# Korrelationen in hohen Raumdimensionen

## Beiträge zur
## Störungstheorie des Andersongitters
## und zur
## Theorie der Self-avoiding Walks

Dissertation

zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften
der Abteilung Physik
der Universität Dortmund

vorgelegt von

Timo Leuders

Juli 1998

| | |
|---|---|
| Tag der mündlichen Prüfung | 16. Oktober 1998 |
| Vorsitzender und Prodekan | Prof. Dr. E. Reya |
| 1. Berichterstatter | Prof. Dr. H. Keiter |
| 2. Berichterstatter | Prof. Dr. B. Gerlach |
| Vertreterin der promovierten wissenschaftlichen Mitarbeiter | Dr. R. Valenti |

# Inhaltsverzeichnis

# Vorwort

Die Methode, physikalische Modelle im Grenzfall unendlicher Raumdimensionen zu betrachten, war in der theoretischen Physik schon immer von erheblicher heuristischer und praktischer Bedeutung. In den letzten Jahren gewann sie zunehmendes Interesse in der Theorie hochkorrelierter Kristallelektronen, nachdem sich herausstellte, daß die resultierenden spezifischen Vereinfachungen für Hubbardartige Systeme einen neuen Zugang zu solchen Modellen eröffnen.

Die mit unendlichdimensionalen Modellen gewonnenen Ergebnisse sind aber bezüglich ihrer Relevanz für endlichdimensionale Systeme mit Vorbehalt zu betrachten. Ein Beispiel hierfür sind Isingartige Spinsysteme, die im Grenzfall unendlicher Dimension exakt lösbar werden. Da ihre Dimension durch die effektive Zahl wechselwirkender Nachbarn charakterisiert ist, bedeutet dies aber, daß mit dem unendlichdimensionalen System im Prinzip ein Mean-Field-Modell vorliegt – wesentliche Korrelationen, die die Lösung in endlichen Dimensionen erschweren, lassen sich hier durch ein mittleres, selbstkonsistent zu bestimmendes Feld ersetzen.

Unter dieser Perspektive muß auch die hier genauer zu untersuchende Behandlung des Andersongitters in Form eines effektiven Einstörstellenproblems gesehen werden – die inzwischen verbreitete Bezeichnung als *Dynamische Mean-Field-Theorie* trägt diesen Einwänden bereits Rechnung. Zwar weiß man inzwischen, daß dieser Zugang in unendlichen Dimensionen exakt ist, aber eine nähere Analyse der hierbei vernachlässigten (bzw. artifiziell hinzutretenden) räumlichen Korrelationen ist bisher noch nicht durchgeführt worden.

Das Ziel dieser Arbeit ist daher eine Bewertung der Behandlung räumlicher Korrelationen in der Näherung unendlicher Raumdimensionen. Das zugrundegelegte elektronische Modell ist hier ausschließlich eine Standardvariante des periodischen Andersonmodells. Daneben wird aber auch erstmals eine ertragreiche Analogie zu dem immer noch aktuellen Gebiet der Self-avoiding Walks formuliert. Diese gestattet, den Gitteranteil des Andersonmodells und das asymptotische Verhalten des Self-avoiding

Walks auf der Basis eines gemeinsamen Formalismus zu behandeln.

Die sich hieraus ergebenden allgemeinen Erkenntnisse über die Charakteristika von räumlichen Korrelationen in $d = \infty$ führen zusammen mit den speziellen Ergebnissen der numerischen Behandlung des Andersongitters zu einer kritischen Bewertung der $d = \infty$-Näherung.

Allein die große Vielfalt der verschiedenen störungstheoretischen Varianten, die für das Andersonmodell entwickelt wurden, setzt der Ausführlichkeit der hier angestrebten Darstellung allerdings Grenzen. Es wird daher auch nur ein einziger Zugang, nämlich die XNCA, die für die Darstellung und Klassifikation der räumlichen Korrelationen besonders geeignet erscheint, ausführlicher geschildert. Verwandte Methoden werden nur soweit angerissen, als sie für die hier stattfindende Diskussion unendlicher Raumdimension relevant sind. Für Details sei auf die an entsprechender Stelle angegebene Originalliteratur verwiesen.

Eine umfangreichere Darstellung sollen aber solche Methoden erfahren, die in dieser Arbeit speziell entwickelt wurden, um eine dimensionale Analyse der schwerpunktmäßig untersuchten räumlichen Korrelationen in der sogenannten Excluded-Volume-Gittersumme durchzuführen. Insbesondere der an dieser Stelle stattfindende Brückenschlag zu der Theorie der Self-avoiding Walks erfordert einen kurzen Überblick über dieses Gebiet.

Um die logische Entwicklung der Gedanken transparent zu machen, wurde eine integrierte Darstellung einer thematischen Zweiteilung vorgezogen. Demnach ergibt sich eine Gliederung gemäß der Folge:

- **Motivation** der Untersuchung aus der Hybridisierungs-Störungstheorie für das Andersongitter (Kapitel 2),
- **Mathematische Darstellung** über Excluded-Volume-Gittersummen in verallgemeinerter Form und
- **Lösung** durch dimensionale Analyse unter Verwendung der Lace-Entwicklung (Kapitel 3),
- **Anwendung** auf den Self-avoiding Loop (Kapitel 4) und das Andersongitter in hohen Dimensionen (Kapitel 5 und 6),
- **Bewertung** der Qualität der Näherung unendlicher Dimensionen im Hinblick auf die Behandlung räumlicher Korrelationen (Kapitel 7).

Einige eher technisch-mathematische Berechnungen, deren Ergebnisse zwar benötigt werden, die aber den Argumentationsgang zu sehr unterbrächen, sind in den Anhang verschoben. Zudem werden ergänzende Bemerkungen oder Erläuterungen mitunter in Fußnoten bzw. eingerückten Abschnitten mit geringerer Schriftgröße abgehandelt.

Zur besseren Lesbarkeit ist den einzelnen Kapiteln eine kurze Erläuterung der wesentlichen Voraussetzungen und Ziele des jeweiligen Abschnittes vorangestellt. Hierdurch kann es zu einigen Doppelungen kommen, die es jedoch dem Leser, der nur an bestimmten Aspekten des Themas interessiert ist, erleichtern, entsprechende Abschnitte selektiv zu lesen.

Teile dieser Arbeit wurden bereits veröffentlicht:

- H. Keiter, T.Leuders, Ch. Melsheimer, P. Schönenberg (1995)
  Comparison of various approaches to the Anderson lattice.
  *Physica B* **206 & 207**: 168
- H. Keiter, T. Leuders, P. Schönenberg (1995).
  New Approaches to the Anderson Lattice System.
  *Journal of low temperature physics* **99**: 607-609
- H. Keiter, U. Kleineidam, T. Leuders (1997).
  Magnetotransport for the Anderson impurity and lattice.
  *Physica B* **230-232**: 431-433

# Kapitel 1

# Einleitung

## 1.1 Einordnung des Themas

Ein typisches Vielteilchensystem (wie z.B. das elektronische System eines Festkörpers oder ein Polymer in Lösung) besitzt eine sehr hohe Zahl von Freiheitsgraden und führt in der Theorie auf nichttriviale, hochdimensionale Probleme. Es werden daher zu Beginn einer theoretischen Behandlung zumeist stark vereinfachte Modellsysteme betrachtet, von denen man annehmen kann, daß sie die wesentlichen Ingredienzien des realen Systems besitzen.

Ein geradezu typisches Beispiel für solche Systeme ist das *Isingmodell*, das seit seiner Einführung als fundamentales System der statistischen Physik gilt und immer wieder als Ausgangspunkt neuer theoretischer Ansätze fungiert. Seine exakte Lösung in zwei Dimensionen durch ONSAGER gilt als Meilenstein der statistischen Physik, und wenn auch seitdem die unterschiedlichsten Methoden für das Isingmodell entwickelt wurden, so ist eine allgemeine analytische Lösung, etwa in drei Dimensionen, nicht in Sicht.

Zwei weitere Systeme, die zudem im Mittelpunkt der vorligenden Arbeit stehen sollen, besitzen in dieser Hinsicht einen ähnlich paradigmatischen Charakter:

- Zur Untersuchung des Wechselspiels von lokalisierender Coulombwechselwirkung und Bildung delokalisierter Elektronenbänder in metallischen Verbindungen von Übergangsmetallen, Seltenen Erden und Aktiniden dienen sowohl das Hubbardmodell als auch das (periodische) **Andersonmodell**. So einfach diese Modelle auch erscheinen mögen, es zeigt sich bislang keine umfassende Lösung am Horizont.

- Ein auf den ersten Blick ganz anders geartetes Problem ist der sogenannte **Self-avoiding Walk**. Dieser läßt sich als Modell für Polymere auffassen, bei dem die vielfältigen Wechselwirkungen eines Polymers mit sich selbst auf das Verbot der Selbstüberkreuzung reduziert werden. Und obwohl ein solcher Self-avoiding Walk auf einem (hyper)kubischen Gitter gewissermaßen das primitivste denkbare System mit einem solchen *Excluded-Volume-Effekt* darstellt, gibt es für den dreidimensionalen Fall bisher keine exakten Resultate.[1]

Aufgabe einer mikroskopischen Theorie für solche Systeme ist es, relevante makroskopische Eigenschaften aus den mikroskopischen Modellparametern abzuleiten, oder zumindest angemessene Näherungen für dieses Vorhaben zu formulieren. Dabei erweist sich der Schritt von einem wechselwirkungsfreien System, bei dem die beteiligten Teilchen (bzw. Freiheitsgrade) voneinander unabhängig behandelbar sind, zu einem System mit echter Wechselwirkung als beträchtlich. (Die wechselwirkungsfreien Pendants der oben aufgeführten Systeme erweisen sich tatsächlich als trivial lösbar.) Dennoch kann die Lösung eines wechselwirkungsfreien Systems ein sinnvoller Ausgangspunkt für eine gute physikalische Beschreibung sein, nämlich dann, wenn das „Einschalten“ der Wechselwirkung ein System erzeugt, das gleichsam stetig aus dem ungestörten System hervorgeht. Auf der formalen Ebene führt diese Sichtweise zu dem klassischen Verfahren einer Störungstheorie, bei der alle interessierenden physikalischen Größen in eine Potenzreihe nach einem die Wechselwirkung charakterisierenden Parameter entwickelt werden. Erfahrungsgemäß führen aber solche störungstheoretischen Formulierungen nicht zwangsläufig zum Erfolg, sondern

[1] Diese Feststellung wird durch die folgenden Bemerkungen, die sinngemäß auch auf die anderen genannten Modelle übertragbar sind, unterstrichen: „Despite its simple definition, the self-avoiding walk leads to mathematical problems which are simple enough to state to the mathematically uninitiated, but which are very hard to solve and mainly still open.“ (Slade)
„The self-avoidance criterion raises complex problems beside which those of ordinary walks seem quite insipid, difficult and fascinating as the latter really are in the absence of such comparison.“ (Hammersley und Morton)

können eine Vielfalt von Problemen bergen:

– In der Umgebung eines kritischen Punktes, an dem, beschrieben durch einen Ordnungsparameter, eine Symmetrie gebrochen wird, versagen störungstheoretisch gewonnene Ausdrücke und liefern keine Aussagen über das kritische Verhalten.

– Oft sind Störungsreihen nichtanalytisch in der Wechselwirkung und führen auf lediglich asymptotisch konvergente Reihen.

– Einzelne Summanden der Störungsreihe können divergent sein, was mitunter durch angemessene Regularisierung und Renormierung, z.B. durch unendliche Teilresummation behoben werden kann.

Für die beiden Modellsysteme, die im Zentrum der Arbeit stehen, nämlich das Andersonmodell und den Self-avoiding Walk, sind alle diese Phänomene von Bedeutung. (Die konkrete Motivation für die gemeinsame Behandlung der beiden Systeme wird erst später erläutert werden.)

- In Parameterbereichen des **Andersonmodells**, wie sie für reale Systeme relevant sind, ist die Coulomb-Wechselwirkung gewöhnlich größer als alle anderen Energieskalen und das wechselwirkungsfreie System ist kein erfolgversprechender Ausgangspunkt für eine (näherungsweise) Lösung. Eine Beschreibung, die einem solchen hochkorrelierten Elektronensystem gerecht werden will, muß daher diese Korrelationen soweit, wie es notwendig (und möglich) ist, von vornherein mitberücksichtigen.

- Ganz ähnlich stellt sich die Situation auch für den **Self-avoiding Walk** dar – auch wenn dieser auf den ersten Blick völlig anders geartet erscheint.[2] Im wechselwirkungsfreien Fall liegt ein sogenannter Random Walk vor. Dieser ist jedoch (in drei Dimensionen) bezüglich seiner kritischen Exponenten in einer anderen Universalitätsklasse als jeder wechselwirkende Walk, besitzt also ein völlig anderes kritisches Verhalten. Die formale Schwierigkeit bei wechselwirkenden Walks besteht darin, daß für eine exakte Lösung alle Mehrfachbesuche desselben Ortes (z.B. auf einem gegebenen Gitter) bestimmt werden müssen. Dieses sogenannte

[2] Tatsächlich läßt er sich als $N \to 0$ Grenzfall des $N$-Vektormodells (de Gennes (1972), siehe z.B. in Madras und Slade (1993)) verstehen und ist damit eng verwandt mit dem Ising- und Heisenbergmodell.

Excluded-Volume-Problem taucht bei diagrammatischen Beschreibungen von Gittersystemen jeder Art wieder auf und ist im allgemeinen nicht geschlossen lösbar.

Unter den vielfältigen Bemühungen, für solche hochkorrelierten Systeme gültige Beschreibungen zu entwickeln, finden sich immer wieder Ansätze, die eine zunächst nicht auf der Hand liegende, mitunter diskontinuierliche Größe identifizieren, die sich als kleiner Entwicklungsparameter einer *alternativen Störungsentwicklung* nutzen läßt. Zudem führt die Existenz eines solchen Parameters auf einen neuen, nichttrivialen Grenzfall des Modells in Form der nullten Näherung der entstehenden Entwicklung. Man bezeichnet daher eine durch Abbruch der Entwicklungsreihe erzeugte Näherung auch als *kontrollierte Näherung.* Diese Bemerkungen seien für die beiden hier besonders interessierenden Modellsysteme näher erläutert:

- Im Falle des **Andersonmodells** kann z.B. der *inverse Entartungsgrad* $\frac{1}{N}$ einer Störstelle als ein solcher alternativer Entwicklungsparameter fungieren (siehe z.B. den Reviewartikel von Bickers (1987)). In diesem Lichte läßt sich auch die in dieser Arbeit verwendete NCA („Non-crossing Approximation“) betrachten.

  Eine früher Vorschlag zur Erweiterung der bekannten Methoden für das Einstörstellen-Andersonmodell auf sein periodisches Pendant stammt von Kuramoto (1985). In der von ihm als XNCA bezeichneten Näherung führt er einen neuen Parameter $\frac{1}{z_n}$ ein, wobei er mit $z_n$ die „effektive Zahl von Nachbarn, die ein Bandelektron sieht“ bezeichnet. Diese Definition weist aber, wie noch zu erläutern sein wird, einige Unschlüssigkeiten auf.

  Erst im Lichte einer neuen Sichtweise kristallisiert sich der wahre Charakter dieses neuen Parameters heraus. Entscheidende mathematische Vereinfachungen für korrelierte Fermionen im Gitter ergeben sich nämlich, wenn man die Raumdimension $d$ des Gitters formal als unendlich annimmt. Der für die Klassifikation räumlicher Korrelationen relevante neue Kontrollparameter stellt sich somit als die *inverse Raumdimension* $\frac{1}{d}$ heraus und liefert z.B. für das Falicov-Kimball-Modell den exakt lösbaren Grenzfall $d=\infty$.

- Auch für den **Self-avoiding Walk** lassen sich solche alternativen Entwicklungen ausmachen. Bereits mit der Definition des Modells des Self-avoiding Walks im Rahmen der Modellierung der Physik von Polymeren durch Flory (1949) konzentrierte sich das Interesse auf kritische Parameter, wie z.B. den Exponenten $\nu$, der beschreibt, wie der mittlere Radius eines Polymers mit seiner Länge skaliert. Schon früh wurde deutlich, daß hierbei die Dimension $d=4$ die Rolle einer oberen kritischen Dimension spielt, d.h. daß oberhalb dieser Dimension der Self-avoiding Walk sich weitgehend wie sein wechselwirkungsfreies Pendant (Mean-Field-Modell) verhält. Dies legte nahe, den Parameter $\epsilon = 4 - d$ als Entwicklungsparameter zu betrachten und die entstehenden Ausdrücke z.B. mit $\epsilon = 1$ als Näherung für $d = 3$ auszuwerten. Erst in jüngster Zeit jedoch konnte das Mean-Field-Verhalten des Self-avoiding Walks in $d > 4$ streng bewiesen werden (Hara und Slade 1992) – dies im übrigen mit Hilfe der sogenannten Lace-Entwicklung, von der noch die Rede sein wird.

Aufgrund dieser Ausführungen könnte man vermuten, daß der bereits erwähnte Grenzfall $d\to\infty$ für den Self-avoiding Walk, der ja bereits oberhalb seiner kritischen Dimension trivial wird, nicht von Bedeutung ist. In dieser Arbeit wird jedoch eine *Variante* des Self-avoiding Walks, nämlich der *geschlossene Self-avoiding Walk* in einem *echt unendlichdimensionalen* hyperkubischen Gitter eine zentrale Rolle spielen. Im Verlauf der Argumentation wird sich herausstellen, daß für diesen die inverse Raumdimension $\frac{1}{d}$ ein angemessener Entwicklungsparameter ist, und der Übergang $d\to\infty$ zu einem nichttrivialen Grenzfall führt, welcher über eine Mean-Field-Näherung durch den entsprechenden freien Random Walk hinausgeht.

## 1.2 Unendliche Raumdimensionen

In den allgemeinen Betrachtungen des vorigen Abschnitts ist bereits die besondere Rolle des Grenzfalls unendlicher Raumdimension angeklungen. Im folgenden soll eine kurze Übersicht über die Bedeutung dieses Grenzfalls für die hier zu untersuchenden Modellsysteme gegeben werden.

Unendliche Raumdimensionen spielen bereits in vielen Modellsystemen der statistischen Physik eine Rolle als interessanter Grenzfall, so z.B. in bestimmten Spinsystemen, deren Mean-Field-Näherung in $d=\infty$ exakt wird. Im Laufe des letzten Jahrzehnts ist zudem ein reges Interesse an unendlichdimensionalen elektronischen Systemen entstanden, seit Metzner und Vollhardt (1989) darauf hinwiesen, daß $d = \infty$ in gewissem Sinne eine bessere Näherung für das zwei- bzw. dreidimensionale Hubbardmodell darstellt als $d = 1$. In der Folge wurden die verschiedenen Vereinfachungen, die sich für viele unendlichdimensionale Systeme ergeben, näher beschrieben (z.B. Müller-Hartmann (1989)). Deren wesentlichste ist die Tatsache, daß die Selbstenergie lokal wird und nur noch ein Funktional der Greenfunktion des Gitterplatzes ist. Brandt und Mielsch (1989) erkannten, daß sich mit dieser *lokalen Näherung* das Falicov-Kimball-Modell auf ein atomares Problem mit zeitabhängigem Hilfsfeld abbilden läßt.

Noch bevor die zentrale Rolle der Raumdimension bei der Behandlung von Gittermodellen zutage trat, gab Kuramoto (1985) mit der XNCA bereits eine Methode an, wie das Andersongitter sich auf ein effektives Single-Impurity-Andersonmodell abbilden läßt. Hierbei gab er bereits den vollständigen Ausdruck für die Bestimmung des effektiven Bandes an, ohne diesen allerdings konsequent für den Grenzfall $d = \infty$ zu begründen. Vorangegangene Bemühungen, das Andersongitter durch ein effektives Einstörstellenproblem zu nähern, wie die der LNCA („Lattice-NCA"), werden durch die XNCA („eXtended-NCA") erweitert. Dabei besteht die besondere Leistung darin, die hierzu notwendigen Näherungen durch einen kleinen Parameter zu kontrollieren. Daß diese Behandlung des Gitters in unendlichen Dimensionen exakt ist, wurde allerdings erst im Rahmen der späteren, allgemeinen Diskussion unendlicher Raumdimensionen klar. Eine alternative Ableitung im Rahmen der Hilfsfeldformulierung geben Hülsenbeck und Qin (1994). Diese erweist sich als äquivalent zu den Bestimmungsgleichungen der XNCA (s. auch Abschnitt 2.4.3).

Die allgemeine Methode, ein Gittermodell in unendlichen Dimensionen exakt auf ein effektives Einstörstellenproblem abzubilden, wird inzwischen von vielen Autoren angewandt und existiert in unterschiedlichen Formulierungen. (Einen Überblick hierüber geben Georges, Kotliar, Krauth und Rozenberg (1996).) Unter den unterschiedlichen Bezeichnungen für diese Methode finden sich z.B. „local impurity self-consistent approximation" (LISA) oder „dynamical mean-field theory". Mit letzterer soll angedeutet werden, daß die räumlichen Korrelationen in $d = \infty$ „eingefroren" und durch ein selbstkonsistentes „gemitteltes Feld", nämlich das effektive Leitungsband, dargestellt werden, während die übrigen („dynamischen") Korrelationen weiterhin erhalten bleiben.

Die vorliegende Arbeit greift zur Behandlung des Andersongitters auf die ursprüngliche Formulierung der XNCA zurück. Diese wird hier jedoch konsequent als eine Theorie für hohe Raumdimensionen diskutiert (Abschnitt 2.4.1). Die Korrelationen des Andersongitters werden systematisch nach lokalen Korrelationen und nach räumlichen Korrelationen unterschieden. Erstere werden, wie beim Einstörstellen-Andersonmodell bereits etabliert, näherungweise mit der NCA behandelt, also über den Paramter $\frac{1}{N}$ kontrolliert. Darüberhinaus ergibt sich, daß die räumlichen Korrelationen, also solche, die beim Gitter gegenüber dem Einstörstellenmodell hinzutreten, alle über den Parameter $\frac{1}{d}$ kontrolliert werden können. Indem zudem alle Beiträge nullter Ordnung in $\frac{1}{d}$ aufsummiert werden, kann gezeigt werden, daß die XNCA die räumlichen Korrelationen in $d=\infty$ *exakt* behandelt.

