haben die zu invertierenden Matrizen eine Tridiagonalgestalt (vgl. (4.14)). Eine wesentliche Vereinfachung ergibt sich bei der Invertierung von Tridiagonalmatrizen, falls man nur an den Diagonalelementen der Inversen interessiert ist. Dies ist bei allen in dieser Arbeit vorgestellten Rechnungen der Fall.

---

<sup>3</sup> Außer im Fall einer sc(100)-Filmgeometrie, da hier das Hopping zwischen den Lagen konstant ist (vgl. Anhang C).

Folgendes Verfahren liefert die Diagonalelemente der inversen Matrix zu einer tridiagonalen Matrix mit sehr geringem numerischen Aufwand. Sei  $\hat{A}$  eine tridiagonale Matrix der Dimension  $n \times n$ :

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & 0 & 0 \\ b_1^\dagger & a_2 & b_2 & 0 \\ 0 & b_2^\dagger & a_3 & b_3 \\ 0 & 0 & b_3^\dagger & \ddots & \ddots \\ & & & \ddots & a_{n-1} & b_{n-1} \\ & & & & b_{n-1}^\dagger & a_n \end{pmatrix}. \quad (\text{A.4})$$

Die Elemente  $a_i$  und  $b_i$  von  $\hat{A}$  sind im allgemeinen komplexe Größen. Die Untermatrizen  $\hat{A}_i$  bzw.  $\hat{A}_{\bar{i}}$  von  $\hat{A}$  mit  $1 \leq i \leq n$  seien durch Streichen der letzten bzw. ersten  $n - i$  Zeilen und Spalten definiert:

$$\hat{A}_i = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & 0 & & \\ b_1^\dagger & a_2 & b_2 & & \\ 0 & b_2^\dagger & a_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & & a_i \end{pmatrix}; \quad \hat{A}_{\bar{i}} = \begin{pmatrix} a_{n-i+1} & b_{n-i+1} & 0 & & \\ b_{n-i+1}^\dagger & a_{n-i+2} & b_{n-i+2} & & \\ 0 & b_{n-i+2}^\dagger & a_{n-i+3} & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & & a_n \end{pmatrix}.$$

Zunächst soll die Determinante  $\det \hat{A}$  berechnet werden. Mit den Randwerten

$$\begin{aligned} \det \hat{A}_0 &= \det \hat{A}_{\bar{0}} = 1, \\ \det \hat{A}_n &= \det \hat{A}_{\bar{n}} = \det A, \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

ergibt sich mit Hilfe des Entwicklungssatzes zur Berechnung von Determinanten folgende Rekursionsformel für  $\det \hat{A}_i$  und  $\det \hat{A}_{\bar{i}}$ :

$$\begin{aligned} \det \hat{A}_i &= a_i \det \hat{A}_{i-1} - |b_{i-1}|^2 \det \hat{A}_{i-2}, \\ \det \hat{A}_{\bar{i}} &= a_{n-i+1} \det \hat{A}_{\bar{i}-1} - |b_{n-i+1}|^2 \det \hat{A}_{\bar{i}-2}. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Die Determinanten  $\det \hat{A}_i$  und  $\det \hat{A}_{\bar{i}}$  können also für beliebiges  $1 \leq i \leq n$  leicht rekursiv berechnet werden. Für  $i = n$  ergibt sich die Determinante  $\det \hat{A}$ . In uniformen Filmsystemen sind die beiden äußeren Lagen im allgemeinen äquivalent und der Film ist symmetrisch zur mittleren Lage. Unter Verwendung von  $a_i = a_{n-i+1}$  ( $1 \leq i \leq n$ ) und  $b_i = b_{n-i}$  ( $1 \leq i \leq n - 1$ ) ergibt sich dann folgende zusätzliche Vereinfachung:

$$\det \hat{A}_i = \det \hat{A}_{\bar{i}}. \quad (\text{A.7})$$

Die Diagonalelemente der Inversen zu  $\hat{A}$  sind gegeben durch:

$$(\hat{A}^{-1})_{ii} = \frac{1}{\det \hat{A}} \bar{A}_{ii}, \quad \bar{A}_{ii} : \text{Adjunkte von } a_{ii}. \quad (\text{A.8})$$

Aus der Definition der Adjunkten von  $a_{ii}$  folgt nun sofort:

$$\bar{A}_{ii} = \det \hat{A}_{i-1} \det \hat{A}_{\bar{n-i}}. \quad (\text{A.9})$$

Der numerische Aufwand zur Bestimmung der Diagonalelemente von  $\hat{A}^{-1}$  beschränkt sich also auf die Berechnung der Determinante von  $\hat{A}$  gemäß der Rekursionsformel (A.6). Merkt man sich dabei die jeweiligen Unterdeterminanten  $\det \hat{A}_i$  und  $\det \hat{A}_{\bar{i}}$ , so ergeben sich mit (A.8) und (A.9) unmittelbar die Diagonalelemente von  $\hat{A}^{-1}$ .



## B. Matsubara-Summen

Thermodynamische Erwartungswerte können sowohl über eine Energieintegration entlang der reellen Energieachse als auch auf der imaginären Energieachse mit Hilfe von Matsubara-Summen berechnet werden. Insbesondere für Filmsysteme hat sich die Verwendung von Matsubara-Summen als günstig erwiesen. Dieser Anhang besteht aus zwei Teilen. In [B.1](#) wird ein allgemeines Verfahren für den Übergang zu Matsubara-Summen angegeben. Der Übergang wird für die Bandbesetzung  $n_\sigma$  die Bandverschiebung  $B_\sigma$  sowie für die innere Energie  $E_0$  explizit durchgeführt. Anschließend ([B.2](#)) wird dargestellt, wie sich die Matsubara-Summen sinnvoll numerisch berechnen lassen. Die numerischen Vor- und Nachteile der Methode werden kurz diskutiert. Um die Notation einfach zu halten, wird hier nur der translations-symmetrische Fall behandelt. Eine Verallgemeinerung auf Filmsysteme ist sofort möglich.

### B.1. Übergang zu Matsubara-Summen

Die Bandbesetzung  $n_\sigma$ , die Bandverschiebung  $B_\sigma$  und die innere Energie  $E_0$  erhält man mit Hilfe der lokalen Green-Funktion  $G_{ii\sigma}(E) = 1/N \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}\sigma}(E)$  und der Selbstenergie  $\Sigma_\sigma(E)$  (hier soll nur der Fall einer lokalen Selbstenergie behandelt werden). Ausgangspunkt sind die Gleichungen ([3.19](#)), ([3.41](#)) und ([3.28](#)):

$$n_\sigma = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_-(E + \mu) \frac{1}{\hbar} G_\sigma(E), \quad (\text{B.1})$$

$$\tilde{B}_\sigma = (n_\sigma(1 - n_\sigma))(B_\sigma - T_0) \quad (\text{B.2})$$

$$= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_-(E + \mu) \left( \frac{2}{U} \Sigma_\sigma - 1 \right) \left[ (E + \mu - T_0 - \Sigma_\sigma) \frac{1}{\hbar} G_{ii\sigma} - 1 \right],$$

$$E_0 = \frac{\langle H \rangle}{N} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_-(E + \mu) \left[ (E + \mu - \frac{1}{2} \Sigma_\sigma) \frac{1}{\hbar} G_{ii\sigma} - 1 \right]. \quad (\text{B.3})$$

Die Integrationen entlang der reellen Energieachse in ([B.1](#))-([B.3](#)) können für  $T \neq 0$  unter Anwendung des Residuensatzes als diskrete, unendliche Summen (Matsubara-Summen) über die Matsubara-Energien  $iE_n = i\pi(2n + 1)/\beta$ , mit  $\beta = 1/(k_B T)$  und

$n = 0, 1, \dots$ , geschrieben werden:

$$n_\sigma = \frac{1}{2} + \frac{2}{\beta} \operatorname{Re} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\hbar} G_{ii\sigma}(iE_n), \quad (\text{B.4})$$

$$\begin{aligned} \tilde{B}_\sigma &= \frac{2}{\beta} \operatorname{Re} \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{2}{U} \Sigma_\sigma(iE_n) - 1 \right) \times \\ &\quad \left[ \left( iE_n + \mu - T_0 - \Sigma_\sigma(iE_n) \right) \frac{1}{\hbar} G_{ii\sigma}(iE_n) - 1 \right], \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} (T_0 + \frac{1}{2} U n_\sigma) + \\ &\quad + \frac{2}{\beta} \operatorname{Re} \sum_{\sigma} \sum_{n=0}^{\infty} \left[ \left( iE_n + \mu - \frac{1}{2} \Sigma_\sigma(iE_n) \right) \frac{1}{\hbar} G_{ii\sigma}(iE_n) - 1 \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Die Umformungen auf (B.4)-(B.6) sollen im folgenden bewiesen werden. Da die Ausdrücke (B.1)-(B.3) alle die gleiche Struktur haben, ist es sinnvoll, eine allgemeine Methode für den Übergang zu Matsubara-Summen anzugeben. Insbesondere sind die Integranden in (B.1)-(B.3) in die obere komplexe Halbebene analytisch fortsetzbar ( $G_\sigma(E)$ : retardierte Green-Funktion) und verschwinden für große Energien mindestens wie  $1/E$ .