Ein bisher ungelöstes Problem vieler effektiver Einstörstellentheorien für das Andersongitter ist jedoch das Verhalten der numerischen Lösungen im Temperaturbereich unterhalb der Kondo-Temperatur. Solange die Temperatur nicht zu weit unter die Kondotemperatur des Modells absinkt, beobachtet man das charakteristische Verhalten des korrespondierenden Einstörstellenmodells. Bei weiter abnehmender Temperatur machen sich jedoch sogenannte Kohärenzeffekte, d.h. Beiträge des Gitteranteils des effektiven Einstörstellenproblems, bemerkbar, die die numerische Lösung bald zusammenbrechen lassen. Es stellt sich dabei heraus, daß diese Pathologien charakteristisch für gerade solche Rechnungen sind, die versuchen, die räumlichen Korrelationen in unendlichen Dimensionen exakt zu berücksichtigen (Kapitel 6).

Diese paradoxe Situation, daß nämlich die (im Vergleich zu früheren Ansätzen, wie z.B. der LNCA) vermeintlich bessere Näherung zu pathologischem Verhalten führt, gilt es im Verlaufe dieser Arbeit näher zu untersuchen.

Auf Seiten der numerischen Lösung werden hierzu mehrere Wege beschritten:

1. Parallel zu einer numerischen Auswertung der XNCA werden auch Näherungen, die nicht $d=\infty$-exakt sind, herangezogen. Neben der LNCA, deren Konzept sich in Abschnitt 2.4.2 kurz erläutert findet, werden auch Modifikationen bzw. Mischformen der beiden Gitternäherungen numerisch ausgewertet (Abschnitt 6.2.2).

   Die hierzu verwendete Darstellung der verschiedenen Theorien auf der Grundlage einer gemeinsamen Formulierung wurde bereits von Keiter, Leuders, Melsheimer und Schönenberg (1995) vorgestellt.

2. Im Rahmen der allgemeinen Untersuchung der räumlichen Korrelationen in Kapitel 3 wird sich die Möglichkeit ergeben, zu der $d=\infty$-Näherung systematisch $\frac{1}{d}$-Korrekturen zu berechnen. Diese werden in Abschnitt 6.2.3 ebenfalls numerisch ausgewertet und es wird untersucht, inwiefern sie zu einer Verbesserung der numerischen Situation führen.

   Der hierzu verwendete Ausdruck für die berücksichtigten $\frac{1}{d}$-Korrekturen wurde bereits von Keiter, Leuders und Kleineidam (1997) angegeben. In der vorliegenden Arbeit wird er erstmals auf der Grundlage einer allgemeinen Behandlung von Gittersummen, wie sie sich auch für die Darstellung von Self-avoiding Walks eignen, streng abgeleitet (Kapitel 3 und 5).

3. Da die Ursache für die numerischen Pathologien in der spezifisch *selbstkonsistenten* Form der Bestimmungsgleichung für die räumlichen Korrelationen liegt, soll diese auch unabhängig vom lokalen Single-Impurity-Problem untersucht werden (Abschnitt 6.4). Dazu ist es gelungen, ein Modellsystem zu finden, das die zu den genannten Problemen führenden Strukturen korrekt wiedergibt, aber dennoch analytisch lösbar ist. Auf diese Art und Weise kann erstmals die konkrete mathematische Natur des Lösungszusammenbruchs analysiert werden.

Neben diesen numerischen Untersuchungen enthält die Arbeit aber auch einen beträchtlichen Teil algebraischer und kombinatorischer Überlegungen. Deren Bedeutung erwächst aus dem Zusammenhang zwischen den räumlichen Korrelationen im Andersongitter und den Self-avoiding Walks, aus dem sich einige wesentliche Erkenntnisse über die Qualität einer $d\!=\!\infty$-Näherung ergeben werden.

## 1.3 Self-avoiding Walks für das Andersongitter

Der Self-avoiding Walk findet seine Hauptanwendung als Modellsystem für die Beschreibung des Excluded-Volume-Effektes von Polymeren. (Einige Anmerkungen hierzu finden sich in Abschnitt 4.1.) Daneben zeigte de Gennes (1972) eine Verbindung zur Theorie von Spinsystemen auf, indem er bewies, daß sich der Self-avoiding Walk als $N \to 0$ Grenzfall des $N$-Vektormodells auffassen läßt und so eine nahe Verwandschaft mit dem Isingmodell oder dem Heisenbergmodell aufweist.

Mit dieser Arbeit wird sich nun eine neue Anwendung des (angemessen zu verallgemeinernden) Self-avoiding Walks, nämlich die Theorie des $d\!=\!\infty$-Andersongitters ergeben. Bei der störungstheoretischen Behandlung des Andersongitters werden die Korrelationen in Form von Diagrammen repräsentiert. Auf diese Weise kann man lokale und räumliche Korrelationen unterscheiden und klassifizieren. Das Resultat der Diskussion des räumlichen Anteils in hohen Dimensionen (Abschnitt 3.3) mündet in einen Ausdruck, der Streuprozesse in Form eines zurückkehrenden Weges durch das Gitter beschreibt.

Dieser wird kurz als „Gittersumme“ bezeichnet und zeichnet sich dadurch aus, daß alle beteiligten Gitterplätze verschieden sein müssen – was unter dem Begriff *Excluded-Volume-Effekt* zusammengefaßt wird. Die hierin begründete Analogie zum Self-avoiding Walk wird in dieser Arbeit zu einer gemeinsamen Theorie für *allgemeine Excluded-Volume-Gittersummen in hohen Dimensionen* ausgebaut.

Allein unter der Annahme einer bestimmten räumlichen Skalierung der elementaren Sprungprozesse werden in Kapitel 3 *exakte Ausdrücke für die Gittersumme in* $d{=}\infty$ *und die vollständigen* $\frac{1}{d}$*-Korrekturen* angegeben. Hierzu wird auf eine sehr mächtige, moderne Methode zur Behandlung von Excluded-Volume-Korrelationen bei klassischen Self-avoiding Walks, die *Lace-Entwicklung*, zurückgegriffen. (Für eine übersichtliche Darstellung des Werdegangs dieser Methode siehe MADRAS und SLADE (1993).) Sie muß dazu auf eine für diese Arbeit relevante Klasse verallgemeinerter Self-avoiding Walks erweitert werden und liefert dann eine sehr elegante diagrammatische Darstellung und Resummation der Gitterprozesse.

Die bisherige Anwendung der Lace-Entwicklung lieferte exakte Schranken für den klassichen Self-avoiding Walk, die schließlich zu dem ersten strengen Beweis für das Mean-Field-Verhalten des Self-avoiding Walks oberhalb von $d = 4$ führten (HARA und SLADE (1992)). In dieser Arbeit wird die Lace-Entwicklung erstmals in ihrer verallgemeinerten Form unter dem Aspekt unendlicher Raumdimensionen untersucht und mit dem Ziel einer $\frac{1}{d}$-Entwicklung der Gittersumme ausgewertet.

Mit den Ergebnissen dieser allgemeinen algebraischen Betrachtungen lassen sich nun sowohl die bereits oben erwähnten Ausdrücke für die räumlichen Korrelationen des **Andersongitters** in der effektiven Single-Site-Behandlung ableiten, als auch allgemeine Eigenschaften des **klassischen Self-avoiding Walks** untersuchen.

Auch wenn letzterer bereits seit den fünfziger Jahren von verschiedenster Seite betrachtet wurde (für eine Übersicht s. HUGHES (1995) oder SLADE (1987)), interessierte man sich bislang ausschließlich für seine Eigenschaften in endlichen Dimensionen $d$. Dies ist im Lichte seines bereits erwähnten Mean-Field-Verhaltens oberhalb von $d = 4$ und der Tatsache, daß er unter dem Aspekt eines Modellsystems für dreidimensionale Polymere gesehen wurde, verständlich.

Im Rahmen einer Untersuchung *echt unendlichdimensionaler* Systeme liefert diese Arbeit jedoch ein unerwartetes Ergebnis für den *geschlossenen Self-avoiding Walk*, der in diesem Grenzfall tatsächlich *nichttrivial* wird (Kapitel 4). Diese Feststellung ist jedoch nicht nur von Bedeutung für die Theorie des Self-avoiding Walks. Vielmehr soll in dieser Arbeit aufgezeigt werden, daß dies eine *unmittelbare Bedeutung für die*

*Qualität der $d=\infty$-Näherung des Andersongitters* hat. Der Self-avoiding Walk läßt sich nämlich als stark reduziertes Modellsystem auffassen, dessen simplifizierende Betrachtungsweise darin besteht, daß er die störungstheoretische Summation von Gitterprozessen zu einer reinen Abzählung solcher Prozesse abstrahiert. Auf diese Weise läßt sich eine Klassifikation der durch die Gittersumme beschriebenen räumlichen Korrelationen vornehmen und beurteilen, inwiefern ein unendlichdimensionales System den Fall endlicher Dimension angemessen beschreibt.

Bemerkung:

An dieser Stelle ist noch eine Bemerkung zu den in dieser Arbeit verwendeten Bezeichnungen in bezug auf die Raumdimension angebracht. An mehreren Stellen wird der Grenzwert für unendliche Raumdimension („$d=\infty$“ bzw. „$d\to\infty$“) durch Korrekturterme für sogenannte *„hohe Raumdimensionen“* ergänzt. Diese Bezeichnung soll immer so verstanden werden, daß alle interessierenden Größen (nach angemessener Skalierung) nach Potenzen der inversen Raumdimension $\frac{1}{d}$ zu entwickeln sind. Dabei ist wichtig, daß die formale Raumdimension $d$ immer größer als alle auftretenden Längenskalen ist. Betrachtet man z.B. Wege der Länge $n$, so kann immer $d \gg n$ angenommen werden. Das Landausymbol $\mathcal{O}(\frac{1}{d^n})$ bezeichnet Ausdrücke, die für $d\to\infty$ mit $\frac{1}{d^n}$ *oder schneller* verschwinden. Als „$\frac{1}{d}$-Korrekturen“ werden auch Terme höherer Ordnung in $\frac{1}{d}$ verstanden, wenn sie relativ zu den entsprechenden Ausdrücken für $d\to\infty$ von der Ordnung $\mathcal{O}(\frac{1}{d})$ sind, also z.B. eine $\mathcal{O}(\frac{1}{d^3})$-Korrektur zu einem $\mathcal{O}(\frac{1}{d^2})$-Ausdruck.

# Kapitel 2

# Störungstheorie für das periodische Andersonmodell

In der Einleitung wurden bereits die Probleme, die die theoretische Beschreibung von Schwerfermionsystemen durch ein periodisches Andersonmodell im Rahmen eines *effektiven Einstörstellenansatzes* aufwirft, angerissen. In diesem Kapitel sollen nun die wesentlichen theoretischen Methoden, die zu einem solchen effektiven Einstörstellenansatz führen, beschrieben werden.

Eine ausführliche Ableitung der verschiedenen Zugänge, die hierzu in den letzten Jahren entwickelt wurden, muß allerdings aus Platzgründen unterbleiben. Stattdessen konzentriert sich diese Arbeit auf die Darstellung der als XNCA bezeichneten Methode, da diese am deutlichsten eine geometrische Interpretation der zu untersuchenden Korrelationen im Gitter erlaubt. Die weiteren Methoden werden nur insoweit geschildert, als die wesentlichen Unterschiede zur XNCA herauszuarbeiten sind.

Zunächst ist es jedoch nötig, die zu beschreibenden Systeme kurz zu umreißen (Abschnitt 2.1) und die hier zugrundegelegte Form des periodischen Andersonmodells zu konkretisieren (Abschnitt 2.2). Da die verschiedenen Ansätze für das Andersongitter alle auf eine etablierte Störungstheorie für das Einstörstellen-Andersonmodell zurückgreifen, soll diese auch gleich im Anschluß (Abschnitt 2.3) in Form einer prägnanten Ableitung zusammengefaßt werden. Alle numerischen Rechnungen, deren Ergebnisse in Kapitel 6 vorgestellt werden, beruhen auf den hier abgeleiteten Ausdrücken.

## 2.1 Schwerfermionensysteme

Eine Klasse von Materialien, die hinsichtlich ihrer elektronischen Eigenschaften als hochkorrelierte Systeme angesehen werden müssen, sind bestimmte intermetallische Verbindungen *Seltener Erden* (z.B. $Ce$, $Yb$) und *Aktiniden* (z.B. $U$). Sie werden gekennzeichnet durch stark lokalisierte $4f$ bzw. $5f$-Schalen, in denen zwischen den Elektronen eine hohe Coulombabstoßung wirkt. Diese magnetischen Störstellen sind auch die Ursache des charakteristischen negativen Temperaturkoeffizienten des Widerstandes, der bereits seit den dreißiger Jahren an Übergangsmetallverbindungen bekannt war und erst durch Kondo (1964) eine theoretische Begründung erfuhr. Besitzt ein solches *Kondo-System* eine periodische Störstellenanordnung, so spricht man von einem *Kondo-Gitter*. Mit sinkender Temperatur gewinnen hierin die Korrelationen zwischen den konzentrierten Störstellen zunehmend an Bedeutung.

Unterhalb einer charakteristischen Übergangstemperatur, der sogenannten Kondotemperatur[1] $T_K$, die in der Größenordnung von einigen Kelvin liegt, verlieren die Kondosysteme die magnetischen Eigenschaften der Störstelle, wie z.B. die typische Curie-Weiss-Suszeptibilität. Dies wird mit der Bildung eines Singulett-Zustandes erklärt und geht einher mit dem Hervortreten einer schmalen Vielteilchenresonanz an der Fermikante des Quasiteilchenspektrums.

Die verschiedenen Materialien, die man als Kondogitter auffassen kann, zeigen bei tiefen Temperaturen ein sehr unterschiedliches Verhalten. In einigen Systemen, die man als „Schwere Fermionen" bezeichnet, findet man gegenüber normalen Metallen um mehrere Größenordnungen erhöhte Sommerfeldkoeffizienten der spezifischen Wärme (z.B. $Ce\,Al_3$: $\gamma \simeq 1620\,\mathrm{mJ/(mol\,K^2)}$) und entsprechend auch vergrößerte Pauli-Suszeptibilitäten. Dies wird mit dem Vorliegen einer Fermiflüssigkeit mit Quasiteilchen, welche eine stark vergrößerte effektive Masse ($m^*/m = 10^2 - 10^3$) besitzen, erklärt. Man findet aber auch antiferromagnetische Ordnung ($U\,Cd_{11}$, $T_N = 5K$) und Pauli-Paramagnetismus bishin zu tiefsten Temperaturen ($Ce\,Cu_6$). Als besonders interessant muß die Entdeckung von Supraleitung in Kondogittern gelten ($Ce\,Cu_2\,Si_2$: $T_c = 0.7K$, $U\,Be_{13}$: $T_c = 0.9K$), nicht zuletzt, weil die Existenz von magnetischen Störstellen Supraleitung eigentlich stark unterdrücken sollte. Die in diesen Systemen vorliegende Nähe von Antiferromagnetismus und Supraleitung läßt zudem die

[1] In Gittersystemen muß angenommen werden, daß die Übergangstemperatur $T_*$ aufgrund von Wechselwirkungen zwischen den Störstellen nicht mit $T_K$ zusammenfällt. Experimentell findet sich jedoch oft keine signifikante Abweichung, so daß auch in dieser Arbeit keine Unterscheidung zwischen $T_K$ und $T_*$ gemacht wird.

Vermutung aufkommen, daß hier ein unkonventioneller Mechanismus für die Bildung von Cooperpaaren vorliegen könnte. Dies ist in Verbindung mit der Suche nach einer Theorie für die Hochtemperatur-Supraleiter (z.B. $Y\,Ba_2\,Cu_3\,O_7$ oder $La_{2-x}\,Ba_x\,Cu\,O_4$) von großem Interesse.

Von den vielfältigen theoretischen Zugängen für solche Störstellensysteme (Quanten-Monte-Carlo, Mean-Field-Theorien, Bethe-Ansatz, Variationsverfahren)[2] soll in dieser Arbeit nur der Weg einer Nichtstandard-Störungstheorie beschritten werden, der sich im Fall der Einzelstörstelle bislang als sehr erfolgreich erwiesen hat. Die Versuche, eine Verallgemeinerung auf das Gitter zu formulieren, stoßen allerdings bereits bei Temperaturen in der Größenordnung von $T_K$ auf Schwierigkeiten. Dabei ist bisher nicht klar, ob dies die zu erwartenden speziellen Kohärenzeffekte des Gitters widerspiegelt oder nur das Ergebnis einer unzureichenden Näherung ist. Einen Beitrag zur Aufklärung dieser Frage liefert die vorliegende Arbeit.

## 2.2 Das Andersonmodell

Zur Beschreibung von Verbindungen der Seltenen Erden bzw. der Actiniden werden gewöhnlich Varianten eines von ANDERSON (1961) eingeführten Modells verwendet. Das *Andersonmodell* ist im wesentlichen gekennzeichnet durch die folgenden drei Anteile, die den Hamiltonoperator konstituieren.

- Der Bandanteil $H_{\text{Band}}$ beschreibt ein System delokalisierter Bandelektronen. Elektronen in diesen Zuständen werden als wechselwirkungsfreie (Quasi)teilchen betrachtet.
- Der Störstellenanteil $H_f$ modelliert die stark lokalisierten Störstellenniveaus, die in Form von Atomen der Selten Erden und Actiniden im Kristall eingebaut sind. Die starke Coulombwechselwirkung zwischen Elektronen, die in diesen Zuständen lokalisiert sind, ist für die hohen Korrelationen des Systems verantwortlich.
- Der Hybridisierungsterm $H_{\text{Hyb}}$ steht für den nichtverschwindenden Überlapp zwischen den lokalisierten und delokalisierten Zuständen. Hierdurch treten die beiden Teilsysteme $H_{\text{Band}}$ und $H_{\text{f}}$ in Konkurrenz.

[2]Für eine Übersicht siehe FULDE, KELLER und ZWICKNAGL (1988), HEWSON (1993) oder GREWE und STEGLICH (1991).

Die unterschiedlichen denkbaren Varianten des Andersonmodells sind insbesondere bezüglich der Störstellenzahl und dem Detailliertheitsgrad der Parameterwahl zu unterscheiden. In der vorliegenden Arbeit soll ein periodisches Andersonmodell (PAM) der Form

$$H_{\mathrm{PAM}} = \underbrace{\sum_{km} \epsilon_k c^+_{km} c_{km}}_{H_{\mathrm{Band}}} + \underbrace{\sum_{xm} \epsilon_f \bar{f}^+_{xm} \bar{f}_{xm}}_{H_f} + \underbrace{V \sum_{xm} (c_{xm} \bar{f}^+_{xm} + \bar{f}_{xm} c^+_{xm})}_{H_{\mathrm{Hyb}}} \tag{2.1}$$

zugrundeliegen. Hierzu sind einige Bemerkungen angebracht:

- Die Störstellenniveaus am Gitterplatz $x$, für die eine **$N$-fache Entartung** angenommen wird, werden mit der magnetischen Quantenzahl $m$ indiziert. Die maximale Entartung von $N = 14$ kann durch Spin-Bahn-Kopplung oder Kristallfeldeffekte reduziert werden. Für ein Cer-Störstellenatom mit einem $j = \frac{5}{2}$-Multiplett liegt z.B. eine sechsfache Entartung vor ($N = 2j + 1$).

  Die angenommene Entartung des Systems bezieht sich auch auf die weiteren Anteile des Hamiltonoperators: Die Bandzustände und damit die $c^+_{km}$ werden ebenfalls mit $m$ indiziert. Im Falle einer einzelnen Störstelle ist dies jedenfalls über die sphärische Darstellung der zugehörigen Wellenfunktionen möglich. Für ein Gitter läßt sich aber lediglich eine Spinentartung, also eine Indizierung mit $\sigma = \uparrow, \downarrow$ rechtfertigen, so daß das Modell strenggenommen für $N > 2$ eher eine formalisierte Verallgemeinerung als ein reales physikalisches System darstellt.

- Die Motivation, ein derartig vereinfachtes Andersonmodell zu betrachten, ergibt sich zusammen mit der Annahme einer **dispersionslosen, $m$-erhaltenenden Hybridisierung $V$**. Hieraus resultiert eine wesentlich vereinfachte Formulierung, bei der die Mischung der Zustände bezüglich der „verallgemeinerten magnetischen Quantenzahl“ $m$ allein über die Coulomb-Korrelation verschiedener Kanäle auf der Störstelle stattfindet. Eine spätere Erweiterung auf eine realistischere Hybridisierung in Form des allgemeineren Ausdrucks

  $$V_{xm\sigma} \bar{f}_{xm} c^+_{x\sigma} + V^*_{xm\sigma} c_{xm} \bar{f}^+_{x\sigma}$$

  ist dennoch nicht ausgeschlossen.

- Ein Term für die lokale Coulombabstoßung der Form

  $$\sum_{m<m'} U(f^+_{xm} f_{xm})(f^+_{xm'} f_{xm'})$$

taucht im vorgestellten Hamiltonoperator (2.1) nicht mehr explizit auf. Die Coulombenergie wird als so hoch angenommen (in Cer-Systemen beträgt sie typischerweise 5eV), daß das Modell vereinfachend im **Grenzfall $U = \infty$** betrachtet wird. Dies führt dazu, daß die Störstellen nicht mehrfach besetzt werden können und allein durch die Zustände $|0\rangle$ und $|m\rangle$ $(m = 1 \ldots N)$ beschrieben werden. Man hat also den $f$-Teil des Zustandsraumes auf solche Zustände einzuschränken. Dies kann formal dadurch geschehen, daß die $f$-Operatoren durch sogenannte *Hubbardoperatoren* ersetzt werden (HUBBARD (1964)). Man kann aber ebenso alle $f$-Operatoren mit Projektoren versehen, die gewährleisten, daß der eingeschränkte Zustandsraum nicht mehr verlassen wird.[3]

$$\bar{f}_{xm} := \left( \prod_{m' \neq m} (1 - f^+_{xm'} f_{xm'}) \right) f_{xm}$$

Die im folgenden durch einen Überstrich gekennzeichneten neuen Operatoren $\bar{f}$ und $\bar{f}^+$ erfüllen dadurch allerdings nicht mehr die Antivertauschungsrelationen von Fermioperatoren, die für die Formulierung eines Wickschen Theorems unabdingbar sind.

- Während beim Einstörstellenmodell das Elektronenband nur über seine Dichte in die Rechnungen eingeht, müssen für die Untersuchung der räumlichen Korrelationen im Gitter die geometrischen Details des zu betrachtenden Bandes näher spezifiziert werden. Der Hamiltonoperator $H_{\text{PAM}}$ enthält in der obigen Darstellung (2.1) Bandelektronoperatoren in Wannier- und Blochdarstellung. Diese gehen über eine Fouriertransformation auseinander hervor:

$$c_{xm} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k \in 1.\text{BZ}} e^{ikx} c_{km}$$

In Wannierdarstellung lautet der Bandanteil somit

$$H_{\text{Band}} = \sum_{xym} t_{xy} c^+_{xm} c_{ym} \qquad \text{mit} \quad \epsilon_k = \sum_x t_{0x} e^{ikx}$$

Vor allem im Hinblick auf den zu untersuchenden Grenzfall hoher Raumdimension wird als möglichst einfache Bandstruktur das *Tight-Binding-Band* (siehe z.B. ECONOMOU (1983) oder NOLTING (1992)) zugrundegelegt, was einem Hopping ausschließlich zwischen nächsten Nachbarn

[3] Die $\bar{f}$ sind über die folgenden Relationen mit den Hubbardoperatoren $X_{mm'} := |m\rangle \langle m'|$ gleichwertig: $\bar{f}^+_m = X_{m0}$, $\bar{f}_m = X_{0m}$, $\bar{f}^+_m \bar{f}_m = X_{mm}$.

in einem hyperkubischen Gitter entspricht:

$$t_{xy} = \tilde{t}\delta_{<x,y>} = \begin{cases} \tilde{t} & \text{für } x, y \text{ nächste Nachbarn} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \epsilon_k = 2\tilde{t}\sum_{i=1}^{d}\cos(k_i)$$

Trotz der hier geschilderten Vereinfachungen gegenüber einem realistischeren Andersongitter kann man annehmen, daß das Modell (2.1) weiterhin die wesentlichen Eigenschaften eines Schwerfermionensystems wiedergibt.

## 2.3 Störungtheoretische Berechnung des Einstörstellen-Andersonmodells

Eine wichtige Gemeinsamkeit aller in dieser Arbeit untersuchten Methoden zur Behandlung des Andersongitters besteht darin, daß sie die lokalen Korrelationen durch ein (effektives) Single-Impurity-Andersonmodell beschreiben. Die Bemühungen, die Physik einer solchen magnetischen Störstelle in einer metallischen Umgebung theoretisch zu beschreiben, reichen inzwischen mehrere Jahrzehnte zurück.

Dabei ist die bereits erwähnte hohe Coulombabstoßung $U$ zwischen Elektronen, die an derselben Störstelle lokalisiert sind, die Ursache der starken Korrelationen und läßt den Parameter $U$ als Ausgangspunkt einer Störungsrechnung ungeeignet erscheinen.

Eine alternative Störungsrechung nach der vergleichsweise kleinen Hybridisierungsstärke $V$ jedoch führt auf eines der folgenden fundamentalen Probleme:

- Bei endlichem $U$ enthält der Hamiltonoperator des ungestörten Systems mit der Coulombwechselwirkung einen Term, der nicht bilinear in Erzeugern und Vernichtern ist.
- Bei Annahme eines unendlichen $U$ muß der Hilbertraum auf Zustände mit unbesetzem oder nur einfach besetzem f-Niveau eingeschränkt werden. Die $f$-Operatoren (bzw. die Hubbardoperatoren) erfüllen in diesem Raum aber nicht mehr die Antikommutatorrelationen, welche die Fermistatistik garantieren.

In beiden Fällen ist ein Wicksches Theorem für endliche Temperaturen (GAUDIN (1960)) zur Zerlegung der Mehrteilchenerwartungswerte nicht mehr verfügbar.

Die von KEITER und KIMBALL (1971) entwickelte Störungstheorie unterscheidet sich von diagrammatischen Standardverfahren dadurch, daß sie nicht auf das Wicksche Theorem und eine Linked-Cluster-Entwicklung zurückgreift. Von ihr ausgehend lassen sich systematische Entwicklungen nach dem inversen Entartungsgrad $\frac{1}{N}$ des $f$-Niveaus sowie unendliche Teilresummationen durchführen (für eine Übersicht vgl. BICKERS (1987)).

Eine solche Teilresummation stellt die *Non-crossing Approximation* (kurz: NCA) dar (KEITER und KIMBALL (1971), KURAMOTO (1983)). Sie liefert in weiten Parameterbereichen eine gute Beschreibung statischer und dynamischer Eigenschaften des Single-Impurity-Modells. Insbesondere beschreibt sie die Bildung einer charakteristischen Vielteilchenresonanz, der *Abrikosow-Suhl-Resonanz*, die für das Schwerfermionenverhalten des Systems verantwortlich ist.

Auch in dieser Arbeit soll auf die NCA als Näherungsverfahren für die effektive Störstelle des Gitterproblems zurückgegriffen werden, da sie die Effekte der lokalen Korrelationen für das Single-Impurity-Problem korrekt wiedergibt. In den folgenden beiden Abschnitten werden die benötigten technischen Details der Methode kurz erläutert.

### 2.3.1 Hybridisierungs-Störungstheorie

Ausgangspunkt der hier verwendeten Störungstheorie für das Einstörstellen-Andersonmodell ist der sogenannte atomare Grenzfall $V = 0$, also eine Zerlegung des Hamiltonoperators gemäß

$$H = H_0 + H' \qquad \text{mit} \quad \left\{ \begin{array}{lcl} H_0 & = & H_{\text{Band}} + H_f \\ H' & = & H_{\text{Hyb}} \end{array} \right. \tag{2.2}$$

wobei $H_{\text{Band}}$ nun ein effektives Einteilchenband repräsentieren soll, das über den effektiven Single-Site-Ansatz bereits Gittereffekte enthält. Die folgende kurze Ableitung orientiert sich an der Formulierung des *Resolventenformalismus* (KEITER und MORANDI (1984)), bei dem die Diagrammregeln von vornherein im Energiebild abgeleitet werden.

Als schreibtechnische Vereinfachung wird hier zunächst eine $N$-fache Entartung der $f$-Niveaus angenommen. (Die entsprechende Verallgemeinerung für eine Aufspaltung der entarteten Niveaus kann z.B. im Falle eines Magnetfeldes in naheliegender Weise in Form eines Zeeman-Termes vorgenommen werden.) Das chemische Potential $\mu$ sei bereits in den Einteilchenenergien $\epsilon_k$ und $\epsilon_f$ enthalten.

Wird die Zustandssumme durch ein komplexes Konturintegral dargestellt

$$\mathcal{Z} = \mathsf{Sp}\, e^{-\beta H} = \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z}\, \mathsf{Sp}\, \frac{1}{z-H}$$

wobei die Integrationskontur alle Singularitäten der Resolvente $\frac{1}{z-H}$ in positivem Sinn umlaufen soll, so entspricht die Störungsentwicklung einer operatorwertigen geometrischen Reihe

$$\frac{1}{z-H} = \frac{1}{z-H_0} \sum_{n=0}^{\infty} \left[ H' \frac{1}{z-H_0} \right]^n$$

Die Spur wird nun über eine vollständige Basis des ungestörten Systems $H_0$ ausgeführt, deren Elemente als Produktzustände gewählt werden:

$$|Nm\rangle := |N\rangle\, |m\rangle \quad \text{mit} \quad \left\{ \begin{array}{rcl} H_{\mathrm{Band}}\, |N\rangle & = & E_N\, |N\rangle \\ H_f\, |m\rangle & = & \epsilon_m\, |m\rangle \end{array} \right.$$

Es bezeichnet also $E_N$ die Gesamtenergie des Bandelektronensystems und $\epsilon_m$ die Energie der Störstelle:

$$\epsilon_m = \left\{ \begin{array}{ll} 0 & \text{für } m = 0 \\ \epsilon_f & \text{für } m = 1 \ldots N \end{array} \right.$$

Zwischen alle Operatoren wird eine vollständige Basis eingeschoben und die Integrationsvariable in jedem Summanden um die jeweilige Anfangsenergie des Bandes $E_N$ verschoben ($z \to z + E_N$). Das ergibt

$$\mathcal{Z} = \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z} \sum_{Nm} e^{-\beta E_N} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\{N_i m_i\}} \frac{\prod\limits_{i=0}^{n-1} \langle N_{i+1} m_{i+1}|\, H'\, |N_i m_i\rangle}{\prod\limits_{i=0}^{n} (z - \epsilon_{m_i} - (E_{N_i} - E_N))}$$

(Diese verkürzende Schreibweise wird durch die Konvention $N_0 = N_n = N$ und $m_0 = m_n = m$ ermöglicht.)

Durch die spezielle Form des Hamiltonoperators und die gewählte Aufteilung in $H_0$ und $H'$

$$H' = H_{\mathrm{Hyb}} = V \sum_{\sigma m k} c^{\sigma}_{km} \bar{f}^{-\sigma}_m$$

ergeben sich nun nacheinander die folgenden Vereinfachungen. (Die $\bar{f}^{\sigma}$ und $c^{\sigma}$ mit $\sigma = \pm 1$ bezeichnen Erzeuger bzw. Vernichteroperatoren.)

- Die Matrixelemente des Zählers lassen sich in den jeweiligen Teilräumen mit den Faktoren der Produktzustände $|N\rangle\,|m\rangle$ getrennt auswerten:

$$\sum_{\substack{\{m_i k_i \sigma_i\}\\ i=1\ldots n}} \langle m|\,\bar{f}^{-\sigma_n}_{m_n}\ldots\bar{f}^{-\sigma_1}_{m_1}\,|m\rangle\,\langle N|\,c^{\sigma_n}_{k_n m_n}\ldots c^{\sigma_1}_{k_1 m_1}\,|N\rangle$$

  Die Zwischenzustände $|N_i m_i\rangle\,\langle N_i m_i|$ kann man tilgen, da ein gegebener Satz von $c$- und $f$-Operatoren jeweils für nur genau einen Zwischenzustand zu nichtverschwindenden Matrixelementen führt.

- Wegen der Einschränkung des Hilbertraums führt der $f$-Anteil zu der Bedingung, daß die $\bar{f}^{\sigma_i}_{m_i}$ abwechselnd ein $f$-Elektron erzeugen und im nächsten Schritt wieder vernichten. Entsprechend wird jeweils umgekehrt ein Bandelektron vernichtet bzw. erzeugt. Die Energienenner der Zwischenzustände enthalten damit abwechselnd die Energie $\epsilon_f$ bzw. 0 als lokalen Anteil.

- Die Bandanteile der Energienenner $E_{N_i}-E_N$ beschreiben die Anregungsenergien der Zwischenzustände über dem Ausgangszustand $|N\rangle$. Für sie gilt in Abhängigkeit der $k_i$

$$E_{N_i+1} = E_{N_i} + \sigma_i \epsilon_{k_i}$$

- Da die Energienenner durch die Subtraktion von $E_N$ unabhängig vom Ausgangszustand $|N\rangle$ sind, läßt sich die Teilsummation über das Band ausführen. Dies entspricht einer thermodynamischen Mittelung bezüglich des Systems der Bandelektronen:

$$\frac{1}{Z_{\text{Band}}}\sum_N e^{-\beta E_N}\,\langle N|\,c^{\sigma_n}_{k_n m_n}\ldots c^{\sigma_1}_{k_1 m_1}\,|N\rangle = \left\langle c^{\sigma_n}_{k_n m_n}\ldots c^{\sigma_1}_{k_1 m_1}\right\rangle_{H_{\text{Band}}}$$

  mit $Z_{\text{Band}} = \sum_N e^{-\beta E_N}$. Da $H_{\text{Band}}$ bilinear in den Erzeugern und Vernichtern ist, läßt sich dieser Ausdruck mit dem Wickschen Theorem für endliche Temperaturen (Gaudin (1960)) als Summe über alle möglichen vollständigen Paarkontraktionen schreiben. Jede Kontraktion führt zu einer Erhaltung der beteiligten Quantenzahlen $m$ und $k$ und einem globalen Vorzeichen $(-1)^s$, wenn $s$ die Zahl der durchzuführenden Antivertauschungen bezeichnet. Die einzigen nichtverschwindenden Paarkontraktionen liefern die Beiträge

$$\langle c^{+}_{km} c_{km}\rangle = f(\epsilon_k) \qquad \text{bzw.} \qquad \langle c_{km} c^{+}_{km}\rangle = 1 - f(\epsilon_k)$$

  mit der Fermifunktion $f(\epsilon) = \dfrac{1}{e^{\beta\epsilon}+1}$.

Damit ergibt sich ein Satz von Diagrammen $\Gamma_m$ zu jedem Ausgangszustand $|m\rangle$, deren Konstruktion durch die nachfolgend zusammengefaßten Regeln (S.27) beschrieben wird. Sie führen auf die folgende Darstellung der durch $\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_f \mathcal{Z}_{\text{Band}}$ definierten Zustandssumme:

$$\mathcal{Z}_f = \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z} \sum_m R_m(z) \quad \text{mit} \quad R_m(z) = \sum_{\gamma \in \Gamma_m} \gamma(z) \tag{2.3}$$

Die derart durch Diagrammsummation entstehenden $R_m(z)$ werden auch als *Propagatoren* bezeichnet.

Im weiteren Verlauf läßt sich durch Einführen einer *Selbstenergie* $\Sigma$ eine teilweise Resummation von Diagrammen erzielen. Man betrachtet nur solche Diagramme, bei denen der Ausgangszustand $|N\rangle$ zwischenzeitlich nicht wieder angenommen wird, und stellt die Propagatoren als geometrische Reihe über diese sogenannten Selbstenergieprozesse dar. (Formal läßt sich dies durch die Einführung eines Projektors $Q_N = 1 - |N\rangle\langle N|$ erreichen, vgl. Keiter und Morandi (1984)). Graphisch läßt sich ein Selbstenergiediagramm leicht dadurch kennzeichnen, daß es nicht durch Zerschneiden einer lokalen $f$-Linie zerfällt. Zudem werden die ein- und auslaufenden lokalen Propagationen entfernt. Bezeichnet $\Gamma_m^\Sigma$ die Klasse aller solchen irreduziblen Diagramme, die vom Zustand $|m\rangle$ ausgehen, so gelangt man zur Selbstenergiedarstellung

$$R_m(z) = \frac{1}{z - \epsilon_m - \Sigma_m(z)} \quad \text{mit} \quad \Sigma_m(z) = \sum_{\gamma \in \Gamma_m^\Sigma} \gamma(z) \tag{2.4}$$

**Diagrammregeln für $\boldsymbol{R_m(z)}$, $\boldsymbol{\Sigma_m(z)}$, $\boldsymbol{\mathcal{Z}_f}$**

(1) Man zeichne zu $n=2p$ senkrecht angeordneten Vertizes von unten nach oben abwechselnd $n+1$ durchgehende und gestrichelte Linien, beginnend vor dem ersten Vertex und wähle durchgehende Linien für $m=1\ldots N$ und gestrichelte für $m=0$ („lokale Propagationen“). Jeder Vertex erhält einen Faktor $V$.

(2) Man verbinde auf der rechten Seite des Diagramms die Vertizes paarweise miteinander unter Beachtung der Pfeilrichtungen der durchgezogenen Linien („Bandpropagationen“). Jede Linie erhält eine eigene Variable $k$, jede aufwärtsgehende Linie (Elektron) einen Faktor $1-f(\epsilon_k)$ und jede abwärtsgehende Linie (Loch) einen Faktor $f(\epsilon_k)$.

(3) Jede durchgehende Elektronenlinie erhält eine Quantenzahl $m$. Über alle inneren magnetischen Quantenzahlen $m$ und Gitterimpulse $k$ ist zu summieren.

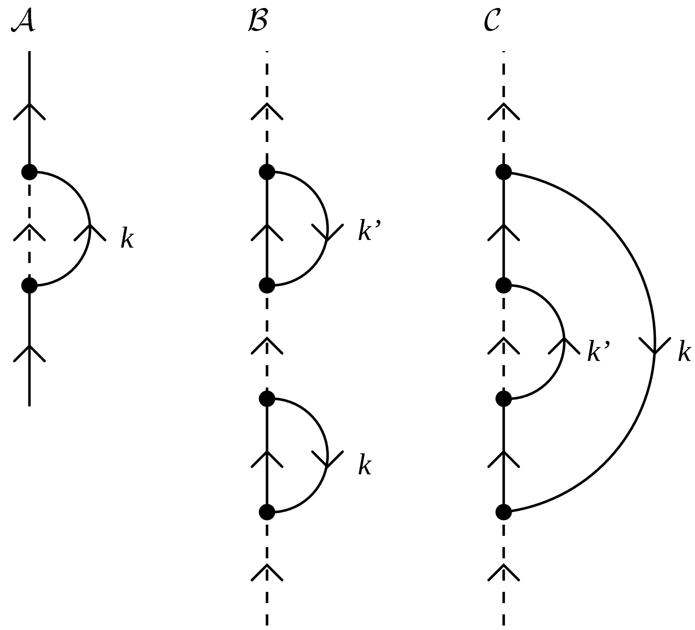
(4) Jeder lokalen Propagation ist ein Energienenner $\frac{1}{z-E}$ zuzuordnen. $E$ erhält man durch Summation aller Energien der Propagatoren, die eine zwischen den entsprechenden Vertizes horizontal gezogene Linie kreuzen: $\epsilon_f$ bzw. 0 für den lokalen Propagator und $\epsilon_k$ bzw. $-\epsilon_k$ für jede aufwärtslaufende bzw. abwärtslaufende Bandpropagation.

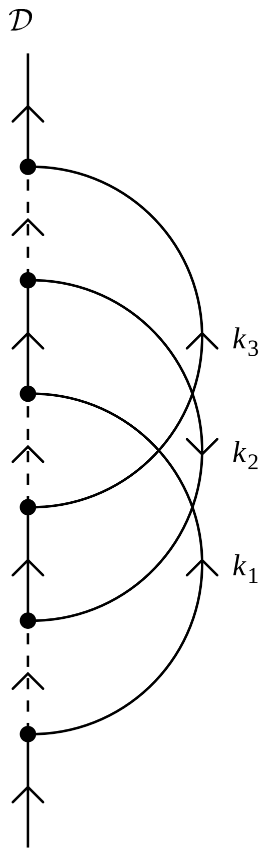
(5) Besitzen die Elektronenlinien $s$ Überkreuzungen, so ergibt dies einen globalen Vorfaktor $(-1)^s$.

Berücksichtigt man allein irreduzible Diagramme (s.o.) und streicht zudem jeweils die ein- und auslaufende lokale Propagation, so erhält man $\Sigma_m(z)$ und daraus $R_m(z)$ gemäß (2.4). $\mathcal{Z}_f$ wird aus den $R_m(z)$ über (2.3) berechnet.

Ist das System bezüglich $m$ vollständig entartet, so erhält man nur zwei verschiedende Beiträge, die man mit $R_0$ (bzw. $\Sigma_0$) für $m=0$ und mit $R_1$ (bzw. $\Sigma_1$) für $m=1\ldots N$ bezeichnet.

Zur Illustration sind im folgenden einige Diagramme und ihre Beiträge abgebildet:




$$\mathcal{A} \to V^2 \sum_k \frac{(1-f(\epsilon_k))}{(z-\epsilon_f)(z-\epsilon_k)(z-\epsilon_f)}$$

$$\mathcal{B} \to N^2\, V^4 \sum_{kk'} \frac{(1-f(\epsilon_k))(1-f(\epsilon_{k'}))}{z\,(z-\epsilon_f+\epsilon_k)\; z\,(z-\epsilon_f+\epsilon_{k'})\; z}$$

$$\mathcal{C} \to N\, V^4 \sum_{kk'} \frac{f(\epsilon_k)(1-f(\epsilon_{k'}))}{z\,(z-\epsilon_f+\epsilon_k)(z-\epsilon_{k'}+\epsilon_k)(z-\epsilon_f+\epsilon_k)\; z}$$

$$\mathcal{D} \to V^6 \sum_{k_1k_2k_3} \frac{(1-f(\epsilon_{k_1}))f(\epsilon_{k_2})}{(z-\epsilon_f)(z-\epsilon_{k_1})(z-\epsilon_f-\epsilon_{k_1}+\epsilon_{k_2})(z-\epsilon_{k_1}+\epsilon_{k_2}-\epsilon_{k_4})} \cdot$$
$$\cdot \frac{(1-f(\epsilon_{k_3}))}{(z-\epsilon_f-\epsilon_{k_1}+\epsilon_{k_2})(z-\epsilon_{k_1})(z-\epsilon_f)}$$

Der jeweilige Faktor $N^p$ entsteht durch die Summation über $p$ unabhängige Quantenzahlen $m$. Beispiel $\mathcal{B}$ ist kein Selbstenergiediagramm, Beispiel $\mathcal{C}$ läßt sich durch Renormierung eines Selbstenergiediagramms der Ordnung $V^2$ gewinnen. Eine solche Renormierung läßt sich systematisch durchführen, indem man die Selbstenergie als Summe von *Skelettdiagrammen* auffaßt und diese mit den vollständigen Propagatoren $R_m(z)$ renormiert:

$$\Sigma_m(z) = \Sigma_m^{(1)}(\{R_m\}) + \Sigma_m^{(2)}(\{R_m\}) + \ldots$$

Als Skelettdiagramme kann man die Beispiele $\mathcal{A}$ und $\mathcal{D}$ identifizieren.