**Behauptung.** Sei  $g(E) : C \rightarrow C$  analytisch in der oberen komplexen Halbebene und das Hochenergieverhalten von  $g(E)$  sei gegeben durch

$$g(E) \xrightarrow{|E| \rightarrow \infty} \frac{m^{(0)}}{E} + \frac{m^{(1)}}{E^2} + \dots, \quad (\text{B.7})$$

mit den Hochenergiekoeffizienten  $m^{(n)}$ ,  $n = 0, 1, \dots$ . Der Hochenergiekoeffizient  $m^{(0)}$  sei reell. Dann gilt für  $T \neq 0$ :

$$-\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_-(E + \mu) g(E + i0^+) = \frac{m^{(0)}}{2} + \frac{2}{\beta} \operatorname{Re} \sum_{n=0}^{\infty} g(iE_n), \quad (\text{B.8})$$

mit den Matsubara-Energien  $iE_n = i\pi(2n-1)/\beta$ . Der Beweis von (B.8) wird weiter unten durchgeführt. Zunächst sei aber bemerkt, daß die Matsubara-Summen (B.4)-(B.6) mit (B.8) direkt aus (B.1)-(B.3) und den jeweiligen Hochenergiekoeffizienten der Integranden folgen. Für (B.1)-(B.3) lassen sich die ersten Hochenergiekoeffizienten der Integranden leicht berechnen:

**Bandbesetzung (B.1):**

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} G_{ii\sigma}(E) &\xrightarrow{|E| \rightarrow \infty} \sum_n \frac{M_{ii\sigma}^{(n)}}{E^{n+1}} \\ &\xrightarrow{|E| \rightarrow \infty} \frac{1}{E} + \frac{1}{E^2} [T_0 - \mu + U n_{-\sigma}] + \dots \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

**Bandverschiebung (B.2):**

$$\left(\frac{2}{U}\Sigma_\sigma - 1\right) \left[ (E + \mu - T_0 - \Sigma_\sigma) \frac{1}{\hbar} G_{ii\sigma} - 1 \right] \xrightarrow{|E| \rightarrow \infty} \frac{1}{E^2} [(2n_{-\sigma} - 1)(D_2 - T_0^2)], \quad (\text{B.10})$$

mit  $D_2 = 1/N \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon(\mathbf{k}))^2$ . Man beachte, daß hier der  $1/E$ -Koeffizient verschwindet.

**Innere Energie (B.3):**

$$\begin{aligned} & \left[ (E + \mu - \frac{1}{2}\Sigma_\sigma(E)) \frac{1}{\hbar} G_{ii\sigma}(E) - 1 \right] \\ & \xrightarrow{|E| \rightarrow \infty} \frac{1}{E} [T_0 + \frac{1}{2}Un_{-\sigma}] \\ & + \frac{1}{E^2} [D_2 + \frac{3}{2}T_0Un_{-\sigma} - T_0\mu + \frac{1}{2}Un_{-\sigma}(U - \mu)]. \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Insbesondere ist der  $1/E$ -Koeffizient der Integranden also immer reell. Die  $1/E^2$ -Koeffizienten, die hier ebenfalls angegeben sind, erweisen sich als hilfreich bei der numerischen Berechnung der Matsubara-Summen, denn sie bestimmen das asymptotische Verhalten der Summanden für  $n \rightarrow \infty$  (vgl. B.2).

**Beweis von (B.8).** Die Integration in (B.8) verläuft entlang der reellen Energieachse. Der Integrationsweg kann wie folgt umgeschrieben werden:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE \dots = \underbrace{\oint_{\alpha} dE \dots}_{=:A} + \underbrace{\oint_{\beta} dE \dots}_{=:B}$$

$R$  ist der Radius des Kreisbogens der Hilfswege  $\alpha$  und  $\beta$ . Für das Integral  $A$  gilt dann mit dem Residuensatz:

$$A = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \oint_{\alpha} dE f_{-}(E + \mu) g(E + i0^{+}) \quad (\text{B.12})$$

$$= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[ 2\pi i \sum_{p \in \alpha} \text{Res}_p (f_{-}(E + \mu) g(E + i0^{+})) \right]. \quad (\text{B.13})$$

Da  $g(E)$  analytisch in der oberen Halbebene ist, läuft die Summation in (B.13) allein über die Pole der Fermi-Funktion, die innerhalb des Weges  $\alpha$  liegen. Die Polstellen

der Fermi-Funktion sind nun gerade die oben definierten Matsubara-Energien  $iE_n$ :

$$\begin{aligned} & 1/f_-(E + \mu) \stackrel{!}{=} 0 \\ \rightarrow & e^{\beta E} + 1 \stackrel{!}{=} 0 \\ \rightarrow & iE_n = i\pi \frac{2n + 1}{\beta}, \quad n \in \mathbb{Z}. \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Die Polstellen bei  $iE_n$  sind von erster Ordnung. Die zugehörigen Residuen lassen sich dann gemäß  $\text{Res}_p(z(x)/n(x)) = z(p)/n'(p)$  leicht berechnen:

$$\text{Res}_{iE_n}(f_-(E + \mu)g(E)) = \text{Res}_{iE_n}\left(\frac{g(E)}{e^{\beta E} + 1}\right) = -\frac{g(iE_n)}{\beta}. \quad (\text{B.15})$$

Damit gilt schließlich:

$$A = \frac{2}{\beta} \text{Re} \sum_{n=0}^{n_{max}} g(iE_n). \quad (\text{B.16})$$

Die Schranke  $n_{max}$  bezeichnet dabei den maximalen Matsubara-Index  $n$ , für den  $iE_n$  noch innerhalb des Halbkreisbogens  $\alpha$  liegt.

Es bleibt die Bestimmung des Intergrals entlang des Weges  $\beta$ :

$$B = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{\beta} dE f_-(E + \mu)g(E). \quad (\text{B.17})$$

Dieses Integral läßt sich für  $R \rightarrow \infty$  berechnen. In diesem Limes kann die Funktion  $g(E)$  durch ihre Hochenergieentwicklung ersetzt werden:

$$\lim_{R \rightarrow \infty} B = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[ m^{(0)} \int_{\beta} dE \frac{1}{E} \frac{1}{e^{\beta E} + 1} + \underbrace{m^{(1)} \int_{\beta} dE \frac{1}{E^2} \frac{1}{e^{\beta E} + 1} + \dots}_{\rightarrow 0} \right] \quad (\text{B.18})$$

Das zweite Integral aus der rechten Seite verschwindet für  $R \rightarrow \infty$ , da der Integrand wie  $1/R^2$  abnimmt aber der Integrationsweg nur proportional  $R$  anwächst. Analog liefern auch alle höheren Ordnungen der Hochenergieentwicklung keinen Beitrag. Zur Berechnung des ersten Integrals in (B.18) wird nun der Integrationsweg  $\beta$  wieder umgeschrieben als ein Integral entlang der reellen Energieachse und ein Integral entlang  $\alpha$ :

$$\lim_{R \rightarrow \infty} B = -\frac{m^{(0)}}{\pi} \text{Im} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{1}{E + i0^+} \frac{1}{e^{\beta E} + 1} + \oint_{\alpha} dE \frac{1}{E + i0^+} \frac{1}{e^{\beta E} + 1} \right]. \quad (\text{B.19})$$

Der zweite Term auf der rechten Seite verschwindet wegen:

$$\text{Im} \oint_{\alpha} dE \frac{1}{E + i0^+} \frac{1}{(e^{\beta E} + 1)} = \text{Im} \left[ 2\pi i \sum_{n=0}^{\infty} \text{Res}_{iE_n} \left( \frac{1}{E(e^{\beta E} + 1)} \right) \right] \quad (\text{B.20})$$

$$= 2\pi \text{Re} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{-iE_n \beta} = 0. \quad (\text{B.21})$$

Der erste Term kann mit Hilfe der Dirac-Identität,

$$\frac{1}{x - x_0 \pm i0^+} = \mathcal{P} \frac{1}{x - x_0} \mp i\pi\delta(x - x_0), \quad (\text{B.22})$$

( $\mathcal{P}$ : Cauchyscher Hauptwert) berechnet werden:

$$\begin{aligned} -\frac{m^{(0)}}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{1}{E + i0^+} \frac{1}{e^{\beta E} + 1} &= \\ &= -\frac{m^{(0)}}{\pi} \text{Im} \left[ \underbrace{\mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{1}{E} \frac{1}{e^{\beta E} + 1}}_{\text{reell}} - \underbrace{i\pi \int_{-\infty}^{\infty} dE \delta(E) \frac{1}{e^{\beta E} + 1}}_{= i\pi/2} \right] \\ &= \frac{1}{2} m^{(0)}. \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

Zusammen mit (B.16) liefert das die Behauptung:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_-(E + \mu) g(E + i0^+) &= \lim_{R \rightarrow \infty} (A + B) \\ &= \frac{1}{2} m^{(0)} + \frac{2}{\beta} \text{Re} \sum_{n=0}^{\infty} g(iE_n). \end{aligned}$$

□

## B.2. Zur numerischen Berechnung der Matsubara-Summen

Die Umformung auf Matsubara-Summen soll als Hilfsmittel dienen, Erwartungswerte ( $n_\sigma, B_\sigma, \dots$ ) mit möglichst geringem numerischen Aufwand zu berechnen. In scheinbarem Widerspruch dazu steht die Tatsache, daß (B.4)-(B.6) unendliche Summen darstellen. Es ist klar, daß das Ziel sein muß, sich auf die Berechnung von möglichst wenig Summanden zu beschränken. Zum Beispiel erfordert die Berechnung der lokalen Green-Funktion in Filmsystemen für jede Matsubara-Energie eine  $\mathbf{k}$ -Summation sowie für jeden  $\mathbf{k}$ -Punkt eine Matrix-Inversion. Dies ist numerisch im allgemeinen sehr aufwendig. Im folgenden soll konkret die Berechnung der Bandbesetzung  $n_\sigma$  (B.4) diskutiert werden. Der Anschaulichkeit halber ist in Abbildung B.1 der Verlauf des Summanden  $\text{Re} G_{ii\sigma}(iE_n)$  als Funktion des Matsubara-Index  $n$  gezeigt. Zur Reduzierung des numerischen Aufwandes bei der Berechnung der Matsubara-Summen wurden in dieser Arbeit zwei Methoden verwendet:

**(i) Berücksichtigung des asymptotischen Verhaltens.** Für große Matsubara-Energien kann  $\text{Re } G_{ii\sigma}(iE_n)$  durch das über die Hochenergiekoeffizienten bekannte asymptotische Verhalten der lokalen Green-Funktion ersetzt werden. Da die Hochenergiekoeffizienten der Green-Funktion reell sind, folgt:

$$\frac{1}{\hbar} \text{Re } G_{ii\sigma}(iE_n) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} -\frac{M_{ii\sigma}^{(1)}}{E_n^2} + \frac{M_{ii\sigma}^{(3)}}{E_n^4} + \dots \quad (\text{B.24})$$

Damit kann man die Bandbesetzung (B.4) schreiben als:

$$n_\sigma = \frac{1}{2} + \frac{2}{\beta} \left[ \text{Re} \sum_{n=0}^{n'} \frac{1}{\hbar} G_{ii\sigma}(iE_n) + M_{ii\sigma}^{(1)} \sum_{n'=1}^{\infty} \frac{1}{E_n^2} + M_{ii\sigma}^{(3)} \sum_{n'=1}^{\infty} \frac{1}{E_n^4} \right] + R. \quad (\text{B.25})$$

Der Restterm  $R$  kann für genügend große  $n'$  beliebig klein gehalten werden (Abb. B.1). Für eine feste, gewünschte Genauigkeit hängt der konkrete Wert für  $n'$  sehr stark von den aktuellen Parametern ab ( $T$ ,  $n_\sigma$ ,  $U$ , Spinrichtung  $\sigma$ ). Die Berechnung der Summen  $\sum_{n'=1}^{\infty} \frac{1}{E_n^\alpha}$  ( $\alpha = 2, 4$ ) ist exakt möglich. Es gilt:

$$\sum_{n'=1}^{\infty} \frac{1}{E_n^\alpha} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{E_n^\alpha} - \sum_{n=0}^{n'} \frac{1}{E_n^\alpha}. \quad (\text{B.26})$$

Der erste Term auf der rechten Seite ergibt sich zu:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{E_n^\alpha} = \frac{\beta^\alpha}{\pi^\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^\alpha} = \frac{\beta^\alpha}{\pi^\alpha} \left( 1 - \frac{1}{2^\alpha} \right) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^\alpha} \quad (\text{B.27})$$

$$= \begin{cases} \beta^2/8, & \alpha = 2 \\ \beta^4/96, & \alpha = 4 \end{cases} \quad (\text{B.28})$$

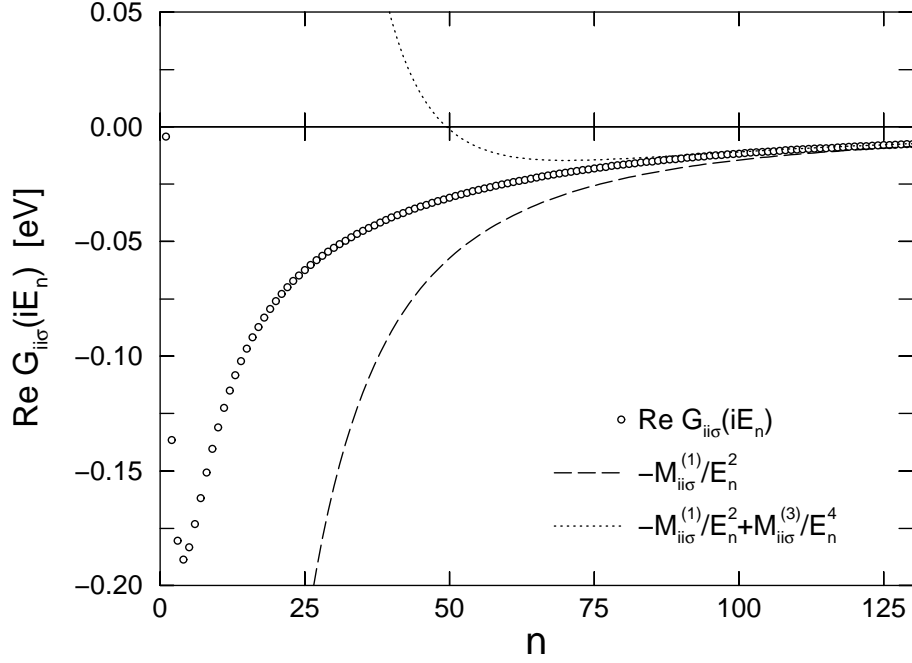
Der zweite Term stellt nur eine endliche Summe dar und kann damit leicht numerisch bestimmt werden. Analoge Überlegungen gelten für die Summationen in (B.5) und (B.6). Hier wurde in dieser Arbeit allerdings nur der erste Term der Asymptotik ( $1/E^2$ ) verwendet.

Die Summanden in (B.4)-(B.6) müssen also nur bis zu einer gewissen Obergrenze  $n'$  explizit berechnet werden. Sobald die Asymptotik genügend gut erreicht ist, kann der weitere Beitrag zur Matsubara-Summation ohne großen numerischen Aufwand bestimmt werden. Man beachte, daß der Beitrag zur Matsubara-Summe für  $n > n'$  im allgemeinen nicht vernachlässigbar ist.