Analog zu der oben beschriebenen Störungsentwicklung läßt sich ebenfalls der $f$-Elektronenpropagator $G_f$ im Energiebild (d.h. in der Darstellung über Matsubarafrequenzen[4]) bestimmen.

$$G_f(i\omega) := \int_0^\beta d\tau\, e^{i\omega_n\tau} G_f(\tau) \quad \text{mit} \quad G_f(\tau) := -\left\langle T_\tau \bar{f}_m(\tau) \bar{f}_m^+(0) \right\rangle$$

Die analytische Fortsetzung von $G(i\omega)$ in die obere komplexe Halbebene ergibt dann die $f$-Spektraldichte über

$$\rho_f(E) = -\frac{1}{\pi}\,\mathfrak{Im}\, G_f(E + i\delta)$$

Die Störungsentwicklung von $G_f$ in Resolventendarstellung (siehe z.B. Keiter und Morandi (1984))

$$G_f(i\omega_n) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z}\, \mathsf{Sp}\left[\frac{1}{z - H}\, \bar{f}_m\, \frac{1}{z + i\omega_n - H}\, \bar{f}_m^+\right]$$

führt analog zur oben geschilderten Vorgehensweise zu einem Satz von Diagrammregeln:

**Diagrammregeln für $G_f(i\omega_n)$**

Gegenüber den Regeln für $R_m(z)$ sind folgende Änderungen vorzunehmen:

(1') Die Linie vor dem ersten Vertex ist auszulassen, es ist mit einer durchgehenden Linie zu beginnen. Der erste und ein weiterer *gerader* Vertex werden als *externe Vertizes* hervorgehoben und erhalten keinen Faktor $V$.

(2') Zwischen den externen Vertizes wird links vom Diagramm eine zusätzliche, abwärtslaufende *externe Linie* mit der Energie $i\omega_n$ eingezeichnet.

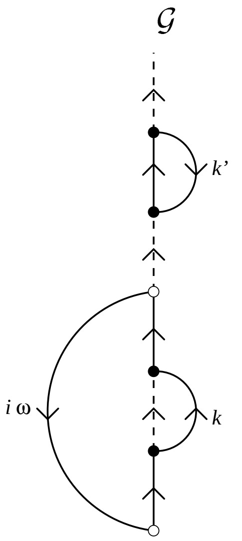
(4') Die externe Linie wird bei der Berechnung der Enegienenner mitberücksichtigt.

Über die ermittelten Beiträge muß längs einer alle Singularitäten gegen den Uhrzeigersinn umschließenden Kontur integriert und mit der oben berechneten Zustandssumme normiert werden. (Der Anteil $\mathcal{Z}_{\text{Band}}$ kürzt sich hierbei heraus.)

$$\frac{1}{\mathcal{Z}_f} \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z} \ldots$$

[4]Zum Matsubaraformalismus finden sich Darstellungen z.B. bei Fetter und Walecka (1971) oder Abrikosow, Gorkow und Dschjaloschinsky (1963).

Man erhält also alle $f$-Greenfunktionen gleichsam durch *Aufschneiden* der Zustandssummendiagramme. Ein einfaches Beispiel hat die folgende Form




$$\mathcal{G} \rightarrow N^2\, V^4 \sum_{kk'} \frac{(1 - f(\epsilon_k))}{(z - \epsilon_f + i\omega_n)(z + i\omega_n - \epsilon_k)} \cdot$$
$$\cdot \frac{f(\epsilon_{k'})}{(z - \epsilon_f + i\omega_n)\, z\, (z - \epsilon_f + \epsilon_{k'})\, z}$$

### 2.3.2 Non-crossing Approximation (NCA)

Die soeben definierte diagrammatische Störungsentwicklung liefert im Prinzip eine vollständige Beschreibung aller Beiträge zum Single-Impurity-Andersonmodell. Dabei werden im Rahmen der Selbstenergiedarstellung und der Skelettentwicklung bereits unendliche Resummationen der Störungsreihe vorgenommen. Eine vollständige Resummation in Form eines geschlossenen Ausdrucks ist allerdings nicht möglich, und so ist man darauf angewiesen, sich im Rahmen einer Näherungsmethode auf relevante Teilbeiträge zu konzentrieren. Eine Methode, die dies leistet, ist die sogenannte *Non-crossing Approximation.* Sie ist dadurch definiert, daß nur der **einfachste Term der Skelettentwicklung** $\Sigma^{(1)}$ berücksichtigt wird. Dies führt auf das Gleichungssystem

$$\boxed{\begin{aligned} \Sigma_0(z) &= N\, V^2 \sum_k f(\epsilon_k) R_1(z - \epsilon_k) \\ \Sigma_1(z) &= V^2 \sum_k (1 - f(\epsilon_k)) R_0(z + \epsilon_k) \end{aligned}} \qquad (2.5)$$

Die NCA-Gleichungen

Zusammen mit den Bestimmungsgleichung der Selbstenergieentwicklung

$$R_0(z) = \frac{1}{z - \Sigma_0(z)} \qquad R_1(z) = \frac{1}{z - \epsilon_f - \Sigma_1(z)} \qquad (2.6)$$

bilden sie ein geschlossenes, nichtlineares Integralgleichungssystem.

Betrachtet man die NCA auf der Ebene der Basisdiagramme zu $R_m(z)$, so läßt sich die Näherung dadurch charakterisieren, daß ausschließlich **alle Diagramme ohne Überkreuzungen von Bandelektronenlinien** berücksichtigt werden (also die Beispiele $\mathcal{A}$, $\mathcal{B}$ und $\mathcal{C}$, nicht aber Beispiel $\mathcal{D}$). Auch die f-Greenfunktion läßt sich bei Beschränkung auf diesen Diagrammtyp geschlossen berechnen. Das Beispieldiagramm $\mathcal{G}$ wird also z.B. mitberücksichtigt.

$$\boxed{G_f(i\omega_n) = \frac{1}{\mathcal{Z}_f} \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z} R_0(z) R_1(z + i\omega_n)} \tag{2.7}$$

Der f-Propagator der NCA

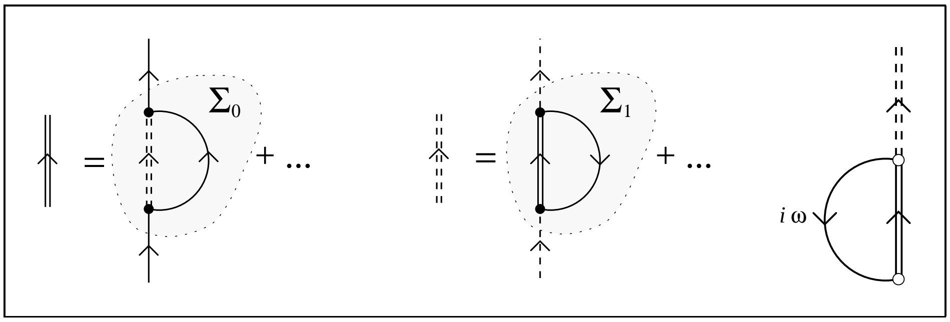



**Abbildung 2.1** $R_0$, $R_1$ und $G_f$ der NCA in graphischer Darstellung

Überkreuzende Beiträge, also solche zu höheren Skelettdiagrammen, können durch die Einführung eines Vertexfaktors in den NCA-Gleichungen berücksichtigt werden. Das führt auf Erweiterungen, wie die von Grewe und Anders (1994) durchgeführte, sogenannte *Post-NCA*. Deren Bedeutung für die vorliegende Arbeit wird im Abschlußkapitel kurz angerissen.

Man kann die besondere Eignung der NCA für den Fall hoher Entartung der Störstelle einsehen, wenn man $\frac{1}{N}$, den inversen Entartungsgrad der Störstelle, als kleinen Parameter einer Entwicklung auffaßt. Den Grenzfall $N \to \infty$ kann man allerdings nur sinnvoll definieren, wenn die Hybridisierungsstärke angemessen mitskaliert wird und damit das Gewicht von Hybridisierungsprozessen im Grenzübergang gleich bleibt. Dies geschieht zweckmäßig durch die Skalierung

$$V^2 = \frac{\tilde{V}^2}{N}$$

Im Grenzübergang $N \to \infty$, $V \to 0$ bleibt $NV^2$ dann konstant. Ermittelt man nach diesem Verfahren die Ordnung eines jeden Selbstenergiediagramms, so findet man das folgende Grenzverhalten: Die $N$ gleichwertigen Diagramme des Typs $\mathcal{A}$ gehen mit $NV^2 = \mathcal{O}(\frac{1}{N^0})$, Diagramm $\mathcal{C}$ geht wie $NV^4 = \mathcal{O}(\frac{1}{N^1})$ und Diagramm $\mathcal{D}$ wie $NV^6 = \mathcal{O}(\frac{1}{N^2})$. Analysiert man analog auch den f-Propagator, so findet man, daß die NCA alle Beiträge bis zur Ordnung $\frac{1}{N}$ vollständig berücksichtigt und darüber hinaus Beiträge höherer Ordnung miteinbezieht.

## 2.4 Effektive Single-Site-Näherungen

Während für das Single-Impurity-Andersonmodell (SIAM) bereits seit seiner Einführung durch Anderson (1963) viele theoretische Methoden entwickelt wurden[5], erstreckt sich die theoretische Behandlung des Andersongitters im wesentlichen über das letzte Jahrzehnt.

Während das Single-Impurity Andersonmodell noch eine adäquate Beschreibung von Systemen mit geringer Störstellenkonzentration liefert, sind bei hoher Konzentration, d.h. insbesondere bei periodischer Anordnung der Störstellen an jedem Gitterplatz, wie oben beschrieben, Kohärenzeffekte zu erwarten, zu deren Beschreibung die räumlichen Korrelationen berücksichtigt werden müssen.

Es besteht daher ein starkes Interesse an der Konstruktion von Verfahren zur Behandlung des Andersongitters, die in der Lage sind, die für das Störstellengitter spezifischen, neuen Phänomene zumindest qualitativ zu beschreiben. Dazu wurden in den vergangenen Jahren von mehreren Arbeitsgruppen parallel störungstheoretische Verfahren entwickelt, deren Gegenüberstellung und Diskussion im Hinblick auf ihre Behandlung räumlicher Korrelationen im Fokus dieser Arbeit stehen. Zu den frühesten systematischen Ansätzen zählen die XNCA (Kuramoto (1985)) und die LNCA (Grewe (1987)). Aber auch spätere Formulierungen (z.B. Hülsenbeck und Qin (1994)) lassen sich hier einordnen.

Die erwähnten Verfahren besitzen die folgenden Gemeinsamkeiten:

- Sie beruhen auf einer *Störungstheorie nach der* (im Vergleich zur lokalen Coulombwechselwirkung kleinen) *Hybridisierung* zwischen den lokalen Störstellenniveaus und dem delokalisierten Leitungsband.
- Sie behandeln das Störstellengitter auf der Basis eines *effektiven Einstörstellen-Bildes*. Dies bedeutet, daß der Einfluß des Gitters allein über

[5] Für einen Überblick sei auf das Buch von Hewson (1993) verwiesen.

die Einführung eines *effektiven Leitungsbandes* modelliert wird. Dieses Band wird wiederum aus den Streueigenschaften des effektiven Single-Impurity-Systems ermittelt, so daß sich ein System von Abhängigkeiten ergibt, das *selbstkonistent* gelöst werden muß.

- Diese Beschreibungweise bedingt, daß die im folgenden zusammengefaßten Methoden wesentlich auf Formulierungen und Verfahren zurückgreifen, die im Rahmen der Behandlung des Einstörstellenmodells entwickelt wurden. Dies bezieht sich vor allem auf die zugrundeliegende *Nichtstandard-Störungstheorie* und die notwendige *Näherung des Single-Impurity-Problems durch die NCA*, welche bereits vorgestellt wurden.

Für eine systematische Behandlung des Gitteranteils werden verschiedene Näherungen vorgeschlagen, die die räumlichen Korrelationen der kohärenten Streuung an mehreren Störstellen beschreiben. Hierbei kann die Existenz eines kleinen Parameters (über den Grenzfall hoher räumlicher Dimension) eine kontrollierte Näherung ermöglichen.

Im folgenden sollen die drei erwähnten Ansätze kurz vorgestellt werden. Dabei liegt das Gewicht im Sinne des Hauptgegenstandes der Arbeit auf der Darstellung der *räumlichen* Korrelationen. (Die *lokalen* Korrelationen werden in allen drei Verfahren im Rahmen einer NCA-Rechnung, wie sie in Abschnitt 2.3.2 geschildert wurde, behandelt.) Die Darstellung konzentriert sich zudem auf die Formulierung der XNCA, da sich bei dieser der Grenzfall $d=\infty$ am besten auf der Ebene der beteiligten Elementarprozesse analysieren läßt.

### 2.4.1 Die XNCA

Die von KURAMOTO und seiner Arbeitsgruppe unter dem Namen XNCA („eXtended NCA“) eingeführte Behandlung des Andersongitters (KOJIMA, KURAMOTO und TACHIKI (1984), KURAMOTO (1985), KIM, KURAMOTO und KASUYA (1987a), KIM, KURAMOTO und KASUYA (1990)) fußt in ihrer methodischen Formulierung wesentlich auf der Arbeit von KURAMOTO (1983). Hierin wird eine Störungstheorie für das Single-Impurity-Modell vorgestellt und als Näherungslösung werden die oben beschriebenen NCA-Gleichungen abgeleitet. Die Beschreibungsweise ist allerdings im wesentlichen mit der bereits von KEITER und KIMBALL (1971) eingeführten Theorie äquivalent.

Die Methode von KURAMOTO besitzt den Vorteil – zumindest formal – vergleichsweise direkt zu einer effektiven Single-Site-Näherung für das periodische Störstellenproblem erweiterbar zu sein. Eine Besonderheit ist hierbei, daß zunächst keine Neuformulierung der Hybridisierungs-Störungstheorie auf das Gittersystem vorzunehmen ist, sondern sofort ein effektives Single-Impurity-Modell definiert werden kann, das sich für den Fall einer einzelnen Störstelle auf die bekannte Single-Impurity-Störungsrechnung reduziert.

Die Definition einer Näherung für das Andersongitter erfordert allerdings tiefergehende Überlegungen zur Bedeutung räumlicher Korrelationen. Während die Näherung des Single-Impurity-Modells im Rahmen der NCA durch den kleinen Parameter $\frac{1}{N}$ gerechtfertigt wurde (vgl. Abschnitt 2.3.2), benötigt man für Gittersysteme einen weiteren Parameter, der eine kontrollierte Näherung ermöglicht. Kojima, Kuramoto und Tachiki (1984) wählen hier die Zahl $\frac{1}{z_n}$, wobei $z_n$ als „effektive Zahl nächster Nachbarn, die das Bandelektron sieht“, bezeichnet, aber nicht näher spezifiziert wird. Man kann allerdings feststellen, daß $z_n$ nicht mit der Zahl der (geometrisch) nächsten Nachbarn ($= 2d$) gleichgesetzt wird, sondern vielmehr als zu einer mathematisch günstigen Skalierung frei zur Verfügung stehend angesehen wird.

In der vorliegenden Arbeit wird allerdings, abweichend von den Originalarbeiten, die Identifikation $z_n = 2d$ vorgenommen und gezeigt, inwiefern sich die XNCA auf diese Weise als Näherung für hohe räumliche Dimensionen schlüssig formulieren läßt.

Im folgenden soll nun die Definition der XNCA als effektive Single-Site-Näherung gegeben und die durch die XNCA definierte Behandlung der räumlichen Korrelationen in unendlichen Dimensionen diskutiert werden. Im Hinblick auf die zu erzielende Darstellung des Gitterproblems als effektives Single-Site-Problem nimmt die XNCA von vornherein die folgende Aufspaltung des Anderson-Hamiltonoperators vor:

$$H_{\text{PAM}} = H_0 + H' \qquad \text{mit} \qquad \left\{ \begin{array}{rcl} H_0 & = & \underbrace{H_{\text{Band}} + \sum_{x \neq 0} \left[ H_{\text{Hyb}}^{(x)} + H_f^{(x)} \right]}_{=: H_{\text{N}-1}} + H_f^{(0)} \\ H' & = & H_{\text{Hyb}}^{(0)} \end{array} \right. \tag{2.8}$$

Als Störungsanteil wird nur die Hybridisierung an einem willkürlichen Gitterplatz (hier mit (0) bezeichnet) gewählt. Das verbleibende System $H_0$ besteht aus der lokalen Energie der ausgewählten Störstelle und einem fiktiven System $H_{\text{N}-1}$, das entsteht, wenn aus dem Gitter die Störstelle (0) gänzlich entfernt wird. Man kann dieses System $H_{\text{N}-1}$ als *effektives Elektronenband*, in das die ausgewählte Störstelle eingebettet ist, auffassen, und tatsächlich reduziert sich dieses Band für den Single-Impurity-Fall auch auf das ungestörte Band $H_{\text{Band}}$.

Mit der erläuterten Aufspaltung ergibt sich der wohlbekannte Ausgangspunkt für eine störungstheoretischen Darstellung der Zustandssumme und der Greenfunktion (siehe z.B. ABRIKOSOW, GORKOW und DSCHJALOSCHINSKY (1963)):

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \mathsf{Sp}\left(e^{-\beta H_0}\boldsymbol{T}e^{-\int_0^\beta d\tau H'(\tau)}\right) \\ G_f(\tau) &= -\mathcal{Z}^{-1}\mathsf{Sp}\left(\boldsymbol{T}e^{-\int_0^\beta d\lambda H'(\lambda)}f_{(0)}(\tau)f^+_{(0)}\right) \end{aligned}$$

In der hier gewählten Kurzschreibweise sei der Index $m$ an den $f$-Operatoren unterdrückt. Der Operator $\boldsymbol{T}$ ist der Dysonsche bzw. Wicksche Zeitordnungsoperator.

Nun sei die Zustandssumme des fiktiven Systems $H_{\mathrm{N}-1}$ eingeführt:

$$\mathcal{Z}_{\mathrm{N}-1} := \mathsf{Sp}_{\mathrm{N}-1}e^{-\beta H_{\mathrm{N}-1}}$$

Durch den wie folgt definierten Projektionsoperator

$$\boldsymbol{P}[\ldots] := (\mathcal{Z}_{\mathrm{N}-1})^{-1}\mathsf{Sp}_{\mathrm{N}-1}[\ldots]$$

wird die Wirkung des Teilsystems $H_{\mathrm{N}-1}$ herausgemittelt. Man beachte, daß die Ausdrücke nach der Projektion mittels $\boldsymbol{P}$ noch Operatoren im $f^{(0)}$-Raum bleiben.

Nun läßt sich $\mathcal{Z}$ formal über die *Zustandssumme einer effektiven Störstelle* $\mathcal{Z}_f$ darstellen:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \mathcal{Z}_{\mathrm{N}-1}\mathcal{Z}_f \\ \mathcal{Z}_f &:= \mathsf{Sp}_{f_{(0)}}R(\beta) \\ R(\tau) &:= e^{-\tau H_f^{(0)}}\boldsymbol{P}\boldsymbol{T}e^{-\int_0^\tau d\lambda H'(\lambda)} \end{aligned} \tag{2.9}$$

Nach einer Laplacetransformation

$$R(z) = -\int_0^\infty d\tau\, e^{\tau z}R(\tau) \qquad R(\beta) = \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z}R(z)$$

erhält man für die effektive Störstelle den Ausdruck

$$\mathcal{Z}_f = \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z}\sum_m R_m(z) \quad \text{mit} \quad R_m = \langle m|\, R(z)\,|m\rangle \quad (m = 0\ldots N)$$

Dieser Ausdruck entspricht der Darstellung (2.3) des Single-Impurity-Problems, und man kann sich leicht überzeugen, daß für diesen Fall ($H_0 = H_{\mathrm{Band}} + H_f^{(0)}$, $H_{\mathrm{N}-1} = H_{\mathrm{Band}}$) die oben beschriebene Störungstheorie (Abschnitt 2.3) reproduziert wird.

Auch die Greenfunktion der effektiven Störstelle läßt sich mit Hilfe des Projektors ausdrücken

$$G_f^{(0)}(\tau) = -\mathcal{Z}_f^{-1}\mathsf{Sp}_{f_{(0)}}\left(e^{-\beta H_f^{(0)}}\boldsymbol{PT}f_{(0)}(\tau)f_{(0)}^{+}e^{-\int_0^\beta d\lambda H'(\lambda)}\right)$$

Man beachte, daß sich die Zustandssumme des effektiven Bandes $\mathcal{Z}_{\mathrm{N}-1}$ herausgekürzt hat und nicht mehr explizit auftritt.

Eine große Schwierigkeit, der jede direkte Störungstheorie im Gitter begegnen muß, ist, daß das Excluded-Volume-Problem eine unmittelbare Definition einer Gitterselbstenergie verhindert. Im Rahmen des hier beschriebenen Projektionsformalismus läßt sich jedoch die Definition der Selbstenergie für das Einstörstellenproblem *formal* direkt auf das Gitter übertragen. Dazu wird der Projektionsoperator

$$\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{1} - \boldsymbol{P}$$

definiert. Dieser projiziert aus der Zustandssumme solche Terme heraus, die mit dem Anfangszustand identisch sind. Mit der folgenden Selbstenergiedefinition

$$\Sigma(\tau) := e^{-\tau H_f^{(0)}}\boldsymbol{P}H'(\tau)\boldsymbol{T}e^{-\boldsymbol{Q}\int_0^\tau d\lambda H'(\lambda)}\boldsymbol{Q}H'(0)$$

erhält man nach Laplacetransformation im Energiebild

$$R(z) = \frac{1}{z - H_f - \Sigma(z)}$$

Dies beweist, daß im Single-Impurity-Fall die hier definierte Selbstenergie mit der in (2.4) erklärten identisch ist.

Bisher waren alle Umformungen dieses Abschnittes exakte störungstheoretische Umschreibungen. Das Excluded-Volume-Problem ist damit allerdings nicht umgangen, sondern vielmehr auf die spätere Auswertung des effektiven Bandes verschoben.