**(ii) Interpolation zwischen verschiedenen Matsubara-Energien.** Für Matsubara-Energien  $E_n < E_{n'}$  läßt sich eine weitere Vereinfachung zur Reduzierung des numerischen Aufwandes motivieren. Mit steigendem Matsubara-Index wird  $\text{Re } G_{ii\sigma}(iE_n)$  zunehmend glatter, so daß eine Interpolation zwischen verschiedenen Matsubara-Energien sinnvoll erscheint (Abb. B.1). In dieser Arbeit wurde zur Interpolation von  $\text{Re } G_{ii\sigma}(iE_n)$  zwischen zwei Matsubara-Energien  $E_{n-s}$  und  $E_n$  ( $s > 1$ : Schrittweite der Interpolation) folgender Ansatz verwendet:

$$\text{Re } G_{ii\sigma}(iE_n) = \frac{A_n}{E_n^2} + \frac{B_n}{E_n^4}, \quad (\text{B.29})$$

$$\text{Re } G_{ii\sigma}(iE_{n-s}) = \frac{A_n}{E_{n-s}^2} + \frac{B_n}{E_{n-s}^4}. \quad (\text{B.30})$$



**Abbildung B.1.:** Realteil der lokalen Green-Funktion  $\text{Re } G_{ii\sigma}(iE_n)$  als Funktion des Matsubara-Index  $n$  für einen typischen Parametersatz in der paramagnetischen Phase. Zusätzlich sind die ersten beiden Beiträge der Asymptotik gemäß (B.24) eingezeichnet.

Für Matsubara-Energien  $E_l$  mit  $E_{n-s} < E_l < E_n$  gilt dann im Sinne einer Interpolation:

$$\text{Re } G_{ii\sigma}(iE_l) \approx \frac{A_n}{E_l^2} + \frac{B_n}{E_l^4}. \quad (\text{B.31})$$

Die Interpolationsparameter  $A_n$  und  $B_n$  ergeben sich mit (B.29) und (B.30) zu:

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_n^2 & 1 \\ E_{n-s}^4 & 1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} E_n^4 \text{Re } G_{ii\sigma}(iE_n) \\ E_{n-s}^4 \text{Re } G_{ii\sigma}(iE_{n-s}) \end{pmatrix}. \quad (\text{B.32})$$

Die Güte der Interpolation hängt natürlich von  $n$  und  $s$  ab und lässt sich numerisch anhand bereits berechneter Matsubara-Punkte abschätzen. Unterschreitet der Fehler eine gegebene Toleranzschwelle, so wird die Green-Funktion in der weiteren Rechnung zwischen den nächsten  $s$  Matsubara-Energien interpoliert. Startend mit  $s = 2$  wird die Schrittweite immer weiter erhöht. Die Interpolationsparameter  $A_n$  und  $B_n$  nähern sich mit steigendem  $n$  den exakten Hochenergiekoeffizienten immer mehr an. Die Verallgemeinerung zur Berechnung der Summationen (B.5) und (B.6) ist wieder leicht möglich.

## Über die Vor- und Nachteile der Matsubara-Summation

### Nachteile:

- ⊖ Die Summanden in (B.4)-(B.6) haben keine anschauliche Bedeutung. Um eventuelle Programmierfehler auszuschließen, müssen Vergleichsrechnungen auf der reellen Energie-Achse durchgeführt werden.
- ⊖ Um physikalisch aussagekräftige Größen wie die QDOS oder die Spektraldichte diskutieren zu können, muß die Green-Funktion am Ende eines Iterationszyklus weiterhin auf der reellen Achse berechnet werden.
- ⊖ Für eine genaue *und* schnelle Berechnung der Erwartungswerte ist relativ viel Programmierarbeit notwendig.

### Vorteile:

- ⊕ Für nicht zu tiefe Temperaturen ist die Methode der Matsubara-Summen numerisch sehr effektiv. Dies hat sich insbesondere bei der Behandlung der Film-Systeme als entscheidend herausgestellt.
- ⊕ Die Green-Funktion  $G_{\mathbf{k}\sigma}(iE_n)$  wird im  $\mathbf{k}$ -Raum für große Matsubara-Energien zunehmend glatter. Für die  $\mathbf{k}$ -Summation zur Berechnung der lokalen Green-Funktion werden daher immer weniger  $\mathbf{k}$ -Punkte benötigt (vgl. Anhang A).
- ⊕ Die Matsubara-Summationen sind numerisch sehr stabil. Der Übergang zu singulären Grenzfällen (z. B. ferromagnetische Sättigung) ist im allgemeinen unproblematisch.

## C. Details zum Aufbau der Filmstrukturen

Die in dieser Arbeit betrachteten idealen Filme sind entlang zweier paralleler Gitterebenen (Oberflächenlagen) aus einem Volumenkristall herausgeschnitten. Der Film besteht dann aus insgesamt  $d$  parallelen Gitterebenen, die – von einer der beiden Oberflächenlagen startend – mit  $\alpha = 1, \dots, d$  durchnummeriert werden. Repräsentiert der zugrundeliegende Volumenkristall ein Bravaisgitter, so gilt dies auch für die Gitterpunkte der einzelnen Filmebenen [123]. Dieses zweidimensionale Bravais-Gitter sei aufgebaut durch die Gittervektoren  $\mathbf{a}_1$  und  $\mathbf{a}_2$ . Zu jedem Gitterpunkt ist eine  $d$ -atomige Basis  $\mathbf{r}_\alpha$  assoziiert, die sich auf die  $d$  Lagen des Films bezieht. Diese Basis sei gegeben durch die  $d$  Vielfachen eines Vektors  $\mathbf{c}$ . Dabei ist  $\mathbf{c}$  ein beliebiger Vektor, der zwei Gitterpunkte angrenzender Lagen miteinander verbindet. Zusammenfassend werden also die  $Nd$  Gitterpunkte des Films beschrieben durch:

$$\mathbf{R}_{i\alpha} = \mathbf{R}_i + \mathbf{r}_\alpha, \quad (\text{C.1})$$

$$\mathbf{R}_i = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2, \quad n, m \in N \quad (\text{C.2})$$

$$\mathbf{r}_\alpha = \alpha\mathbf{c}, \quad \alpha = 1, \dots, d. \quad (\text{C.3})$$

Für  $d \rightarrow \infty$  erhält man ein halbunendliches System (Volumenkristall mit einer Oberfläche).

In Tabelle C.1 sind die Vektoren  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  und  $\mathbf{c}$  für einige niedrig indizierte Filme, basierend auf den kubischen Volumenkristallen sc, bcc und fcc, angegeben. Dabei wurde das Koordinatensystem der Filme so gewählt, daß die Lage  $\alpha = 1$  in der x-y-Ebene liegt. Hier werden nur solche Filme betrachtet, in denen alle nächsten Nachbarn in derselben oder in einer der beiden angrenzenden Lage liegen. Zusätzlich sind in der Tabelle C.1 die zu den Gittervektoren  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  gehörenden reziproken Gittervektoren  $\mathbf{b}_1$  und  $\mathbf{b}_2$  angegeben.

Bei Beschränkung auf uniformes Hopping zwischen nächsten Nachbarn läßt sich die Dispersionsmatrix (vgl. (4.7))

$$T_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_{ij} T_{ij}^{\alpha\beta} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}. \quad (\text{C.4})$$

über die Dispersionen  $\gamma_{\parallel}(\mathbf{k})$  und  $\gamma_{\perp}(\mathbf{k})$  darstellen (vgl. (4.13)):

$$T_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} \equiv \begin{cases} T_{0\alpha} + t\gamma_{\parallel}(\mathbf{k}), & \alpha = \beta \\ t\gamma_{\perp}(\mathbf{k}), & \alpha = \beta - 1 \\ t\gamma_{\perp}^*(\mathbf{k}), & \alpha = \beta + 1. \end{cases} \quad (\text{C.5})$$

Dabei ist  $\mathbf{k}$  ein zweidimensionaler Wellenvektor (allerdings der Einfachheit halber dreidimensional notiert). Die Dispersionen ergeben sich wie folgt direkt aus (C.4):

$$\gamma_{\parallel}(\mathbf{k}) = \sum_j^{\mathbf{R}_{i\alpha}, \mathbf{R}_{j\beta} \text{ n.N.; } \alpha=\beta} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} , \quad (\text{C.6})$$

$$\gamma_{\perp}(\mathbf{k}) = \sum_j^{\mathbf{R}_{i\alpha}, \mathbf{R}_{j\beta} \text{ n.N.; } \alpha=\beta-1} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} . \quad (\text{C.7})$$

Um  $\gamma_{\parallel}(\mathbf{k})$  und  $\gamma_{\perp}(\mathbf{k})$  zu berechnen muß man also alle nächsten Nachbarn eines beliebigen Gitterplatzes entsprechend ihrer Lage sortieren und in (C.6) bzw. (C.7) einsetzen. In  $\gamma_{\perp}(\mathbf{k})$  gehen nur die nächsten Nachbarn einer der beiden möglichen angrenzenden Lagen ein. Während  $\gamma_{\parallel}(\mathbf{k})$  immer reell ist, ist  $\gamma_{\perp}(\mathbf{k})$  im allgemeinen eine komplexe Größe. In die konkrete Rechnung geht allerdings nur das Betragsquadrat  $|\gamma_{\perp}(\mathbf{k})|^2$  ein.

**Tabelle C.1.:** Für verschiedene niedrig indizierte Filmgeometrien, basierend auf den kubischen Volumenkristallen sc, bcc und fcc, sind die Gittervektoren  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  des zweidimensionalen Bravais-Gitters, die zugehörigen reziproken Gittervektoren  $\mathbf{b}_1$ ,  $\mathbf{b}_2$  sowie der Vektor  $\mathbf{c}$ , der zwei Gitterplätze benachbarter Lagen verbindet, aufgeführt. Der Einfachheit halber sind die zweidimensionalen Vektoren  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$ ,  $\mathbf{b}_1$  und  $\mathbf{b}_2$  dreidimensional notiert. Zusätzlich sind die Dispersionen  $\gamma_{\parallel}(\mathbf{k})$  und  $\gamma_{\perp}(\mathbf{k})$  angegeben.  $a$  ist die Gitterkonstante des zugrundeliegenden kubischen Gitters.

sc(100)	$\mathbf{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{a}_2 = a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{c} = a \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$
	$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$
	$\gamma_{\parallel}(\mathbf{k}) = 2[\cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_2)]$ $\gamma_{\perp}(\mathbf{k}) = 1$
sc(110)	$\mathbf{a}_1 = a \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{a}_2 = a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{c} = a \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$
	$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$
	$\gamma_{\parallel}(\mathbf{k}) = 2 \cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_2)$ $\gamma_{\perp}(\mathbf{k}) = 1 + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_1}$

sc(111)	$\mathbf{a}_1 = a \begin{pmatrix} \sqrt{3/2} \\ \sqrt{1/2} \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{a}_2 = a \begin{pmatrix} \sqrt{3/2} \\ -\sqrt{1/2} \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{c} = a \begin{pmatrix} \sqrt{2/3} \\ 0 \\ 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}$
	$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}$
	$\gamma_{  }(\mathbf{k}) = 0$ $\gamma_{\perp}(\mathbf{k}) = 1 + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_2}$
bcc(100)	$\mathbf{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{a}_2 = a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{c} = a \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}$
	$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$
	$\gamma_{  }(\mathbf{k}) = 0$ $\gamma_{\perp}(\mathbf{k}) = 1 + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_2} + e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2)}$
bcc(110)	$\mathbf{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{a}_2 = a \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/2 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{c} = a \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$
	$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$
	$\gamma_{  }(\mathbf{k}) = 2[\cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_2)]$ $\gamma_{\perp}(\mathbf{k}) = 1 + e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{a}_1-\mathbf{a}_2)}$
fcc(100)	$\mathbf{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{a}_2 = a \begin{pmatrix} 1/2 \\ -1/2 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{c} = a \begin{pmatrix} 1/2 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix}$
	$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$
	$\gamma_{  }(\mathbf{k}) = 2[\cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_2)]$ $\gamma_{\perp}(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_2} + e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_2)}$
fcc(111)	$\mathbf{a}_1 = a \begin{pmatrix} \sqrt{3/8} \\ \sqrt{1/8} \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{a}_2 = a \begin{pmatrix} \sqrt{3/8} \\ -\sqrt{1/8} \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{c} = a \begin{pmatrix} 1/\sqrt{6} \\ 0 \\ 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}$
	$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} \sqrt{2/3} \\ \sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} \sqrt{2/3} \\ -\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}$
	$\gamma_{  }(\mathbf{k}) = 2[\cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_2) + \cos(\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2))]$ $\gamma_{\perp}(\mathbf{k}) = 1 + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_2}$



# Literaturverzeichnis

- [1] U. Gradmann, Adv. Phys. **3**, 161 (1974). 1, 1, 1
- [2] R. Allenspach, J. Magn. Magn. Mat. **129**, 160 (1994). 1, 1, 1, 1, 6.1, 6.1, 33, 34, 6.3, 6.4
- [3] K. Baberschke, Appl. Phys. A **62**, 417 (1996). 1, 1, 1, 6.1, 32, 33, 34, 34, 34, 6.3, 35
- [4] M. Farle, Rep. Prog. Phys. **61**, 755 (1998). 1, 1, 1, 1, 1.1, 1, 1, 6.1, 6.1, 33, 34, 34, 34, 6.3, 35
- [5] Dongqi Li, M. Freitag, J. Pearson, Z. Q. Qiu und S. D. Bader, Phys. Rev. Lett. **72**, 3112 (1994). 1, 1, 1, 1, 6.1
- [6] D. Pescia, M. Stampanoni, G. L. Bona, A. Vaterlaus, R. F. Willis und F. Meier, Phys. Rev. Lett. **58**, 2126 (1987). 1
- [7] W. Dürr, M. Taborelli, O. Paul, R. Germar, W. Gudat, D. Pescia und M. Landolt, Phys. Rev. Lett. **62**, 206 (1989). 1, 1, 1
- [8] N. D. Mermin und H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966). 1, 4.4, 2
- [9] D. K. Ghosh, Phys. Rev. Lett. **27**, 1584 (1971). 1, 4.4
- [10] W. Haubenreisser, W. Brodkorb, A. Corciovei und G. Costache, phys. stat. sol. (b) **53**, 9 (1972); D. T. Hung, J.C. S. Levy und O. Nagai, phys. stat. sol. (b) **93**, 351 (1979). 1, 1, 5, 24, 2, 28, 7
- [11] M. Bander und D. L. Mills, Phys. Rev. B **38**, 12015 (1988). 1, 4.4
- [12] A.-M. Daré und Y. M. Vilks anfang A.-M. S. Tremblay, Phys. Rev. B **53**, 14236 (1996). 1, 4.4
- [13] R. Schiller und W. Nolting, Solid State Commun. **110**, 121 (1998). 1, 4.4, 2, 28, 7
- [14] M. E. Fischer, J. Vac. Sci. Technol. **10**, 665 (1973). 1
- [15] C. Rau, Appl. Phys. A **49**, 579 (1989). 1
- [16] J. Kohlhepp, H. J. Elmers, S. Cordes und U. Gradmann, Phys. Rev. B **45**, 12287 (1992). 1, 1
- [17] Yi Li und K. Baberschke, Phys. Rev. Lett. **68**, 1208 (1992). 1, 1
- [18] Z. Q. Qiu, J. Pearson und S. D. Bader, Phys. Rev. B **49**, 8797 (1994). 1, 1