Der elegante Projektorformalismus erlaubt es nun, das effektive Single-Impurity-Problem besonders prägnant darzustellen. Der Einfluß des Restgitters mit $\mathrm{N}-1$ Störstellen auf die Dynamik der effektiven Störstelle am Ursprung ist allein über den Ausdruck

$$\boldsymbol{PT}e^{-\int_0^\beta d\tau H'(\tau)}$$

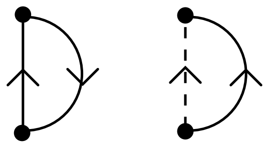
bzw. in Selbstenergiedarstellung über

$$\boldsymbol{P}H'(\tau)\boldsymbol{T}e^{-\boldsymbol{Q}\int_0^\tau d\lambda H'(\lambda)}\boldsymbol{Q}H'(0)$$

vermittelt. Diese Ausdrücke beschreiben ein *effektives Band* und sind ebenso wenig exakt lösbar wie das volle Problem. Die nun notwendige Auswertung dieses effektiven Bandes soll hier am Beispiel der Selbstenergiebeiträge niegdrigster Ordnung in $H'$ erfolgen. Dabei wird auch die Wirkungsweise des Projektors $\boldsymbol{Q}$ deutlich. Auf eine ausführliche Ableitung der Diagrammregeln sei hier zugunsten einer knappen Darstellung der wesentlichen Aspekte verzichtet. Zum Zwecke der Vergleichbarkeit seien die folgenden graphischen Darstellungen an die bereits für die Einzelstörstelle verwendeten angelehnt.

In niedrigster Ordnung, d.h. in $\mathcal{O}(V^2)$, ergeben sich die beiden folgenden, durch die effektiven Bandkontraktionen definierten Beiträge:

$\boldsymbol{P}c_2^+c_1$



$\boldsymbol{P}c_2c_1^+$

**Abbildung 2.2** Beiträge $\mathcal{O}(V^2)$ zur Selbstenergie

Die Indizes an den Fermioperatoren stehen verkürzend für ihre Zeitabhängigkeit, also z.B. $c_i := c(\tau_i)$. Der Zeitordnungsoperator wird ebenfalls unterdrückt.

Die nächste beitragende Ordnung $\mathcal{O}(V^4)$ führt auf den Term

$$\boldsymbol{P}c_4\boldsymbol{Q}c_3^+\boldsymbol{Q}c_2\boldsymbol{Q}c_1^+ \tag{2.10}$$

und den entsprechenden Ausdruck mit Erzeugern und Vernichtern an den jeweils anderen Stellen. Das abwechselnde Auftreten von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ist auf die spezielle Form des Störterms $H' = H_{\text{Hyb}}$ zurückzuführen, ebenso wie die Tatsache, daß eine Mittelung über eine ungerade Zahl von $c$-Operatoren verschwindet.

Nach Ausführen aller Zwischenprojektionen erhält man als einzig verbleibende Terme

$$\boldsymbol{P}c_4c_3^+c_2c_1^+ - \boldsymbol{P}c_4c_3^+\boldsymbol{P}c_2c_1^+$$

Der zweite Summand korrigiert einen reduziblen Beitrag, der entsteht, wenn man den ersten noch gemäß der folgenden *Kumulantenentwicklung* ausschreibt:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{P}c_4c_3^+c_2c_1^+ &= \sum \text{vollständige Kontraktionen} + \boldsymbol{P_c}c_4c_3^+c_2c_1^+ \\ &= \boldsymbol{P}c_4c_3^+\boldsymbol{P}c_2c_1^+ + \boldsymbol{P}c_4c_1^+\boldsymbol{P}c_3^+c_2 + \boldsymbol{P_c}c_4c_3^+c_2c_1^+ \end{aligned} \tag{2.11}$$

Der Operator $\boldsymbol{P_c}$ bezeichnet dabei die hierdurch (und analog in höheren Ordnungen) definierte *kumulantische* Mittelung. Diese läßt sich durch den Fall einer einzelnen

Störstelle motivieren: Dort wird die Mittelung mit $\boldsymbol{P}$ durch eine einfache thermodynamische Mittelung bezüglich $H_{\text{Band}}$ ersetzt, bei der das Wick-Theorem anwendbar ist. Die im Falle eines Störstellengitters hinzutretenden kumulantischen Beiträge beschreiben also die Abweichung des effektiven von einem tatsächlichen Einstörstellenmodell.

Nimmt man die Selbstenergieentwicklung (2.10) und die Kumulantenentwicklung (2.11) zusammen, so erhält man in der betrachteten Ordnung für ein anfänglich besetztes $f$-Niveau die beiden folgenden Beiträge

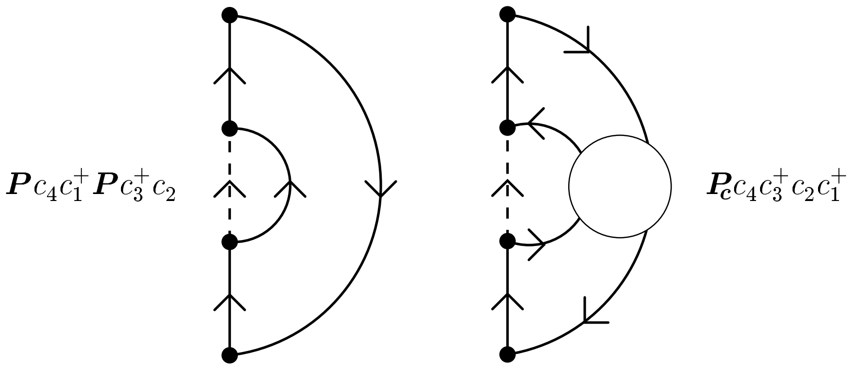



**Abbildung 2.3** Beiträge $\mathcal{O}(V^4)$ zur Selbstenergie

Die beschriebene Vorgehensweise läßt sich analog in allen Ordnungen fortsetzen. Dabei entstehen neben den Paarkontraktionen kumulantische Beiträge höherer Ordnung.

Um nun zu einer geschlossenen Theorie zu gelangen, muß eine Methode angegeben werden, wie der effektive lokale Propagator

$$\tilde{G}_c(\tau) := \boldsymbol{PT} c(\tau) c^+$$

zu berechnen ist. Dabei gilt es, die entstehenden, unterschiedlichen räumlichen Korrelationen – einschließlich der soeben beschriebenen Kumulanten – nach ihrer Bedeutung in hohen Dimensionen abzuschätzen.

Die zunächst vorzunehmenden Näherungen, die für hohe Dimensionen exakt werden, führen auf den folgenden Ausdruck für $\tilde{G}_c$:

$$\tilde{G}_c = g_{00} + \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{\substack{\{x_1,\ldots,x_l\} \\ x_k \neq x_m \forall k,m=0\ldots l+1}} g_{0x_1}\, T\, g_{x_1x_2}\, T\, \ldots T\, g_{x_l0} \tag{2.12}$$

mit $T = V^2 G_f$ und der Konvention $x_0 = x_{l+1} = 0$. Dieser beschreibt eine Reihe von Elektronpropagationen durch das Gitter, wobei alle auftretenden intermediären Gitterplätze voneinander und vom Ausgangsplatz verschieden sein müssen.

Die Überlegungen, die zu diesem Ausdruck führen, finden sich bei Kojima, Kuramoto und Tachiki (1984) und sollen hier kurz zusammengefaßt werden. Für diese Argumentation müssen alle Ausdrücke, die eine Mittelung über das Restgitter $H_{\mathrm{N}-1}$ enthalten, in lokale Vertexteile und ungestörte Elektronpropagationen $g_{xy}$ zwischen verschiedenen Gitterplätzen entwickelt werden. In diesem Bild können nun die folgenden Näherungen vorgenommen werden. (Eine detailliertere Begründung ergibt sich mit den Skalierungs- und Zählargumenten, wie sie in Abschnitt 3.3 entwickelt werden.)

- Die Beiträge aller *Kumulanten* verschwinden im Grenzfall $d \to \infty$. Der Entwicklung der Viererkumulante $\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{c}}\boldsymbol{T} c_4^+ c_3 c_2^+ c_1$ aus Bild 2.3 z.B. entsprechen in $\mathcal{O}(V^4)$ die folgenden Gitterprozesse:

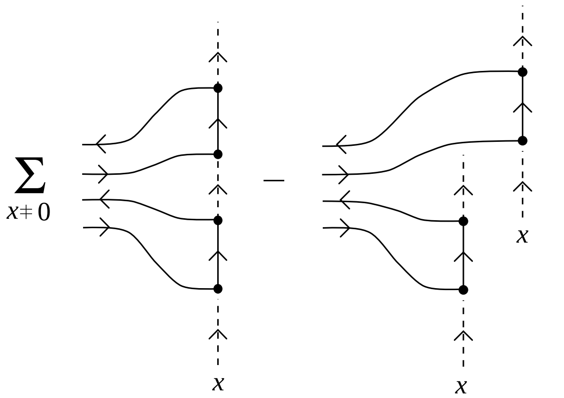



**Abbildung 2.4**

Deren Verschwinden im Limes $d \to \infty$ läßt sich anhand des an späterer Stelle (3.5) näher diskutierten Skalierungsverhaltens des freien Elektronenpropagators nachweisen.

- Mehrfachverbindungen zu einem Gitterplatz der Form

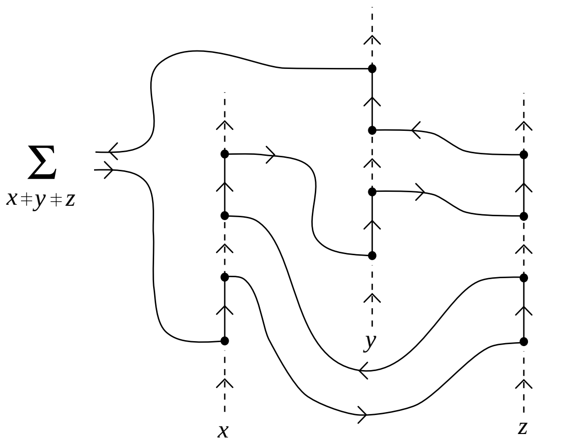



**Abbildung 2.5**

verschwinden ebenfalls für $d=\infty$ mit analogen Argumenten.

- Durch das Einsetzen der Streumatrix $T$ werden auch Gitterprozesse erzeugt, bei denen *Überzählungen* von Gitterplätzen auftreten. Als Beispiel diene die folgende Abbildung

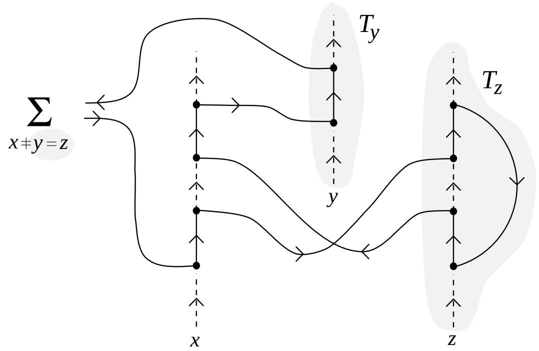



**Abbildung 2.6**

Diese sind wieder in $d=\infty$ vernachlässigbar.

- Durch Herausnahme des einzelnen Gitterplatzes (0) verliert das Restsystem seine Translationsinvarianz. Die lokalen Streumatrizen sind somit nicht mehr ortsunabhängig und müßten mit $T_x$ bezeichnet werden. Die Abweichung von der für den Gitterplatz 0 berechneten Streumatrix ist aber wieder von der Ordnung $\frac{1}{d}$ und somit zu vernachlässigen.

- Schließlich bleibt bei einer Störungsentwicklung noch das Problem zu beachten, daß ein etwaiges Linked-Cluster-Theorem im Gitter seine Gültigkeit verliert. Unverbundene Teilprozesse, sogenannte „Vakuumprozesse", lassen sich nicht mehr aus Zähler und Nenner einer Störungsentwicklung herauskürzen. Daß die Vernachlässigung von Vakuumprozessen dennoch in unendlichen Raumdimensionen zu einem korrekten Ausdruck führt, läßt sich daraus ablesen, daß die im übrigen vollständige Berechnung aller Beiträge der Ordnung $\mathcal{O}(1)$ der XNCA zu einer geschlossenen Theorie führt, welche zu der später im Hilfsfeldformalismus abgeleiteten $d=\infty$-Störungstheorie *äquivalent* ist (s. Abschnitt 2.4.3). Letztere erweist sich ebenfalls als bezüglich des räumlichen Anteils exakte Theorie des unendlichdimensionalen Andersonmodells.

Nach der Eliminination aller Beiträge, die in $d=\infty$ offensichtlich verschwinden, bleibt als zentraler Ausdruck für die Beschreibung der räumlichen Korrelationen im unendlichdimensionalen Andersongitter die Gittersumme (2.12). Sie enthält die nicht-lokalen Korrelationen des Andersongitters in Form des in Kapitel 3 näher zu untersuchenden Excluded-Volume-Effektes und muß ebenfalls in einer kontrollierten Näherung bestimmt werden.

Kim, Kuramoto und Kasuya (1990) geben hierzu die folgende Lösung an. Sie schlagen eine Skalierung des reduzierten freien Bandpropagators

$$\bar{g}_{xy} := g_{xy} - g_{00}\delta_{xy}$$

mit dem Faktor $\frac{1}{z_n}$ vor und berechnen die Gittersumme bis zur *ersten Ordnung* in $\frac{1}{z_n}$ nach einer Methode von Brout (1960,1961) zur Summation in Spinsystemen mit dem Ergebnis

$$\tilde{G}_c(z) - g_{00} =: \gamma(z)/t(z) = \left\langle \frac{\bar{g}_k(z)}{1 + \gamma(z) - t(z)\bar{g}_k(z)} \right\rangle \tag{2.13}$$

Die Skalierungsargumentation an dieser Stelle ist jedoch in mehrfacher Hinsicht inkonsistent:

- Das Skalenverhalten des ungestörten Propagators $g_{xy}$ läßt sich nicht willkürlich mit $\frac{1}{z_n}$ festlegen, wenn $z_n$ eine konkrete Bedeutung als Zahl nächster Nachbarn haben soll.
- Wird die Skalierung unabhängig von der Sprungweite $\delta(x, y)$ vorgenommen, so erhält man divergierende Beiträge von Sprüngen zu entfernteren Gitterplätzen, da deren Zahl exponentiell mit dem Abstand ansteigt. (Dieses Argument wird im folgenden Kapitel noch in konkreterem Zusammenhang diskutiert werden.)
- Um eine nichttriviale Bestimmungsgleichung für das effektive Band der Form (2.13) zu erhalten, müssen Beiträge der Ordnung $\mathcal{O}(\frac{1}{z_n})$ berücksichtigt werden, so daß für unendliche Raumdimensionen eine verschwindende Korrektur resultieren würde.

Dennoch ist die so erzielte Bestimmmungsgleichung (2.13) in ihrer algebraischen Form korrekt. Sie läßt sich bei Identifikation von $\frac{1}{d}$ als korrektem Skalierungsparameter im Grenzfall $d \to \infty$, also in der Ordnung $\mathcal{O}(\frac{1}{d^0})$ ableiten. Eine ausführliche Analyse dieser Ableitung – in einem etwas allgemeineren Rahmen – wird Gegenstand des Abschnittes 3.3 sein.

Man muß also festhalten, daß die XNCA in ihrer ursprünglichen Formulierung die zentrale Bedeutung der Raumdimension als Kontrollparameter noch nicht erkannt hat, und daher mit einer vage belassenen „effektiven Zahl von Nachbarn“ argumentiert. Der Kern einer korrekten $\frac{1}{d}$-Entwicklung des Excluded-Volume-Problems ist in ihr jedoch schon enthalten.

In Kapitel 3 wird daher ausführlich diskutiert, wie der Grenzfall unendlicher Dimensionen und damit der Kontrollparameter $\frac{1}{d}$ für eine Berechnung der Gittersumme korrekt zu behandeln sind. Die Bedeutung der räumlichen Korrelationen und damit der Excluded-Volume-Effekt wird dort sowohl im Rahmen der XNCA als auch dem daraus abgeleiteten, stark vereinfachenden Modell des Self-avoiding Walks untersucht werden.

### 2.4.2 Die LNCA

Auch die LNCA führt zu einer Näherung des Gitters durch ein effektives Single-Impurity-Modell. Sie unterscheidet sich aber in mehreren Aspekten von der XNCA:

1. Störungstheoretischer Ausgangspunkt ist eine Entwicklung nach der *Hybridisierung an allen Gitterplätzen*, d.h. eine Aufteilung des Hamiltonoperators gemäß

$$H_{\mathrm{PAM}} = \underbrace{H_{\mathrm{Band}} + \sum_x H_f^{(x)}}_{=:\,H_0} + \underbrace{\sum_x H_{\mathrm{Hyb}}^{(x)}}_{=:\,H'} \tag{2.14}$$

   Dadurch müssen Hybridisierungsprozesse an allen Gitterplätzen einbezogen werden. Hierzu wird eine Erweiterung der für das Einstörstellenproblem formulierten Resolventenmethode auf ein Gittersystem erforderlich. Eine solche findet sich bei Grewe und Keiter (1981) beschrieben. Detaillierte Ableitungen sind auch bei Schönenberg (1989) und Leuders (1994) zu finden.

2. Erst ein „Aufschneiden“ von korrelierten Prozessen führt zu einer effektiven Single-Site-Theorie. Dabei bezieht sich die LNCA zunächst auf die Zustandssumme des Gittersystems, was zu leichten Abwandlungen der resultierenden Gittersumme führt. Diese werden weiter unten kurz erläutert.

3. Die Vorgehensweise beim Entkoppeln der korrelierten, simultanen Prozesse auf mehreren Gitterplätzen wird bei Grewe (1987) systematisch erläutert. Allerdings ist die Entscheidung für die willkürliche Entkopplung bestimmter Prozesse durch die pragmatischen Zielsetzung der Formulierung einer effektiven Single-Impurity-Theorie begründet, und wird noch nicht auf einen Kontrollparameter wie etwa die inverse Raumdimension bezogen.

4. Die nicht-lokalen Korrelationen werden auch in der LNCA durch eine Gittersumme mit Gitterplatzausschluß beschrieben. Das Excluded-Volume-Problem wird jedoch nicht weiter analysiert, sondern eine einfache Näherung für die Gittersumme angegeben. Im Gegensatz zur XNCA führt diese Näherung nicht auf eine exakte Lösung des Excluded-Volume-Problems in unendlichen Dimensionen. Inwiefern sie in endlichen Dimensionen dennoch zu relevanten Ergebnissen führen kann, wird im Abschlußteil der Arbeit diskutiert werden. Hierzu wird dann die in Kapitel 3 vorzunehmende Analyse von räumlichen Korrelationen in unendlichen Dimensionen Kriterien liefern.

Die prinzipielle Vorgehensweise der LNCA soll anhand der beiden folgenden Abbildungen illustriert werden. Die erste zeigt einen typischen störungstheoretischen Beitrag zu $\mathcal{Z}$, an dem drei Gitterplätze beteiligt sind.

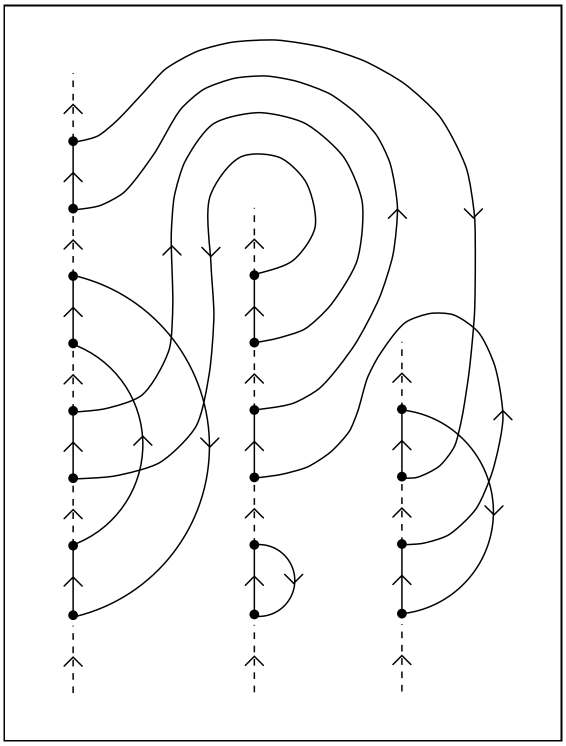


**Abbildung 2.7** Beitrag zu $\mathcal{Z}$ im Andersongitter

Die Korrelationen zwischen den Gitterplätzen drücken sich dadurch aus, daß die Energievariablen der Zwischengittersprünge voneinander abhängen. Läßt man diese Abhängigkeit näherungsweise unberücksichtigt, so läßt sich die Zustandssumme als Produkt effektiver Einstörstellen-Zustandssummen $\tilde{\mathcal{Z}}_1$ darstellen:

$$\mathcal{Z} = (\tilde{\mathcal{Z}}_1)^N$$

Dies geschieht durch die folgendermaßen definierte Näherung des Gitterbeitrags:

- Man identifiziert geschlossenene Ringe von Elektronenpropagationen, die sich auch über mehrere Gitterplätze erstrecken können, („one particle rings“) und zieht diese auf jedem Gitterplatz, den sie berühren („local attachment“) zusammen.
- Die lokale Bandpropagation wird mit den Streuprozessen auf den anderen Gitterplätzen renormiert, was graphisch durch einen offenen Kreis symbolisiert wird.
- Da ein geschlossener Ring, der $l$ Gitterplätze berührt, hierbei $l$-fach überzählt würde, gewichtet man ihn mit dem Faktor $\frac{1}{l+1}$.

Wendet man dies auf den in Abbildung 2.7 dargestellten Prozeß an, so erhält man in graphischer Darstellung das folgende Ergebnis:

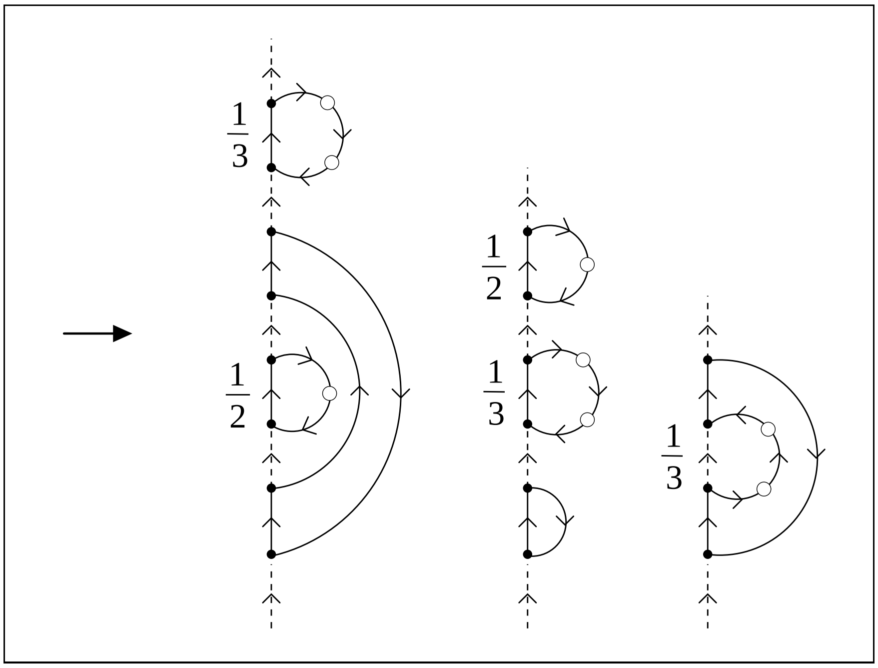



**Abbildung 2.8** Aufschneiden und Renormieren in der LNCA

Auf diese Weise ersetzt die LNCA den lokalen Bandpropagator $G_c$ durch einen effektiven Bandpropagator $\tilde{G}_c$, der wiederum von der lokalen Streumatrix $T = V^2 G_f(z)$ des effektiven Einstörstellenmodells abhängt

$$\tilde{G}_c = g_{00} + \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{\substack{\{x_1,\ldots,x_l\} \\ x_k \neq x_m \forall k,m=0\ldots l+1}} \tfrac{1}{l+1}\, g_{0x_1}\, T\, g_{x_1x_2}\, T \ldots T\, g_{x_l0} \tag{2.15}$$

mit $x_0 = x_{l+1} = 0$, bzw. in graphischer Darstellung

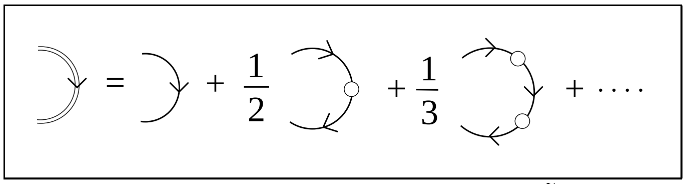



**Abbildung 2.9** Der effektive Propagator $\tilde{G}_c$ in der LNCA

Das lokale effektive Einstörstellenproblem löst die LNCA wiederum im Rahmen der durch die NCA definierten Näherung.

Trotz des unterschiedlichen Zugangs von XNCA und LNCA bleibt als einziger formaler Unterschied im Ergebnis der Vorfaktor $\frac{1}{l+1}$, der auf die Tatsache zurückzuführen ist, daß die LNCA ein Näherungsverfahren für die Zustandssumme ist, während die XNCA die lokale f-Greenfunktion zum Ausgangspunkt macht. Formal ist jedoch der Unterschied zwischen den beiden Gittersummen (2.12) und (2.15) nicht sehr groß. Wie bei Keiter, Leuders, Melsheimer und Schönenberg (1995) gezeigt wurde, lassen sich beide Verfahren leicht durch Einführung eines formalen Parameters $\lambda$ auf gemeinsamer Basis behandeln. Die Gittersumme schreibt sich dann

$$\tilde{G}_c(\lambda) = g_{00} + \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{\substack{\{x_1,\ldots,x_l\} \\ x_k \neq x_m \forall k,m=0\ldots l+1}} g_{0x_1}\, \lambda\, T g_{x_1x_2}\, \lambda T \ldots \lambda T\, g_{x_l0} \tag{2.16}$$

was einer Ersetzung der Form $\tilde{G}_c(\lambda) := \tilde{G}_c(T \to \lambda T)$ entspricht. Damit gelten nämlich die exakten Darstellungen

$$\tilde{G}_c^{\mathrm{XNCA}} = G(\lambda = 1) \tag{2.17}$$

$$\tilde{G}_c^{\mathrm{LNCA}} = \int_0^1 d\lambda\, G(\lambda) \tag{2.18}$$

so daß sich die Bestimmung des effektiven Bandes für beide Verfahren im wesentlichen mit denselben Methoden durchführen läßt.

Die LNCA in ihrer ursprünglichen Formulierung nach Grewe (1987) führt keinerlei Überlegungen zur Bedeutung des Limes $d = \infty$ in den soeben beschriebenen Näherungen aus. Auch bei der Berechnung der Gittersumme wird das Excluded-Volume-Problem in *einfachster Näherung* dadurch berücksichtigt, daß allein die *sofortige Rückkehr* ausgeschlossen wird

$$\tilde{G}_c(\lambda) \simeq g_{00} + \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{\substack{\{x_1,\ldots,x_l\} \\ \boldsymbol{x_m \neq x_{m+1}} \forall m=0\ldots l-1}} g_{0x_1} \lambda T g_{x_1x_2} \lambda T \ldots \lambda T g_{x_l0}$$

mit $x_0 = x_{l+1} = 0$. Diese sogenannte „Nachbarindexnäherung“(nia) läßt sich leicht explizit auswerten[6]

$$\tilde{G}_c^{<\text{nia}>}(\lambda) = g_{00} + \left\langle \frac{g_k - g_{00}}{1 - \lambda T(g_k - g_{00})} \right\rangle \tag{2.19}$$

so daß sich für die LNCA mittels (2.18) der bei GREWE (1987) [3.4] angegebene Ausdruck ergibt

$$\tilde{G}_c^{\text{LNCA}} = g_{00} - T^{-1} \langle \ln(1 - T(g_k - g_{00})) \rangle \tag{2.20}$$

Die numerischen Resultate, die sich bei dieser Behandlung des Excluded-Volume-Effektes ergeben, werden in Kapitel 6 mit anderen Verfahren verglichen. Eine Beurteilung dieser Methode wird mit Blick auf die allgemeinen Ergebnisse des Kapitels 4 zum Excluded-Volume-Problem im Abschlußkapitel stattfinden.

### 2.4.3 Die Hilfsfeldformulierung

Ein weiterer Zugang zur Beschreibung des Andersongitters wurde von HÜLSENBECK und QIN (1994) angegeben. Hierbei handelt es sich ebenfalls um eine Abbildung auf ein effektives Single-Impurity-Problem, das mittels NCA näherungweise gelöst wird. Formal wird hier mit dem sogenannten *Hilfsfeldformalismus* gearbeitet, (vgl. z.B. BRANDT und MIELSCH (1989)) und der auf BAYM und KADANOFF zurückgeht. Das Hilfsfeld $\lambda$ und die effektive Bandgreenfunktion $\tilde{G}_c$ stehen in der Beziehung

$$\tilde{G}_c = \frac{1}{z - \lambda} \tag{2.21}$$

Aus den Bewegungsgleichungen folgen die Relationen

$$G_c = \frac{1}{z - \lambda - V^2 \tilde{G}_f}\,, \quad \tilde{G}_f = \frac{1}{z - \epsilon_f - \Sigma_f - V^2 \tilde{G}_c} \tag{2.22}$$

mit der Selbstenergie $\Sigma_f$ gemäß

$$G_f = \frac{1}{z - \epsilon_f - \Sigma_f} \tag{2.23}$$

Für den Fall $d{=}\infty$ wird nun mit der sogenannten „lokalen Näherung“ argumentiert. Diese postuliert die *$k$-Unabhängigkeit der $f$-Selbstenergie*, die in $d{=}\infty$ exakt wird (vgl. MÜLLER-HARTMANN (1989)). Dann erhält man die Selbstkonsistenzbedingung

$$G_c = \left\langle \frac{1}{z - \omega - V^2 \tilde{G}_f} \right\rangle \tag{2.24}$$

[6]Die Mittelung $\langle \ldots \rangle$ wird im folgenden Kapitel näher erläutert.

Dieser Satz von Gleichungen bestimmt das $\tilde{G}_c$, das als effektives Band in die NCA eingeht. Nach einem Hinweis von H. KEITER erweisen sie sich als völlig äquivalent zur XNCA, was man erkennt, wenn man nacheinander alle „Hilfsgrößen" eliminiert. Die Gleichungen (2.21) bis (2.23) implizieren die einfachen Bewegungsgleichungen

$$G_f = \tilde{G}_f + G_f V^2 \tilde{G}_c \tilde{G}_f \quad \text{und}$$

$$G_c = \tilde{G}_c + G_c V^2 \tilde{G}_f \tilde{G}_c \quad \text{bzw.} \quad G_c = \tilde{G}_c + \tilde{G}_c V^2 G_f \tilde{G}_c$$

Damit läßt sich das gesuchte $\tilde{G}_c$ bestimmen

$$\tilde{G}_c = \frac{G_c}{1 + V^2 G_f} = \left\langle \frac{g(\omega)}{(1 + V^2 G_f \tilde{G}_c)(1 - V^2 \tilde{G}_f g(\omega))} \right\rangle \tag{2.25}$$

mit $g(\omega) = \frac{1}{z-\omega}$. Dies ist wegen $\tilde{G}_f(1 + V^2 G_f \tilde{G}_c) = G_f$

$$\tilde{G}_c = \left\langle \frac{g(\omega)}{1 + V^2 G_f(\tilde{G}_c - g(\omega))} \right\rangle \tag{2.26}$$

und damit identisch mit der Bestimmungsgleichung der XNCA, wie sie in Kapitel 5 abgeleitet werden wird. Alle numerischen Resultate dieses Ansatzes werden bei Wahl derselben Parameter also mit denen der XNCA übereinstimmen.

# Kapitel 3

# Das Excluded-Volume-Problem bei Gitterwegen in hohen Raumdimensionen

Im vorangegangenen Kapitel war aus der störungstheoretischen Behandlung des Andersongitters als zentrale Gleichung für das *periodische Störstellengitter* ein Ausdruck für eine Summe über Gitterwege (2.12) hervorgegangen. Um Aussagen über die durch diesen Term beschriebenen räumlichen Korrelationen zu erhalten, soll er an dieser Stelle innerhalb des größeren Kontextes der *Self-avoiding Walks* untersucht werden.

Nach einer Analyse der Verwandtschaft der beiden Systeme „Andersongitter“ und „Self-avoiding Walk“ und der Definition eines für die Zwecke dieser Arbeit benötigten *verallgemeinerten Self-avoiding Walks* wird im Hauptteil des Kapitels eine aktuelle Technik zur Behandlung von Self-avoiding Walks in hohen Dimensionen, die sogenannte *Lace-Entwicklung*, angewendet. Die Ergebnisse des Kapitels stellen sich in Form einer Entwicklung nach der inversen Raumdimension $\frac{1}{d}$ dar, deren nullte Näherung das System in unendlichen Raumdimensionen beschreibt.

Neben der dimensionalen Entwicklung der Gittersumme des Andersongitters, von der die Diskussion ausging und die in Kapitel 5 in ihren Konsequenzen weiter analysiert wird, ergibt sich auch die Möglichkeit, anhand der allgemeinen, formalen Ergebnisse dieses Kapitels Aussagen über den *zurückkehrenden Self-avoiding Walk* zu gewinnen. Hierbei wird sich herausstellen, daß in hohen Raumdimensionen beim *zurückkehrenden* Self-avoiding Loop im Gegensatz zum *offenen* Self-avoiding Walk nicht alle Korrelationen verschwinden. Eine genauere Analyse dieses bisher in der Literatur nicht beachteten Sachverhalts, aus dem man zudem Kenntnisse über räumliche Korrelationen im Andersongitter gewinnen kann, findet im Anschluß in Kapitel 4 statt.

## 3.1 Die Gittersumme und Self-avoiding Walks

Wesentliches Merkmal der verallgemeinerten Gittersumme[1,2]

$$G_{xy} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{x_1,\ldots,x_n}^{\neq} g_{xx_1} \cdot g_{x_1x_2} \cdot \ldots \cdot g_{x_{n-1}x_n} \cdot g_{x_ny} \tag{3.1}$$

ist der durch das Ungleichheitszeichen über dem Summenzeichen angedeutete paarweise Ausschluß von Indexgleichheiten:

$$\sum_{x_1,\ldots,x_n}^{\neq} := \sum_{\substack{x_1,\ldots,x_n \\ x\neq x_i\neq x_j\neq y \forall i\neq j}}$$

Man kann jeden einzelnen Summanden des obigen Ausdrucks als eine Folge von Sprüngen, ausgehend vom Gitterplatz $x$ über $x_1 \ldots x_n$ nach $y$ auffassen. In diesem Sinne repräsentiert jeder Summand einen *Random Walk* mit *beliebiger Schrittweite*. Der Ausschluß von Indexgleichheiten bedeutet dann, daß der Weg durchs Gitter niemals auf einen bereits besetzten Gitterplatz zurückkehren kann, also einen *Self-avoiding Walk* darstellt.

Der *klassische* Self-avoiding Walk, bei dem die Einzelschritte jeweils nur zu einem unmittelbar benachbarten Platz im kartesischen Gitter erfolgen, stellt gleichsam das Paradigma der durch (3.1) beschriebenen Systeme dar.

Die Schwierigkeit, eine solche, stark restringierte Summe auszuführen, läßt sich mit dem Schlagwort *Excluded-Volume-Problem* beschreiben. Dieses tritt immer dann auf,

[1] Die lokalen Streumatrizen $T$ werden hier unterdrückt, können aber ohne Schwierigkeiten in den Lösungsausdrücken wieder rücksubstituiert werden, so daß man aus dem hier definierten $G$ unmittelbar den effektiven Bandelektronenpropagator des Andersongitters zurückgewinnen kann (vgl. Abschnitt 5.1.2).

[2] Die Summation über Gitterplätze erstreckt sich immer über ein endliches, hyperkubisches Teilvolumen des kartesischen Einheitsgitters $R^d \subset \mathbb{Z}^d$ mit $N$ Zellen:

$$\sum_x := \sum_{x\in R^d}$$

Die Gitterkonstante $a$ wird formal gleich 1 gesetzt.

wenn es einem System verboten ist, eine Stelle im Raum (in diesem Fall einen Gitterplatz) mehrfach zu besetzen. Zu theoretischen Schwierigkeiten kommt es dabei erst, wenn man bei dem betrachteten System Wege *beliebiger Länge* berücksichtigen muß. Dies ist z.B. beim hier betrachteten Andersongitter der Fall, da eine möglichst vollständige Resummation der Gitterstörungsreihe angestrebt wird. Dann macht sich bemerkbar, daß der Platzausschluß eine *globale* Zwangsbedingung darstellt, die Korrelationen zwischen Teilstücken des Weges mit beliebigem Abstand erzeugt.

Ganz analoge Probleme stellen sich bei der Untersuchung des klassischen Self-avoiding Walks. Dieser dient gewöhnlich als fundamentales Modell für *lange, lineare Polymere in guten Lösungmitteln*[3] (Barber und Ninham (1970) [Kap.7,9,10], Slade (1994)). Die durch die Beschränkung auf *feste Bindungslängen* und ein *diskretes Raumgitter* stark vereinfachte Modellvorstellung ist unbedeutend für Größen, die sich auf das asymptotische Verhalten von *langen* Ketten beziehen, wie z.B. den Gyrationsradius eines realen Polymers. Der Self-avoiding Walk stellt somit den einfachsten Vertreter einer Universalitätsklasse mit denselben kritischen Eigenschaften dar.[4] Die aufgrund dieser Argumente interessierende Asymptotik des Self-avoiding Walks macht aber eine genauere Betrachtung der langreichweitigen Excluded-Volume-Korrelationen erforderlich.

Unter den zahlreichen Typen von korrelierten Random Walks (für eine Übersicht siehe Hughes (1995) [Kap.7]) sind die meisten mehr oder weniger starke Modifikationen des Self-avoiding Walks. Der Untersuchungsschwerpunkt der vorliegenden Arbeit ist der an seinen Ausgangspunkt zurückkehrende Self-avoiding Walk, der auch als *Self-avoiding Loop* (SAL) bezeichnet wird. Er stellt ein Modell für lange Polymer*ringe* in guten Lösungsmitteln dar. Seine Bedeutung im allgemeinen Kontext der Self-avoiding Walks wird im einleitenden Abschnitt von Kapitel 4 erläutert.

Der *Self-avoiding Loop* und sein nicht korrelierendes Pendant, der *Random-Loop*,

---

[3] In guten Lösungsmitteln werden die Wechselwirkungen zwischen den Monomeren unterbunden, und es verbleibt allein der Excluded-Volume-Effekt als Korrelationen erzeugende Wechselwirkung. Am sogenannten $\Theta$-*Punkt* kompensieren die attraktive Monomer-Monomer-Wechselwirkung und die Excluded-Volume-Abstoßung einander derart, daß Polymere in diesem Regime durch (freie) Random Walks beschrieben werden können.

[4] Eine kurze Übersicht bietet der Artikel von Slade (1994), eine ausführliche Bibliographie findet sich in dem umfassenden Werk von Hughes (1995).

werden am günstigsten anhand ihrer *erzeugenden Funktionen* untersucht:

| | Random Loop | Self-avoiding Loop |
|---|---|---|
| Anzahl der Loops der Länge $2n$ | $a_{2n}$ | $u_{2n}$ |
| erzeugende Funktion | $C(z) = \sum_{n=1}^{\infty} a_{2n} \frac{z^{2n}}{d^n}$ | $G(z) = \sum_{n=1}^{\infty} u_{2n} \frac{z^{2n}}{d^n}$ |

(3.2)

Hierbei ist zu beachten, daß im hyperkubischen Gitter nur Wege mit gerader Länge zum Ausgangspunkt zurückkehren können ($a_{2n+1} = u_{2n+1} = 0$ für $n \in \mathbb{N}_0$). Die in der Literatur nicht übliche Skalierung mit der inversen Raumdimension $\frac{1}{d^n}$ wurde gewählt, da in dieser Arbeit hohe Raumdimensionen von besonderem Interesse sind. Sie ändert nichts Wesentliches an den erzeugenden Funktionen ($G(z) \leftrightarrow G(\frac{z}{\sqrt{d}})$), ist aber eine günstigere Darstellung für den Grenzübergang $d \to \infty$. Da sich in 4.2.2 und 4.2.3 herausstellen wird, daß $a_{2n} \sim u_{2n} \sim d^n$, bleibt $G(z)$ beim Übergang zu unendlichen Raumdimensionen endlich.

Die Gittersumme (3.1) beinhaltet nun auf die im folgenden beschriebene, natürliche Weise bereits das Problem des klassischen Self-avoiding Walks. Als Einschrittpropagator wählt man

$$g_{xy} = \frac{z}{\sqrt{d}}\, \delta_{<x,y>} \quad \text{mit} \quad \delta_{<x,y>} = \begin{cases} 1 \text{ für } \delta(x,y) = 1 \\ 0 \text{ sonst} \end{cases} \tag{3.3}$$

Dieser läßt also nur Sprünge zwischen Gitterplätzen mit dem Abstand $\delta(x,y) = 1$ zu. Die *Metrik* $\delta$ auf dem kartesischen Raumgitter $\mathbb{Z}^d$ ist der *Betragssummennorm* zugeordnet:

$$\delta(x,y) = \|x-y\|_1 \qquad \text{mit} \qquad \|u\|_1 = \sum_{i=1}^{d} |u_i|$$

Sie definiert solche Gitterplätze als benachbart, die durch einen Schritt der Länge 1 längs der Koordinatenachsen erreichbar sind. Dabei wird zusätzlich für jeden Einzelschritt mit der rein formal eingeführten komplexen Variablen $z$ multipliziert. Auf diese Weise verbleiben in der Gittersumme nur die Summanden, bei denen die Folge der Indizes $x, x_1, \ldots$ einen Weg repräsentieren, bei dem die jeweils aufeinanderfolgenden Gitterplätze nächste Nachbarn sind. Damit ist das Pendant der Gittersumme (3.1) für den *geschlossenen* Self-avoiding Loop

$$G = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{x_1,\ldots,x_n}^{\neq} g_{0x_1} \cdot g_{x_1x_2} \cdot \ldots \cdot g_{x_{n-1}x_n} \cdot g_{x_n0} \tag{3.4}$$

identisch mit der durch (3.2) bereits definierten erzeugenden Funktion $G(z)$ des Self-avoiding Loops bzw. bei Aufheben der Restriktionen mit der des Random Loops $C(z)$.

Die im folgenden Abschnitt ausgeführten Berechnungen finden nun im Rahmen eines allgemeineren Random-Walk-Begriffes statt. Die Einzelschritte werden nicht mehr auf Sprünge zu nächsten Nachbarn beschränkt, sondern können sich beliebig weit über das Gitter erstrecken, wobei ihre „Sprungwahrscheinlichkeiten" vom Einschrittpropagator $g_{xy}$ des jeweiligen Problems kontrolliert werden. Wesentliche Anforderung an diesen ist das – speziell an zurückkehrende Wege angepaßte – *dimensionale Skalierungsverhalten* im Grenzübergang $d \to \infty$:

$$g_{xy} \sim d^{-\frac{\delta(x,y)}{2}} \tag{3.5}$$

Dieses Skalierungsverhalten erfüllen insbesondere der Propagator des klassischen Self-avoiding Walks (3.3) und der Bandelektronenpropagator (D.1) des Tight-Binding-Bandes (s. Anhang D). Die Überlegungen dieses Kapitels gelten aber für alle Gitterwege mit Einschrittpropagatoren, die gemäß (3.5) skalieren.