- [19] H. J. Elmers und J. Hauschild, Surf. Sci. **320**, 134 (1994). [1](#)
- [20] P. Schilbe, S. Siebentritt und K.-H. Rieder, Phys. Lett. A **216**, 20 (1996). [1](#), [1](#)
- [21] C. M. Schneider, P. Bressler, P. Schuster, J. Kirschner, J. J. de Miguel und R. Miranda, Phys. Rev. Lett. **64**, 1059 (1990). [1](#)
- [22] B. Schulz, R. Schwarzwald und K. Baberschke, Surf. Sci. **307-309**, 1102 (1994). [1](#)
- [23] J. Thomassen, F. May, B. Feldmann, M. Wuttig und H. Ibach, Phys. Rev. Lett. **69**, 3831 (1992). [1](#), [1](#)
- [24] Th. Detzel, M. Vonbank, M. Donath, N. Memmel und V. Dose, J. Magn. Magn. Mat. **152**, 287 (1996). [1](#)
- [25] Ch Würsch, C. H. Back, L. Bürgi, U. Ramsperger, A. Vaterlaus, U. Maier, D. Pescia, P. Politi, M. G. Pini und A. Rettori, Phys. Rev. B **55**, 15643 (1997). [1](#), [1](#)
- [26] W. Platow, M. Farle und K. Baberschke, Europhys. Lett. **43**, 713 (1998). [1](#), [1](#)
- [27] M. Zharnikov, A. Dittschar, W. Kuch, C. M. Schneider und J. Kirschner, Phys. Rev. Lett. **76**, 4620 (1996). [1](#), [1](#)
- [28] R. Kläsges, D. Schmitz, C. Carbone, W. Eberhardt und T. Kachel, Solid State Commun. **107**, 13 (1998). [1](#)
- [29] M. L. Néel, J. Phys. Radium **15**, 225 (1954). [1](#), [32](#), [33](#)
- [30] B. Schulz und K. Baberschke, Phys. Rev. B **50**, 13467 (1994). [1](#), [33](#), [34](#)
- [31] M. Farle, W. Platow, A. N. Anisimov, B. Schultz und K. Baberschke, J. Magn. Magn. Mat. **165**, 74 (1997); M. Farle, W. Platow, A. N. Anisimov, P. Pouloupoulos und K. Baberschke, Phys. Rev. B **56**, 5100 (1997). [1](#), [6.1](#), [33](#), [34](#)
- [32] D. P. Pappas, K.-P. Kämper und H. Hopster, Phys. Rev. Lett. **64**, 3179 (1990); D. P. Pappas, C. R. Brundle und H. Hopster, Phys. Rev. B **45**, 8169 (1992). [1](#), [6.1](#), [33](#)
- [33] Z. Q. Qiu, J. Pearson und S. D. Bader, Phys. Rev. Lett. **70**, 1006 (1993). [1](#), [6.1](#)
- [34] R. J. Hicken, S. J. Gray, A. Ercole, C. Daboo, D. J. Freeland, E. Gu, E. Ahmad, und J. A. C. Bland, Phys. Rev. B **55**, 5898 (1997). [1](#), [6.1](#)
- [35] C. L. Fu und A. J. Freeman, Phys. Rev. B **35**, 925 (1987). [1](#), [5](#)
- [36] T. Kraft, P. M. Marcus und M. Scheffler, Phys. Rev. B **49**, 11511 (1995). [1](#), [5](#)
- [37] T. Asada und S. Blügel, Phys. Rev. Lett. **79**, 507 (1997). [1](#)
- [38] R. Lorenz und J. Hafner, Phys. Rev. B **54**, 15937 (1996). [1](#), [34](#)

- [39] D. Spišák und J. Hafner, Phys. Rev. B **56**, 2646 (1997). 1, 1
- [40] D. Reiser, J. Henk, H. Gollisch und R. Feder, Solid State Commun. **93**, 231 (1995). 1
- [41] H. Hasegawa, J. Phys. F **16**, 347 (1986); H. Hasegawa, J. Phys. F **17**, 165 (1987); H. Hasegawa, J. Phys. F **17**, 679 (1987); H. Hasegawa, Surf. Sci. **182**, 591 (1987). 1, 21, 4.4
- [42] H. Hasegawa und F. Herman, J. Phys. (Paris) **49**, C8 1677 (1988). 1, 1, 21, 4.4
- [43] H. Hasegawa, Phys. Rev. B **43**, 10803 (1991). 1, 4.4
- [44] R. P. Erickson und D. L. Mills, Phys. Rev. B **43**, 10715 (1991). 1
- [45] R. P. Erickson und D. L. Mills, Phys. Rev. B **44**, 11825 (1991). 1
- [46] P. J. Jensen, H. Dreyssé und K. H. Bennemann, Surf. Sci. **269/270**, 627 (1991). 1
- [47] Long-Pei Shi und Wei-Gang Yang, J. Phys.: Condens. Matter **4**, 7997 (1992). 1
- [48] A. Hucht und K. D. Usadel, Phys. Rev. B **55**, 12309 (1997). 1, 34, 34, 34, 6.3, 6.4
- [49] P. J. Jensen und K. H. Bennemann, Solid State Commun. **105**, 577 (1998). 1, 34, 34, 34, 6.3, 6.4
- [50] M. P. Gokhale und D. L. Mills, Phys. Rev. B **49**, 3880 (1994); M. Plihal und D. L. Mills, Phys. Rev. B **52**, 12813 (1995). 1, 4.4, 4.4, 23
- [51] M. Potthoff, T. Herrmann, T. Wegner und W. Nolting, phys. stat. sol. (b) **210**, 199 (1998). 1, 2, 2, 2, 3.3.2, 6, 6, 7, 3.6, 12, 15, 16, 3.6.4, 3.6.4, 17, 17, 17, 18, 19, 19
- [52] A. B. Harris und R. V. Lange, Phys. Rev. **157**, 295 (1967). 1, 3.4, 3.4, 3.4, 5, 5, 5, 6, 3.6, 9, 12, 15, 18, 4.4, 7
- [53] W. Nolting, *Quantentheorie des Magnetismus*, Band 1 und 2 (Teubner Verlag, Stuttgart, 1986). 2, 2, 2, 2, 2, 3, 4, 4, 4.4, 5, 24, 4
- [54] J. Hubbard, Proc. R. Soc. London, Ser. A **276**, 238 (1963). 2, 2, 9, 9
- [55] M. C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. **10**, 159 (1963). 2
- [56] J. Kanamori, Prog. Theor. Phys. (Kyoto) **30**, 275 (1963). 2
- [57] W. Nolting, *Grundkurs: Theoretische Physik, Vielteilchentheorie*, Band 7 (Zimmermann-Neufang, Ulmen, 1992). 2, 2, 3.1, 1, 3.2, 3.6.2, 12
- [58] E. Lieb und F. Wu, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968). 2
- [59] W. Metzner und D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **62**, 324 (1989). 2, 8, 8, 8
- [60] V. Janis, Z. Phys. B **83**, 227 (1991). 2, 8



- 
- [85] J. M. Luttinger, Phys. Rev. **119**, 1153 (1960). [3.3.2](#)
- [86] J. M. Luttinger und J. C. Ward, Phys. Rev. **118**, 1417 (1960). [3.3.2](#), [14](#), [17](#)
- [87] S. M. Girvin A. H. MacDonald und D. Yoshioka, Phys. Rev. B **37**, 9753 (1988). [5](#)
- [88] H. Eskes und A. M. Oleś, Phys. Rev. Lett. **73**, 1279 (1994); H. Eskes, A. M. Oleś, M. B. J. Meinders und W. Stephan, Phys. Rev. B **50**, 17980 (1994). [5](#)
- [89] T. Herrmann, *Korrelationseffekte in der elektronischen Struktur eines Modell-Bandmagneten*, Diplomarbeit, Humboldt-Universität zu Berlin (1996). [6](#), [6](#), [8](#), [9](#), [9](#), [9](#), [9](#), [9](#), [9](#), [9](#), [9](#)
- [90] Z. M. Vilc und A.-M. S. Tremblay, J. Phys. I France **7**, 1309 (1997). [6](#)
- [91] C. Itzykson und J.-M. Drouffe, *Statistical Field Theorie*, volume I and II (Cambridge University Press, Cambridge, 1989). [3.5](#)
- [92] E. Müller-Hartmann, Z. Phys. B **74**, 507 (1989). [8](#), [8](#)
- [93] P. W. Anderson, Phys. Rev. **124**, 41 (1961). [8](#)
- [94] M. Caffarel und W. Krauth, Phys. Rev. Lett. **72**, 1545 (1994). [8](#)
- [95] J. E. Hirsch und R. M. Fye, Phys. Rev. Lett. **56**, 2521 (1986). [8](#)
- [96] L. M. Falicov und J. C. Kimball, Phys. Rev. Lett. **22**, 997 (1969). [3.6](#)
- [97] U. Brandt und C. Mielsch, Z. Phys. B **75**, 365 (1989); U. Brandt und C. Mielsch, Z. Phys. B **79**, 295 (1990); U. Brandt und C. Mielsch, Z. Phys. B **82**, 37 (1991). [3.6](#), [12](#), [14](#)
- [98] J. Hubbard, Proc. R. Soc. London, Ser. A **281**, 401 (1964). [3.6](#), [3.6.2](#), [3.6.2](#), [3.6.3](#)
- [99] W. Nolting, Z. Phys. B **255**, 25 (1972). [9](#), [9](#)
- [100] L. M. Roth, Phys. Rev. **184**, 451 (1969). [9](#)
- [101] J. Beenen und D. M. Edwards, Phys. Rev. B **52**, 13636 (1995). [9](#), [9](#), [9](#)
- [102] B. Mehlig, H. Eskes, R. Hayn und M. B. J. Meinders, Phys. Rev. B **52**, 2463 (1995). [9](#), [9](#), [9](#), [9](#)
- [103] H. Mori, Prog. Theor. Phys. **33**, 423 (1965); R. Zwanzig, Phys. Rev. **124**, 983 (1961). [9](#)
- [104] W. Nolting, S. Bei der Kellen und G. Borstel, Phys. Rev. B **43**, 1117 (1991). [9](#)
- [105] B. S. Shastry, H. R. Krishnamurthy und P. W. Anderson, Phys. Rev. B **41**, 2375 (1990). [9](#)
- [106] Th. Hanisch E. Müller-Hartmann und R. Hirsch, Physica B **186-188**, 834 (1993). [9](#)