Eine weitere, wesentliche Bedingung für die folgenden Ausführungen ist die *Translationsinvarianz* des Problems, die sich in der *gitterperiodischen Translationsinvarianz* des Einschrittpropagators manifestiert[5]: $g_{y-x} := g_{xy} = g_{0,y-x}$. Hierdurch läßt sich das Problem günstig in den Fourierraum, d.h. in den Vektorraum des reziproken Gitters transformieren[6]. Dabei gelten die folgenden Transformationsformeln für eine gitterperiodisch translationsinvariante Matrix $A_{xy}$ und deren Fouriertransformierte $A_k$:

$$A_{xy} = \frac{1}{N} \sum_k e^{-ik(x-y)} A_k, \qquad A_k = \sum_x e^{ikx} A_{0x}$$

Mit dem Operator im Fourierraum

$$\langle A_k \rangle := \frac{1}{N} \sum_k A_k \tag{3.7}$$

der linear und normiert ist und damit alle Eigenschaften eines *Mittelungsoperators* besitzt, gilt

$$A_{xx} = A_{00} = \langle A_k \rangle \qquad \sum_{x_1,\ldots,x_{n-1}} A_{0x_1} \ldots A_{x_{n-1}0} = \langle (A_k)^n \rangle \tag{3.8}$$

[5]Nicht relevant hingegen ist die *Inversionssymmetrie* ($g_{xy} = g_{yx}$), die allerdings bei den hier vorliegenden Problemen gegeben ist und mitunter zu Vereinfachungen ausgenutzt wird.

[6]Enthält das endliche Gitter $R^d$ insgesamt $N = N_1 \ldots N_d$ Zellen, so erstreckt sich die $k$-Summation im Fourierraum über die $N$ Zellen der ersten Brillouinzone $\bar{\mathrm{R}}^d$, die z.B. als kartesisches Produkt der Mengen $\{2\pi \frac{n_i}{N_i} \,|\, n_i = 0, \ldots, N_i - 1\}$ gewählt werden kann. Im Grenzfall $N \to \infty$ ($\mathrm{R}^d = \mathbb{Z}^d$) geht die $k$-Summe in ein Integral über:

$$\frac{1}{N} \sum_{k \in \bar{\mathrm{R}}^d} \to \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{[0,2\pi]^d} d^d k \tag{3.6}$$

## 3.2 Die Lace-Entwicklung der Gittersumme

Die oben beschriebene Analogie der Anderson-Gittersumme mit dem Self-avoiding Walk auf hyperkubischen Gittern legt eine Behandlung mit Methoden nahe, wie sie in den letzten Jahren für den Self-avoiding Walk in hohen Dimensionen entwickelt wurden. Im folgenden wird daher eine Verallgemeinerung der in der mathematischen Physik bekannten *„Lace“*[7]*-Entwicklung* auf Gittersummen der obigen Form vorgestellt. Diese führt dann auf eine *exakte Bestimmung der Gittersumme in unendlichen Raumdimensionen* und eine *Berechnung aller Korrekturbeiträge erster Ordnung in der inversen Raumdimension.*

Die Lace-Entwicklung wurde erstmals von Brydges und Spencer (1985) eingeführt, um kritische Exponenten des *schwach wechselwirkenden* Self-avoiding Walks in hohen Dimensionen zu bestimmen. Hara und Slade (1992a/b) bewiesen im Rahmen ihrer Untersuchung des kritischen Verhaltens des „*klassischen*“ Self-avoiding Walks die Konvergenz der Lace-Entwicklung[8]. Seitdem gibt es im wesentlichen zwei unterschiedliche Zugänge.

Bei der ersten Methode (vgl. z.B. Madras und Slade (1993)) wird die für einfache Random Walks geltende Dysongleichung durch Einführung einer Selbstenergie auf Self-avoiding Walks erweitert. Diese Selbstenergie wird dann induktiv durch sukzessives Ein- und Ausschließen von Überkreuzungen entwickelt. Da dieser Zugang der intuitivere ist, soll er auch der im folgenden Abschnitt ausgeführten Verallgemeinerung zugrundeliegen.

Die zweite Methode ist die ursprünglich von Brydges und Spencer (1985) verwendete und hat eher algebraischen Charakter. Hierzu findet sich eine kurze Arbeit von Zeilberger (1997), in der er eine Axiomatisierung des „Lace“-Begriffes vornimmt und die Lace-Entwicklung so in einen allgemeineren Kontext stellt. Sie erweist sich damit als eine Verallgemeinerung des in der Kombinatorik wohlbekannten *Prinzips vom Ein- und Ausschluß.* Auch diese algebraische Formulierung läßt sich auf Gittersummen der Form (3.1) und (3.4) verallgemeinern. Anhang A stellt diesen alternativen, algebraischen Zugang in einer eleganten, diagrammatisch-kombinatorischen

[7] Die Bezeichnung ist inspiriert durch die Form der die Selbstenergien illustrierenden Diagramme, die einem mit „Spitze“ besetzten Stoffrand gleichen (s. z.B. Abb 3.1).

[8] Ein Konvergenzbeweis der in dieser Arbeit vorgestellten Verallgemeinerung der Lace-Entwicklung soll allerdings nicht geführt werden. Der (computerunterstützte) Originalbeweis von Hara und Slade erstreckt sich über zwei Arbeiten mit insgesamt über 130 Seiten und ist äußerst technisch.

Formulierung vor. Die Äquivalenz der beiden Methoden ergibt sich im übrigen daraus, daß sie im Ergebnis (auch diagrammatisch) identische Ausdrücke liefern.

Im folgenden soll nun ausgeführt werden, wie sich die Lace-Entwicklung, die in der bisherigen Literatur zum Abzählen von Self-avoiding Walks (mit ausschließlich Nächste-Nachbar-Sprüngen) verwendet wurde, allgemein zur Berechnung von Excluded-Volume-Gittersummen über adäquat skalierte Propagatoren (mit beliebiger Sprungweite) eignet.

Es sei zunächst mit $\Omega_n^0(x,y)$ die Menge aller möglicher Gitterwege (Random Walks, auch mit Selbstüberschneidungen), die in $n$ Schritten von $x$ nach $y$ gehen, bezeichnet. Dabei sind $x$ und $y$ Punkte im hyperkubischen Gitter $\mathrm{R}^d$ mit endlicher oder unendlicher Dimension $d \in \mathbb{N} \cup \{\infty\}$. In dieser verallgemeinerten Formulierung sind Schritte mit beliebiger Schrittweite zugelassen. Die Einschränkung auf Schritte nur zu nächsten Nachbarn wird durch die konkrete Wahl des Einschritt-Propagators $g(x,y)$ gesteuert (vgl. (3.3)).

Außerdem sei $\Omega^0(x,y) \coloneqq \bigcup_n \Omega_n^0(x,y)$. Mit $\Omega_n(x,y)$ und $\Omega(x,y)$ werden dann die analogen Mengen der Gitterwege ohne Selbstüberschneidungen (Self-avoiding Walks) benannt. Für $x = y$ enthalte $\Omega(x,x)$ nach Definition alle Gitterwege, die zu $x$ zurückkehren und die (mit der einzigen Ausnahme von $x$ selbst) keine Selbstüberschneidungen besitzen, also gerade die Self-avoiding Loops. Ein einzelner Weg $\omega \in \Omega_n^0(x,y)$ besteht dann aus den $n$ Schritten

$$\underbrace{\omega(0)}_{=x} \to \omega(1) \to \ldots \to \underbrace{\omega(n)}_{=y}$$

Zur Berechnung der Gittersumme (3.1) wird nun die bereits definierte erzeugende Funktion für die Propagation eines Self-avoiding Walks (3.1) vom Gitterplatz $x$ nach $y$ betrachtet

$$G_{xy} = \sum_{\omega \in \Omega(x,y)} g_{\omega(0)\omega(1)} \cdot \ldots \cdot g_{\omega(n-1)\omega(n)} \tag{3.9}$$

mit dem Einschrittpropagator $g_{xy}$ gemäß (3.3). In Matrixform wird dieser *Propagator* mit $\boldsymbol{G} = \{G_{xy}\}_{x,y \in \mathrm{R}^d}$ bezeichnet und trägt Information sowohl über zurückkehrende (SAL) als auch über nicht zurückkehrende Wege (SAW).

Zur bequemeren Darstellung der folgenden Rechnungen werden noch die beiden verwandten Propagatormatrizen $\bar{\boldsymbol{G}}$ und $\breve{\boldsymbol{G}}$ definiert

$$\bar{\boldsymbol{G}} \coloneqq \boldsymbol{G} - \langle \boldsymbol{G} \rangle \cdot \mathbf{1} \quad \text{und} \quad \breve{\boldsymbol{G}} \coloneqq \mathbf{1} + \bar{\boldsymbol{G}}$$

mit der Einheitsmatrix $\mathbf{1} = \{\delta_{xy}\}_{x,y\in\mathrm{R}^d}$ und dem durch $\langle \boldsymbol{A}\rangle = A_{00} = A_{xx}$ definierten Operator. Obwohl $\bar{\boldsymbol{G}}$ und $\breve{\boldsymbol{G}}$ keine Diagonalinformation besitzen ($\langle\bar{\boldsymbol{G}}\rangle = 0$, $\langle\breve{\boldsymbol{G}}\rangle = 1$), läßt sich aus ihnen, wie im Anschluß gezeigt werden wird, die gesuchte Gittersumme $G = \langle\boldsymbol{G}\rangle$ wiedergewinnen.

Die obigen Ausdrücke und die Propagatormatrix $\boldsymbol{g}$ des Einzelschrittes werden auf folgende Weise graphisch dargestellt:

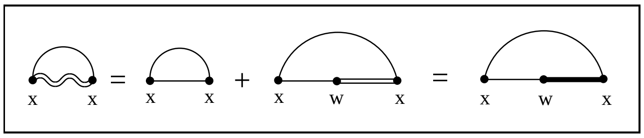
| Matrixform | Komponentenform | graphische Repräsentation |
|---|---|---|
| $\mathbf{1}$ | $\delta_{xy}$ | • |
| $\boldsymbol{g}$ | $g_{xy}$ |  |
| $\boldsymbol{G}$ | $G_{xy}$ |  |
| $\bar{\boldsymbol{G}}$ | $\bar{G}_{xy} = \begin{cases} G_{xy} & (x \neq y) \\ 0 & (x = y) \end{cases}$ |  |
| $\breve{\boldsymbol{G}}$ | $\breve{G}_{xy} = \begin{cases} G_{xy} & (x \neq y) \\ 1 & (x = y) \end{cases}$ |  |

Bemerkung:
Die drei Propagatoren $\boldsymbol{G}, \bar{\boldsymbol{G}}$ und $\breve{\boldsymbol{G}}$ unterscheiden sich nur in der Struktur ihrer Diagonalen. Die daraus resultierende unterschiedliche Bedeutung bei der (graphischen) Darstellung von Gitterwegen läßt sich wie folgt charakterisieren:

- $\boldsymbol{G}\rightarrow$ Am erreichten Gitterplatz werden alle möglichen Rückkehrprozesse eingeschoben.
- $\bar{\boldsymbol{G}}\rightarrow$ Beiträge, bei denen die Gitterplätze an beiden Enden des Propagators zusammenfallen, verschwinden.
- $\breve{\boldsymbol{G}}\rightarrow$ In Diagrammen kann der Propagator auch zur Länge null zusammenfallen.

Da die Lace-Entwicklung am einfachsten mit dem Propagator $\breve{\boldsymbol{G}}$ durchgeführt wird, muß noch gezeigt werden, wie man $\langle\boldsymbol{G}\rangle$ aus $\breve{\boldsymbol{G}}$ zurückgewinnt. Hier gilt der einfache Zusammenhang

$$G = \langle\boldsymbol{G}\rangle = \langle\boldsymbol{g} + \boldsymbol{g}\bar{\boldsymbol{G}}\rangle = \langle\boldsymbol{g}\breve{\boldsymbol{G}}\rangle$$




(3.10)

Das letzte Gleichheitszeichen gilt nach Definition von $\breve{\boldsymbol{G}}$, das erste erklärt sich daraus, daß die Ungleichheit x$\neq$w in der paarweisen Ungleichheit aller Punkte im Teilweg [w$\rightarrow$x] bereits enthalten ist.

Die Lace-Entwicklung der Excluded-Volume-Gittersumme vollzieht sich nun in Anlehnung an die Berechnung der *unrestringierten Gittersumme*. Bezeichnet man deren

Propagatoren analog mit $\boldsymbol{C}$ und $\breve{\boldsymbol{C}}$, so läßt sich die Gittersumme als Summe von Matrizenprodukten schreiben[9]

$$\breve{\boldsymbol{C}} = \mathbf{1} + \boldsymbol{g} + \boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{g} + \ldots = \sum_{n=0}^{\infty} \boldsymbol{g}^n = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{1} - \boldsymbol{g}}$$

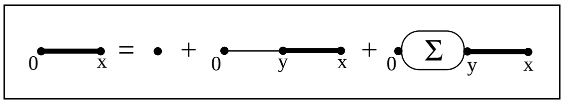
Dies kann man auch äquivalent aus der *Dysongleichung* $\breve{\boldsymbol{C}} = \mathbf{1} + \boldsymbol{g}\breve{\boldsymbol{C}}$ ablesen.

Für den Propagator des Self-avoiding Walks wird nun eine formale *Selbstenergie* $\boldsymbol{\Sigma}$ eingeführt, die den Random-Walk gleichsam durch „Excluded-Volume-Korrelationen" renormiert:

$$\breve{\boldsymbol{G}} = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{1} - \boldsymbol{g} - \boldsymbol{\Sigma}} \tag{3.11}$$

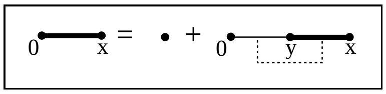
Dies entspricht der *Dyson-Gleichung*

$$\breve{\boldsymbol{G}} = \mathbf{1} + \boldsymbol{g}\breve{\boldsymbol{G}} + \boldsymbol{\Sigma}\breve{\boldsymbol{G}}$$




(3.12)

Versucht man, in dieser zunächst rein formalen Gleichung die Selbstenergie $\boldsymbol{\Sigma}$ des Self-avoiding Walks zu bestimmen, so ergibt sich das Problem, daß im Unterschied zum Random Walk der erste Schritt [0→y] mit dem Restweg [y→x] aufgrund der Bedingung $0 \notin$ [y→x] korreliert ist, was im Diagramm durch die gepunktete Linie ausgedrückt wird:



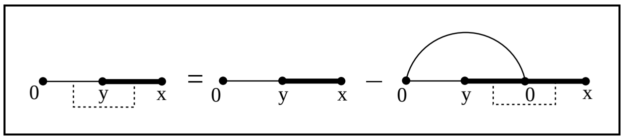

(I)

Diese *Korrelationslinie* macht eine Darstellung des Diagramms (I) in der Form $\boldsymbol{\Sigma}\cdot\breve{\boldsymbol{G}}$ wie in (3.12) unmöglich. Tilgt man jedoch diese Korrelation, so ergibt sich der folgende *Korrekturterm*: Es müssen alle Beiträge abgezogen wird, bei denen der Restweg an den Ursprung zurückkehrt ($0 \in$ [y→x]). Dazu wird [y→x] in die zwei Teilwege [y→0] und [0→x] aufgeteilt. Zwischen diesen ergeben sich aber wieder Korrelationen, da Gitterplatzgleichheiten zwischen beiden Teilwegen ausgeschlossen werden müssen. Dies wird durch eine gepunktete Linie angedeutet. Da der Punkt

[9] Die Summation über die gebundenen Indizes bei der Matrixmultiplikation entspricht gerade der Summation über Gitterplätze: $(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})_{xy} = \sum_{w\in\mathrm{R}^d} A_{xw}B_{wy}$. Ein Quotientenausdruck steht symbolisch für eine Matrixinversion ($\frac{1}{A} = A^{-1}$) und die Schreibweise $\frac{A}{B}$ für $AB^{-1}$ und $B^{-1}A$ ist wohldefiniert, solange $AB = BA$:

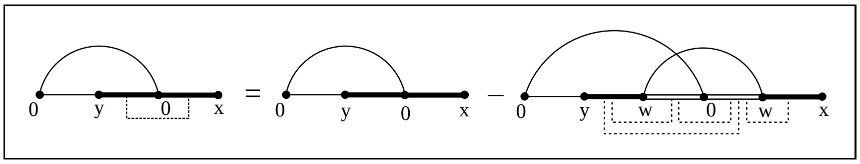
$$AB^{-1} = B^{-1}BAB^{-1} = B^{-1}ABB^{-1} = B^{-1}A$$

der Rückkehr zum Platz 0 auch schon bei y oder erst bei x möglich ist, muß der Propagator $\breve{\boldsymbol{G}}$ (und nicht $\bar{\boldsymbol{G}}$, der bei der Länge 0 verschwindet) eingesetzt werden. Als Ergebnis erhält man:



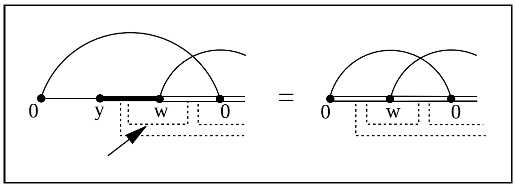

(II)

Der entstandene Korrekturterm kann aufgrund der Korrelationen des letzten Teilweges mit dem vorausgehenden Loop wieder nicht in die Selbstenergie aufgenommen werden. Ein Aufbrechen der Korrelationen führt zu den folgenden, weiteren Korrekturen: Es müssen alle Prozesse abgezogen werden, bei denen die Teilwege [y→0] und [0→x] einen oder mehrere gemeinsame Punkte enthalten. Sei mit w der <u>erste Platz</u> in [0→x] bezeichnet, der bereits von [y→0] besucht wurde (dieser Platz kann kein weiteres Mal besucht worden sein). Dann kann der Teilweg [0→w] bis zu diesem w mit [y→w] und [w→0] keine weiteren Plätze (außer w selbst) gemeinsam haben. Ebenso müssen beim Teilen eines Weges durch Einfügen des Punktes w die beiden entstandenen Teilwege jeweils als disjunkt angenommen werden. Dies begründet die in Diagramm (III) eingetragenen gepunkteten Linien. Allerdings können aufgrund der speziellen Wahl von w die Teilwegepaare ([y→w],[w→x]) und ([w→0],[w→x]) jeweils durchaus gemeinsame Plätze (außer w) enthalten, weshalb sich im Diagramm (III) für diese Teilwegepaare auch keine Ausschlußlinien finden. Die jeweilige Wahl des Propagators $\bar{\boldsymbol{G}}$ bzw. $\breve{\boldsymbol{G}}$ erklärt sich daraus, daß der gemeinsame Punkt w zwar mit x oder y zusammenfallen kann (d.h. y∈[0→x] oder x∈[y→0]), aber w≠0 gelten muß, da der Platz 0 innerhalb von [0→x] und [y→0] nicht wieder auftauchen kann. Die soeben beschriebene Korrektur stellt sich somit graphisch wie folgt dar:



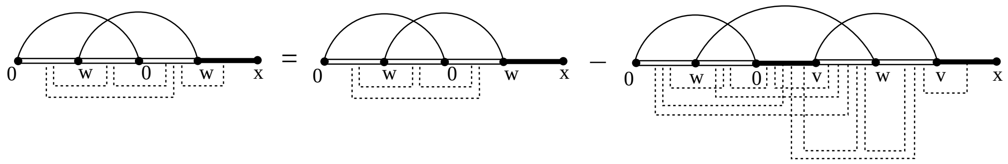

(III)

Bevor angegeben wird, wie nach dieser Methode fortzufahren ist, soll noch eine Vereinfachung der Darstellung vorgenommen werden. Die ersten beiden Propagatoren $\boldsymbol{g}\breve{\boldsymbol{G}}$ eines Diagramms der in (IIIa) dargestellten Form können durch ein $\bar{\boldsymbol{G}}$ ersetzt werden, da die Ungleichheit y≠0 durch die mit dem Pfeil gekennzeichnete Korrelationslinie bereits berücksichtigt wird.




(IIIa)

Beim weiteren Vorgehen wird nun in derselben Weise wie oben die „störende“ Korrelationslinie zwischen [0→w] und [w→x] (s. Diagramm (IV)) wieder aufgelöst und ein Korrekturdiagramm durch Einschub eines doppelt besuchten Gitterplatzes v ermittelt. Die unterschiedlichen Propagatoren $\bar{\boldsymbol{G}}$ und $\breve{\boldsymbol{G}}$ erklären sich wieder daraus, daß zwar v=0 und v=x eintreten kann, aber v≠w gelten muß.




(IV)

Führt man die Entwicklung nach der inzwischen deutlich gewordenen Methode weiter durch, so erhält man bei jedem Schritt neue Diagramme der Form $\boldsymbol{X}\breve{\boldsymbol{G}}$ und damit Beiträge zur Selbstenergie $\boldsymbol{\Sigma}$, die mit $\boldsymbol{\Sigma}_1, \boldsymbol{\Sigma}_2 \ldots$ bezeichnet seien. Das beschriebene Verfahren resultiert so in der folgenden Reihendarstellung der Selbstenergie:

$$\boxed{\boldsymbol{\Sigma} = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \boldsymbol{\Sigma}_n} \qquad \textit{Lace-Entwicklung} \tag{3.13}$$

Werden zur übersichtlicheren Darstellung die (gepunkteten) Korrelationslinien unterhalb des Diagramms noch zu Gruppen paarweiser Ungleichheit zusammengefaßt, so ergibt sich die graphische Darstellung der Laces gemäß Abbildung 3.1. Da leicht zu erkennen ist, wie die Reihe fortzusetzen ist, sei darauf verzichtet, die allgemeinen Diagrammregeln noch einmal explizit anzugeben.