- [107] B. Velický, S. Kirkpatrick und H. Ehrenreich, Phys. Rev. **175**, 747 (1968).  
[3.6.2](#), [12](#), [12](#), [4.4.3](#), [38](#), [38](#)
- [108] B. Velický, Phys. Rev. **184**, 614 (1969). [3.6.2](#), [12](#), [4.4.3](#), [38](#)
- [109] R. J. Elliott, J. A. Krumhansl und P. L. Leath, Rev. Mod. Phys. **46**, 465 (1974). [3.6.2](#), [12](#), [4.4.3](#)
- [110] R. Vlammig und D. Vollhardt, Phys. Rev. B **45**, 4637 (1992). [3.6.2](#)
- [111] J. Schneider und V. Drchal, phys. stat. sol. (b) **68**, 207 (1975). [12](#)
- [112] W. Nolting und T. Herrmann, in *Condensed Matter Theories Vol. 13*, (Nova Science Publ., Commack, 1998), Seite 169. [12](#), [12](#), [12](#), [12](#), [12](#), [13](#), [19](#)
- [113] D. M. Edwards und J. A. Hertz, Physica B **163**, 527 (1990); D. M. Edwards, J. Phys.: Condens. Matter **5**, 161 (1993). [3.6.3](#), [3.6.3](#), [14](#), [14](#)
- [114] S. Wernbter und G. Czycholl, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 5439 (1994); S. Wernbter und G. Czycholl, J. Phys.: Condens. Matter **7**, 7335 (1995). [14](#), [14](#), [14](#)
- [115] E. Müller-Hartmann, in *Proc. V Symp. Phys. Metals*, (Ustron-Jaszowiec, Polen, 1991), Seite 22. [15](#)
- [116] D. Meyer, T. Wegner, M. Potthoff und W. Nolting, preprint (1999). [3.6.4](#), [3.6.4](#)
- [117] D. Meyer und W. Nolting, unveröffentlicht. [3.6.4](#)
- [118] M. Potthoff, T. Wegner und W. Nolting, Phys. Rev. B **55**, 16132 (1997). [3.6.4](#), [3.6.4](#), [17](#), [17](#), [17](#)
- [119] T. Wegner, M. Potthoff und W. Nolting, Phys. Rev. B **57**, 6211 (1998). [3.6.4](#), [3.6.4](#), [17](#), [17](#), [17](#), [17](#), [17](#), [19](#)
- [120] K. Yosida und K. Yamada, Prog. Theor. Phys. **46**, 244 (1970); K. Yosida und K. Yamada, Prog. Theor. Phys. **53**, 970 (1975). [3.6.4](#)
- [121] H. Kajueter und G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **77**, 131 (1996). [17](#), [17](#)
- [122] A. Martin-Rodero, F. Flores, M. Baldo und R. Pucci, Solid State Commun. **44**, 911 (1982); A. Martin-Rodero, E. Louis, F. Flores und C. Tejedor, Phys. Rev. B **33**, 1814 (1996). [17](#)
- [123] N. W. Ashcroft und N. D. Mermin, *Solid State Physics*, (Saunders College, Philadelphia, 1976). [4.1](#), [C](#)
- [124] R. H. Victoria, L. M. Falicov und S. Ishida, Phys. Rev. B **30**, 3896 (1984). [21](#)
- [125] D. Vollhardt, in *Proc. Int. School of Physics "Enrico Fermi"*, Course CXXI, (North-Holland, 1994), Seite 31. [4.4](#)
- [126] Th. Pruschke, M. Jarrell und J. K. Freericks, Adv. Phys. **44**, 187 (1995). [4.4](#)
- [127] Th. Pruschke, Th. Obermeier, J. Keller und M. Jarrell, Physica B **223-224**, 611 (1996). [4.4](#)

- 
- [128] S. Bei der Kellen, W. Nolting und G. Borstel, Phys. Rev. B **42**, 447 (1990). [2](#)
- [129] M. Dzierzawa, Z. Phys. B **86**, 49 (1992). [4.4.1](#)
- [130] M. Potthoff und W. Nolting, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 4937 (1996). [4.4.2](#)
- [131] M. Potthoff und W. Nolting, Surf. Sci. **377-379**, 457 (1997). [4.4.2](#)
- [132] T. Herrmann, M. Potthoff und W. Nolting, Phys. Rev. B **58**, 831 (1998). [4.4.2](#), [4.4.2](#), [5](#), [5](#), [23](#), [23](#), [6.2](#), [6.3](#), [6.4](#), [6.4](#)
- [133] T. Herrmann und W. Nolting, J. Phys.: Condens. Matter **11**, 89 (1999). [4.4.3](#), [4.4.3](#), [5](#), [27](#), [27](#), [28](#), [29](#)
- [134] T. Herrmann und W. Nolting, Physica B in Druck, (1999). [4.4.3](#), [28](#)
- [135] I. Tamm, Phys. Z. Sowjet. **1**, 733 (1932). [5](#)
- [136] R. Schiller, W. Müller und W. Nolting, Eur. Phys. J. B **2**, 249 (1998). [5](#)
- [137] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling und B. P. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1992). [5](#), [A.1](#), [A.4](#)
- [138] A. Braun, B. Feldmann und M. Wuttig, J. Magn. Magn. Mat. **171**, 16 (1997). [6.1](#), [34](#)
- [139] P. Bruno, in *Magnetismus von Festkörpern und Grenzflächen*, (Forschungszentrum Jülich, 1993). [1](#), [32](#)
- [140] Y. Millev und J. Kirschner, Phys. Rev. B **54**, 4137 (1996). [32](#)
- [141] O. Hjortstam, K. Baberschke, J. M. Wills, B. Johansson und O. Eriksson, Phys. Rev. B **55**, 15026 (1997). [33](#), [34](#), [34](#)
- [142] A. B. Shick, D. L. Novikov und A. J. Freeman, Phys. Rev. B **56**, 14259 (1997). [33](#), [34](#)
- [143] C. Uiberacker, J. Zabloudil, P. Weinberger, L. Szunyogh und C. Sommers, Phys. Rev. Lett. **82**, 1289 (1999). [33](#), [34](#), [34](#), [34](#)
- [144] H. Fritzsche, J. Kohlhepp, H. J. Elmers und U. Gradmann, Phys. Rev. B **49**, 15665 (1994). [33](#)
- [145] D. E. Fowler und J. V. Barth, Phys. Rev. B **53**, 5563 (1996). [33](#)
- [146] M.-T. Lin, J. Shen, W. Kuch, H. Jenniches, M. Klaua, C. M. Schneider und J. Kirschner, Phys. Rev. B **55**, 5886 (1997). [33](#)
- [147] H. J. G. Draaisma und W. J. M. de Jonge, J. Appl. Phys. **64**, 3610 (1988). [34](#), [6.2](#), [6.3](#)
- [148] H. Takayama, K.-P. Bohnen und P. Fulde, Phys. Rev. B **14**, 2282 (1976). [34](#)
- [149] P. Bruno, Phys. Rev. B **39**, 865 (1989). [34](#)
- [150] M. Cinal, D. M. Edwards und J. Mathon, Phys. Rev. B **50**, 3754 (1994). [34](#)

- [151] T. H. Moos, W. Hübner und K. H. Bennemann, *Solid State Commun.* **98**, 639 (1996); A. Lessard, T. H. Moos und W. Hübner, *Phys. Rev. B* **56**, 2594 (1997). [34](#)
- [152] Ding sheng Wang, Ruqian Wu und A. J. Freemann, *Phys. Rev. B* **47**, 14932 (1993). [34](#)
- [153] G. H. O. Daalderop, P. J. Kelly und M. F. H. Schuurmans, *Phys. Rev. B* **50**, 9989 (1994). [34](#)
- [154] H. B. Callen und E. Callen, *J. Phys. Chem. Solids* **27**, 1271 (1966). [34](#)
- [155] L. M. Levinson, M. Luban und S. Shtrikman, *Phys. Rev.* **187**, 715 (1969). [34](#)
- [156] D. Pescia und V. L. Pokrovsky, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2599 (1990). [34](#)
- [157] A. Moschel und K. D. Usadel, *Phys. Rev. B* **51**, 16111 (1995); A. Moschel und K. D. Usadel, *J. Magn. Magn. Mat.* **140-144**, 649 (1995). [34](#), [34](#)
- [158] P. J. Jensen und K. H. Bennemann, *Phys. Rev. B* **42**, 849 (1990). [34](#), [6.2](#)
- [159] P. J. Jensen und K. H. Bennemann, *Solid State Commun.* **100**, 585 (1996). [34](#), [34](#)
- [160] P. J. Jensen und K. H. Bennemann, in *Magnetism an electronic correlations in local-moment systems: Rare-earth elements and compounds*, (World Scientific, Singapore, 1998). [34](#), [34](#), [34](#), [6.3](#)
- [161] A. Ecker, P. Fröbrich, P. J. Jensen und P. J. Kuntz, *J. Phys.: Condens. Matter* **1557** (1999). [34](#)
- [162] H. Haug, *Statistische Physik*, (Vieweg Verlag, Braunschweig, 1997). [6.3](#)

# Lebenslauf

**Name:** Tomas Herrmann

**Geburtsdatum:** 22.03.1969

**Geburtsort:** Oak Ridge

**Nationalität:** Deutsch

## **Ausbildung:**

- seit 05/1996 Doktorand an der Humboldt-Universität zu Berlin  
Betreuer: Prof. Dr. W. Nolting  
Mitglied des Sonderforschungsbereiches 290, „*Metallische dünne Filme: Struktur, Magnetismus und elektronische Eigenschaften*“
- 11/1994 – 03/1996 Diplomarbeit an der Humboldt-Universität zu Berlin  
Titel der Arbeit: „*Korrelationseffekte in der elektronischen Struktur eines Modell-Bandmagneten*“  
Betreuer: Prof. Dr. W. Nolting
- 10/1993 – 03/1996 Studium der Physik an der Humboldt-Universität zu Berlin
- 08/1992 – 03/1993 Auslandsstudium an der University of Reading, England
- 10/1990 – 09/1993 Studium der Physik an der Universität Regensburg
- 1979 – 1988 Maximiliansgymnasium, München

## **Nebentätigkeiten während des Studiums:**

- 1998 Mitarbeit am Projekt „*Verbesserung des Leitungs- und Entscheidungssystems*“ (LESSY, von der Volkswagenstiftung gefördertes Projekt) an der Humboldt-Universität zu Berlin in der „*AG Studien- und Prüfungsordnungen*“
- 1994 – 1996 Übungsleiter an der Humboldt-Universität zu Berlin
- 1994 Studentische Hilfskraft am Hahn-Meitner-Institut, Berlin
- 1993 – 1995 Mitarbeit in der Fachschaft Physik  
Studentischer Vertreter in der Kommission Studium und Lehre



# Publikationen

- T. Herrmann und W. Nolting, J. Phys.: Condens. Matter **11** 89, (1999). *Ferromagnetism and the temperature-dependent electronic structure in thin Hubbard-Films.*
- T. Herrmann und W. Nolting, Physika B **259-261** 920, (1999), *Ferromagnetism in thin itinerant-electron films.*
- T. Herrmann, M. Potthoff und W. Nolting, Phys. Rev. B **58** 831, (1998), *Ferromagnetism und a temperature-driven reorientation transition in thin itinerant-electron films.*
- M. Potthoff, T. Herrmann, T. Wegner und W. Nolting, phys. stat. sol. (b) **210** 199, (1998), *The moment sum rule und its consequences for ferromagnetism in the Hubbard model.*
- M. Potthoff, T. Herrmann und W. Nolting, Eur. Phys. J. B **4** 485, (1998), *Optimization of alloy-analogy-based approaches to the infinite-dimensional Hubbard model.*
- W. Nolting und T. Herrmann, *Condensed Matter Theories Vol. 13*, (Nova Science Publ., Commack, 1998), Seite 169, *Ferromagnetism and electronic correlations.*
- T. Herrmann und W. Nolting, Solid State Commun. **103** 351, (1997), *Ferromagnetism in the Hubbard model: Influence of the lattice structure.*
- T. Herrmann und W. Nolting, J. Magn. Magn. Mat. **170** 253, (1997), *Magnetism in the single-band Hubbard model.*
- T. Herrmann und W. Nolting, Phys. Rev. B **53**, 10579 (1996), *Influence of quasiparticle damping on magnetic stability.*

# Vorträge

- Workshop on the Electronic Structure of Magnets, FU-Berlin, 01.02.1999, *Ferromagnetismus und temperaturabhängige elektronische Struktur in dünnen Hubbard-Filmen.*
- Arbeitsgruppe Prof. Dr. K. Baberschke, FU-Berlin, 27.04.1998, *Ferromagnetismus und der temperaturgetriebene Reorientierungsübergang in dünnen metallischen Filmen.*
- Arbeitsgruppe Prof. Dr. J. Keller, Regensburg, 12.02.1997, *Ferromagnetismus im Hubbard-Modell: Abhängigkeit von der Gitterstruktur.*
- Frühjahrstagung der DPG in Regensburg, Kurzvortrag, 25.03.96, *Quasiteilchendämpfung und magnetische Stabilität.*



# Danksagung

An dieser Stelle möchte ich all denen herzlich danken, die mich bei der Anfertigung dieser Arbeit auf die eine oder andere Weise unterstützt haben.  
Mein besonderer Dank gilt

Prof. Dr. W. Nolting, der in vielen anregenden Diskussionen und durch eine intensive fachliche Betreuung sehr zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen hat,

Dr. Michael Potthoff für die enge, konstruktive Zusammenarbeit auf dem Gebiet des Hubbard-Modells und seine ständige Bereitschaft zu fachlichen Diskussionen aller Art,

unserer Sekretärin Frau M. Götsch für ihre nette Art, ihre ständige Hilfsbereitschaft und die süßen Aufmunterungen zwischendurch,

Wolf Müller und Sören Rex für ihren unermüdlichen Einsatz bei anfallenden Softwareproblemen sowie für das neue 10er Release,

und natürlich der gesamten Arbeitsgruppe Festkörpertheorie – allen voran meinen Mitstreitern während der letzten Jahre: Robert Metzke, Dietrich Meyer, Wolf Müller, Carlos Santos, Roland Schiller und Thorsten Wegner – für die äußerst angenehme Arbeitsatmosphäre und zahlreiche interessante Diskussionen. Robert Metzke danke ich für seine Unterstützung beim Korrekturlesen. Der beinahe tägliche Gang zum Franzosen in wechselnden Besetzungen hat sich als eine unersetzliche Auflockerung erwiesen.



# Selbständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, die vorliegende Arbeit selbständig und ohne unerlaubte Hilfe angefertigt zu haben. Die benutzten Hilfsmittel habe ich vollständig angegeben.