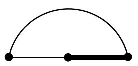
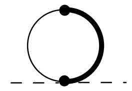
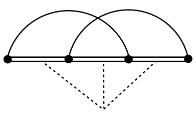
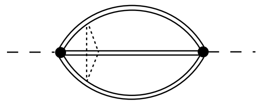
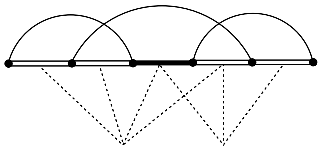
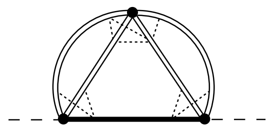
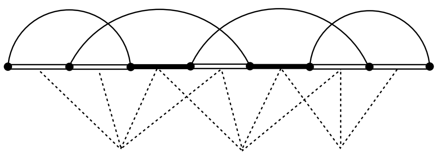
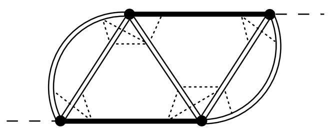
| Lace | Indexdarstellung | Gitterplatzdarstellung |
|---|---|---|
| $\boldsymbol{\Sigma}_1$ |  |  |
| $\boldsymbol{\Sigma}_2$ |  |  |
| $\boldsymbol{\Sigma}_3$ |  |  |
| $\boldsymbol{\Sigma}_4$ |  |  |

**Abbildung 3.1** Laces in unterschiedlicher Darstellung

Man beachte, daß die Excluded-Volume-Korrelationen zwischen den Teilwegen nicht beliebig weit über das Diagramm reichen, sondern sich maximal zum drittnächsten Teilweg erstrecken.

Für eine Diskussion der Dimensionalität der $\mathbf{\Sigma}_n$ ist ein Wechsel von der Indexdarstellung entlang der Teilsprünge zu einer Gitterplatzdarstellung günstig. Diese entsteht durch Zusammenziehen der Laces entlang ihrer Gleichheitslinien und ergibt die in der rechten Spalte von Abbildung 3.1 dargestellten Graphen.

## 3.3 Die Gittersumme in hohen Dimensionen

### 3.3.1 Dimensionales Skalenverhalten der Laces

Im folgenden soll gezeigt werden, welches Skalenverhalten die einfachsten Laces im Limes hoher Raumdimension $d$ haben. Dabei wird sich herausstellen, daß die Lace-Entwicklung zwar nicht Term für Term einer Entwicklung nach $\frac{1}{d}$ entspricht, wohl aber ein günstiger Ausgangspunkt für eine Identifikation der Beiträge in $\mathcal{O}(1)$ und $\mathcal{O}(\frac{1}{d})$ in der dimensionalen Entwicklung der Greenfunktion $\boldsymbol{G}$ ist. [10]

Zunächst ist festzustellen, daß das Skalenverhalten der Greenfunktion $\boldsymbol{C}$ eines *nicht-restringierten* Random-Walks in hohen Dimensionen mit dem des Einschrittpropagators $g$ übereinstimmt[11]: $C_{xy} \sim g_{xy} \sim d^{-\frac{1}{2}\delta(x,y)}$. Die Einführung von Restriktionen durch Ausschließen von Selbstüberschneidungen ändert hieran nichts, und es ist leicht zu erkennen, daß $G = \langle \boldsymbol{G} \rangle \sim \frac{1}{d^0}$ gilt.

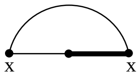
Damit ist auch bereits das dimensionale Skalenverhalten des ersten Laces $\mathbf{\Sigma}_1$ gefun-

[10] Im folgenden werden die drei Bezeichnungen $\mathcal{O}(1)$, $\mathcal{O}(\frac{1}{d^0})$ und $d = \infty$ synonym verwendet.

[11] Das Skalenverhalten des Propagators $\boldsymbol{g}$ folgt leicht aus dem an späterer Stelle (S.89) bewiesenen Satz.
Allgemein gilt: Skalieren die beiden gitterplatzindizierten Matrizen $A_{xy}$ und $B_{xy}$ gemäß $A_{xy} \sim B_{xy} \sim d^{-\alpha\delta(x,y)}$, so gilt für das Produkt (im Grenzfall $d \to \infty$ und mit $x \neq y$) $C_{xy} = \sum_z A_{xz} B_{zy} \sim d^{-\alpha\delta(x,y)}$ (vgl. z.B. Mielsch (1990), S.85f). Das behauptete Verhalten von $G_{xy}$ folgt dann durch Induktion. In Ergänzung hierzu ergibt sich für $x = y$ das folgende Verhalten:
– Für $\alpha \leq \frac{1}{2}$ divergiert die Summe.
– Für $\alpha \geq \frac{1}{2}$ gilt $C_{xx} \sim d^{-(2\alpha-1)\delta}$ mit einem $\delta = 0, 1, \ldots$ je nach Struktur der Matrizen $A$ und $B$. (Haben z.B. beide leere Diagonalen, so gilt $\delta = 1$.)
– Nur für $\alpha = \frac{1}{2}$ ist $C_{xx} = \mathcal{O}(1)$, und zudem tragen *alle* Summanden mit gleichem Gewicht zu diesem Skalenverhalten bei. Dieses Verhalten hängt unmittelbar mit der korrekten Skalierung der Hoppingstärke in unendlichdimensionalen Systemen zusammen.

den, denn durch Vergleich von Gleichung (3.10) und Abbildung 3.1 folgt $\mathbf{\Sigma}_1 = \langle \boldsymbol{G} \rangle$ und daher:

$$(\mathbf{\Sigma}_1)_{xx} = \langle \boldsymbol{g}\breve{\boldsymbol{G}} \rangle = \tag{3.14}$$

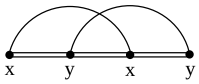



Insbesondere ist $\mathbf{\Sigma}_1$ *gitterplatzdiagonal*[12] und skaliert wie

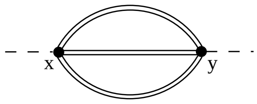
$$\mathbf{\Sigma}_1 \sim \frac{1}{d^0}$$

Das Skalenverhalten von $\mathbf{\Sigma}_2$ (s. Abbildung 3.1) erhält man, wenn man zunächst die Korrelationen *zwischen* den drei beteiligten Teilwegen vernachlässigt und nur die Korrelationen *innerhalb* der Teilwege berücksichtigt, indem man jeweils einen Self-avoiding Walk einsetzt. Der resultierende Beitrag sei mit $\mathbf{\Sigma}_2^{(1)}$ bezeichnet und lautet ausgeschrieben:

$$(\Sigma_2^{(1)})_{xy} = \left(\bar{G}_{xy}\right)^3 = \tag{3.15}$$




$$=$$




Er skaliert folglich gemäß

$$\Sigma_2^{(1)} \sim d^{-\frac{3}{2}\delta(x,y)}$$

Für $x = y$ verschwindet der Ausdruck, und für $x \neq y$ ist er relativ zu $g_{xy}$ von der Größenordnung $\mathcal{O}(\frac{1}{d})$, muß also bei der Auswertung in $d = \infty$ nicht berücksichtigt werden. Bezieht man nun die Korrelationen zwischen den drei Teilwegen wieder ein, so muß man $\Sigma_2^{(1)}$ um Prozesse korrigieren, bei denen die Teilwege Gitterpunkte gemeinsam haben, was jedoch unweigerlich zu einer höreren Ordnung in $\frac{1}{d}$ führt. Man kann also im Rahmen einer $\mathcal{O}(\frac{1}{d})$-Rechnung $\Sigma_2 \sim \Sigma_2^{(1)}$ annehmen.

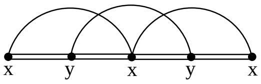
Das nächste Lace $\mathbf{\Sigma}_3$ (s. Abbildung 3.1) ist nun <u>nicht</u>, wie man erwarten würde, (relativ zu $\boldsymbol{g}$) von noch höherer Ordnung und trägt auch nicht erst im Falle einer $\mathcal{O}(\frac{1}{d^2})$-Rechnung relevant. Vielmehr muß man zwei Anteile unterscheiden, indem man bei der dritten Teilpropagation in $\mathbf{\Sigma}_3$ (vgl. Abbildung 3.1) den Propagator $\breve{\boldsymbol{G}}$ in $\mathbf{1} + \bar{\boldsymbol{G}}$ auflöst (wobei die Korrelationen zwischen den Teilwegen bei der Argumentation wieder keine Rolle spielen).

1. Der Anteil von $\mathbf{\Sigma}_3$, bei dem die beiden mittleren Gitterplätze zusammenfallen,

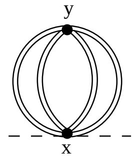
[12] Daß sich $\mathbf{\Sigma}_1$ als das einzige verbleibende Lace in $d = \infty$ herausstellen wird, spiegelt die wohlbekannte Tatsache wieder, daß die Selbstenergie analoger Gittersysteme in unendlichen Raumdimensionen im Fourierraum $k$-unabhängig wird.

ist gitterplatzdiagonal und sei mit $\mathbf{\Sigma}_3^{(1)}$ bezeichnet:

$$(\Sigma_3^{(1)})_{xx} = \sum_y \left(\bar{G}_{xy}\bar{G}_{yx}\right)^2 = \tag{3.16}$$




$=$




Sein Skalenverhalten ermittelt man gemäß

$$(\Sigma_3^{(1)})_{xx} \sim \sum_{\delta=1}^{\infty} \sum_{\{y\,|\,\delta(x,y)=\delta\}} \left(d^{-\frac{\delta}{2}}\right)^4 \sim \sum_{\delta=1}^{\infty} d^{\delta} \cdot d^{-2\delta} \sim d^{-1}$$

da die Zahl der Gitterplätze mit Abstand $\delta$ gemäß $d^{\delta}$ zunimmt:

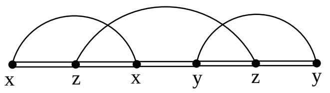
$$\sum_{\{x\,|\,\delta(0,x)=\delta\}} 1 \quad = \mathcal{O}(d^{\delta})$$

$\mathbf{\Sigma}_3^{(1)}$ muß bei einer $\mathcal{O}(\frac{1}{d})$-Rechnung also unbedingt berücksichtig werden.

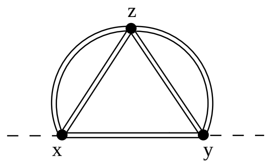
2. Der zweite Anteil von $\mathbf{\Sigma}_3$

$$(\Sigma_3^{(2)})_{xy} \quad = \quad \bar{G}_{xy} \sum_z \left(\bar{G}_{xz}\bar{G}_{zx}\right)\left(\bar{G}_{zy}\bar{G}_{yz}\right) \tag{3.17}$$

$=$




$=$




verschwindet hingegen für $x = y$ und skaliert (aufgrund ähnlicher Argumente) wie

$$(\Sigma_3^{(2)})_{xy} \sim \delta^{-\frac{5}{2}\delta} \qquad \text{mit } \delta = \delta(x,y)$$

Damit ist $\mathbf{\Sigma}_3$ relativ zu $\boldsymbol{g}$ also von der Ordnung $\mathcal{O}(\frac{1}{d^2})$ und bei einer $\mathcal{O}(\frac{1}{d^1})$-Rechnung zu vernachlässigen.

Für die weiteren Laces findet man mit analogen Argumenten, daß sie frühestens bei einer $\mathcal{O}(\frac{1}{d^2})$-Rechnung zu berücksichtigen sind. Eine einfache Fortsetzung der hier angestellten Überlegungen zur Ermittlung der Beiträge der Ordnung $\mathcal{O}(\frac{1}{d^2})$ und höherer Ordnungen wird allerdings dadurch erschwert, daß nun die Korrelationen *zwischen* den Teilwegen (z.B. in $\Sigma_2$) wieder berücksichtigt werden müssen. Ein einfaches Renormieren von Skelettdiagrammen ist daher nicht mehr möglich.

Zusammenfassend gilt für die ersten beiden Terme einer Entwicklung[13] von $\mathbf{\Sigma}$ nach

[13]Der obere Index (0) bzw. (1) an der Selbstenergie bzw. an allen Propagatoren bedeutet im folgenden immer, daß es sich um die nullten bzw. ersten Terme einer Entwicklung nach $\frac{1}{d}$ handelt (im Falle von Skelettdiagrammen vor dem Einsetzen der Propagatoren).

der inversen Raumdimension $\frac{1}{d}$:

$$\begin{aligned}\mathbf{\Sigma} &= \underbrace{-\mathbf{\Sigma}_1}_{} + \underbrace{\mathbf{\Sigma}_2^{(1)} - \mathbf{\Sigma}_3^{(1)}}_{} + \mathcal{O}(\tfrac{1}{d^2}) \\ &= \underbrace{\mathbf{\Sigma}^{(0)}}_{\sim \mathcal{O}(\frac{1}{d^0})} + \underbrace{\mathbf{\Sigma}^{(1)}}_{\sim \mathcal{O}(\frac{1}{d^1})} + \mathcal{O}(\tfrac{1}{d^2})\end{aligned} \tag{3.18}$$

Auf der Grundlage der dimensionalen Analyse der Laces läßt sich nun eine geschlossene Berechnungsformel für die Gittersumme im Fall unendlicher Raumdimensionen angeben. Das bedeutet, daß sich in $d=\infty$ die Excluded-Volume-Rückkehrprozesse (Self-avoiding Loops) mit Hilfe der Lace-Entwicklung vollständig aufsummieren lassen. Darüberhinaus wird im Anschluß das vollständige Korrekturglied erster Ordnung einer Entwicklung der Gittersumme nach $\frac{1}{d}$ berechnet.

Die Darstellung bleibt dabei im Rahmen der in diesem Kapitel benutzten, allgemeinen Formulierung von Gittersummen. Die konkrete Anwendung der Ergebnisse auf Self-avoiding Walks und die Gittersumme des Andersonmodells wird in eigenen Abschnitten der nachfolgenden Kapitel beschrieben.

### 3.3.2 Unendliche Dimensionen

In $d=\infty$ ist der Analyse des vorangegangenen Abschnittes zufolge von allen Laces allein $\mathbf{\Sigma}_1$ zu berücksichtigen, d.h. $\mathbf{\Sigma}^{(0)} = -\mathbf{\Sigma}_1$ für $d=\infty$. Da dieses $\mathbf{\Sigma}_1$ identisch mit der Greenfunktion der Gittersumme $G$ selbst ist (3.10), ergibt sich die Bestimmungsgleichung

$$\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)} = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{1} - (\boldsymbol{g} - \mathbf{\Sigma}_1)} = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{1} - (\boldsymbol{g} - G^{(0)})} \tag{3.19}$$

für den Propagator in $d=\infty$.[14] Äquivalent läßt sich dies für den nichtdiagonalen Propagator $\bar{\boldsymbol{G}}$ ausdrücken:

$$\bar{\boldsymbol{G}}^{(0)} = \frac{\boldsymbol{g} - G^{(0)}}{\mathbf{1} - (\boldsymbol{g} - G^{(0)})} \tag{3.20}$$

Aus (3.19) erhält man wegen $\langle \breve{\boldsymbol{G}} \rangle = 1$ bereits eine (*implizite*) Gleichung für den Diagonalteil $G^{(0)}$ des Propagators $\boldsymbol{G}^{(0)}$, also für die Greenfunktion des zurückkehrenden Gitterweges. Diese kann man (durch geeignetes Ergänzen des Zählers) auch noch weiter umformen und erhält:

$$\left\langle \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{1} - (\boldsymbol{g} - G^{(0)})} \right\rangle = 1 \qquad \text{und} \qquad \left\langle \frac{\boldsymbol{g} - G^{(0)}}{\mathbf{1} - (\boldsymbol{g} - G^{(0)})} \right\rangle = 0 \tag{3.21}$$

[14]Skalare wie $G^{(0)}$ in Matrixgleichungen wie (3.19) stehen immer als Abkürzung für die entsprechenden Diagonalmatrizen: $G^{(0)} \leftrightarrow G^{(0)} \cdot \mathbf{1}$.

Aus diesen beiden Ausdrücken – oder aber direkt mit $G = \langle \boldsymbol{g}\breve{\boldsymbol{G}} \rangle$ (3.11) – ergibt sich eine *selbstkonsistente* Bestimmungsformel für $G^{(0)}$

$$\boxed{G^{(0)} = \left\langle \frac{\boldsymbol{g}}{\mathbf{1} - (\boldsymbol{g} - G^{(0)})} \right\rangle} \tag{3.22}$$

Diese Form ist es auch, die den späteren Berechnungen zugrundeliegen wird.

### 3.3.3 Korrekturen erster Ordnung

Für die Bestimmung der Korrekturbeiträge der ersten Ordnung in der inversen Raumdimension sei die Gleichung (3.11) nach $\frac{1}{d}$ entwickelt. Dazu schreibt man den Propagator in der Form

$$\breve{\boldsymbol{G}} = \underbrace{\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)}}_{\mathcal{O}(1)} + \underbrace{\breve{\boldsymbol{G}}^{(1)}}_{\mathcal{O}(\frac{1}{d})} + \mathcal{O}(\tfrac{1}{d^2})$$

Zur entsprechenden Entwicklung der rechten Seite von (3.11) dient die folgende elementare Operatoridentität

$$\frac{1}{1-(A+B)} = \frac{1}{1-A} + \frac{1}{1-A}B\frac{1}{1-A} + \underbrace{\frac{1}{1-A}B\frac{1}{1-A}B\frac{1}{1-A} + \ldots}_{\mathcal{O}(B^2)}$$

Es sei nun der Nenner der rechten Seite von (3.11) auf die Form $1-(A+B)$ gebracht und so in $A$ und $B$ aufgeteilt, daß $A = \mathcal{O}(1)$ und $B = \mathcal{O}(\frac{1}{d^1})$ ist. Dazu sind folgende Punkte zu beachten:

1. $\boldsymbol{\Sigma}^{(0)} = -\boldsymbol{\Sigma}_1$ ist ein Funktional des zu renormierenden Propagators und als solches *linear*, d.h.

$$\boldsymbol{\Sigma}_1(\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)} + \breve{\boldsymbol{G}}^{(1)}) = \underbrace{\boldsymbol{\Sigma}_1(\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)})}_{\mathcal{O}(1)} + \underbrace{\boldsymbol{\Sigma}_1(\breve{\boldsymbol{G}}^{(1)})}_{\mathcal{O}(\frac{1}{d})}$$

2. Die zu $\boldsymbol{\Sigma}^{(1)}$ beisteuernden Laces $\boldsymbol{\Sigma}_2$ und $\boldsymbol{\Sigma}_3$ sind zunächst nicht einmal als Funktionale von Propagatoren darstellbar, denn zwischen den Teilpropagationen gibt es noch Excluded-Volume-Korrelationen (vgl. Abbildung 3.1). Diese können aber, wie oben erläutert, vernachlässigt werden, da sie zu Beiträgen höherer Ordnung führen. Die resultierenden Beiträge

$\boldsymbol{\Sigma}_2^{(1)}$ und $\boldsymbol{\Sigma}_3^{(1)}$ sind aber Funktionale (allerdings *nichtlineare*) von $\bar{\boldsymbol{G}}$ und werden zu $\boldsymbol{\Sigma}^{(1)}(\bar{\boldsymbol{G}})$ zusammengefaßt[15].

3. Da $\boldsymbol{\Sigma}^{(1)}$ nur in der Ordnung $\mathcal{O}(\frac{1}{d})$ ausgewertet werden muß, genügt es, dieses mit dem Propagator $\boldsymbol{G}^{(0)}$ zu renormieren, denn

$$\boldsymbol{\Sigma}^{(1)}(\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)} + \breve{\boldsymbol{G}}^{(1)}) = \boldsymbol{\Sigma}^{(1)}(\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)}) + \mathcal{O}(\tfrac{1}{d^2})$$

Die $\mathcal{O}(\frac{1}{d})$-Skalierungseigenschaft von $\boldsymbol{\Sigma}^{(1)}$ ist sozusagen in seine Struktur eingearbeitet und wird nicht durch den renormierten Propagator verändert.

Mit diesen Überlegungen erhält man für den Nenner $1-(A+B)$

$$\mathbf{1} - (\boldsymbol{g} + \boldsymbol{\Sigma}) = \mathbf{1} - \Big(\underbrace{\boldsymbol{g} + \boldsymbol{\Sigma}^{(0)}(\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)})}_{\mathcal{O}(1)} + \underbrace{\boldsymbol{\Sigma}^{(0)}(\breve{\boldsymbol{G}}^{(1)}) + \boldsymbol{\Sigma}^{(1)}(\bar{\boldsymbol{G}}^{(0)})}_{\mathcal{O}(\frac{1}{d})}\Big) + \mathcal{O}(\tfrac{1}{d^2})$$

und somit für $\breve{\boldsymbol{G}}$ bis zur ersten Ordnung in $\frac{1}{d}$

$$\begin{aligned} \breve{\boldsymbol{G}}^{(0)} + \breve{\boldsymbol{G}}^{(1)} = & \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{1} - (\boldsymbol{g} - \boldsymbol{\Sigma}_1(\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)}))} + \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{1} - (\boldsymbol{g} - \boldsymbol{\Sigma}_1(\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)}))} \cdot \\ & \cdot \Big(\boldsymbol{\Sigma}^{(0)}(\breve{\boldsymbol{G}}^{(1)}) + \boldsymbol{\Sigma}^{(1)}(\bar{\boldsymbol{G}}^{(0)})\Big) \cdot \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{1} - (\boldsymbol{g} - \boldsymbol{\Sigma}_1(\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)}))} + \mathcal{O}(\tfrac{1}{d^2}) \end{aligned} \tag{3.23}$$

Den ersten Summanden nach dem Gleichheitszeichen identifiziert man als $\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)}$ aus (3.19), und so erhält man

$$\breve{\boldsymbol{G}}^{(1)} = \breve{\boldsymbol{G}}^{(0)} \Big(-\boldsymbol{\Sigma}_1(\breve{\boldsymbol{G}}^{(1)}) + \boldsymbol{\Sigma}_2^{(1)}(\bar{\boldsymbol{G}}^{(0)}) - \boldsymbol{\Sigma}_3^{(1)}(\bar{\boldsymbol{G}}^{(0)})\Big) \breve{\boldsymbol{G}}^{(0)} \tag{3.24}$$

Die Korrektur zu $\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)}$ kann somit als **Streuung an einer „$\frac{1}{d}$-Störung“ des unendlichdimensionalen Gitters** aufgefaßt werden. Um aus dieser Formel einen Ausdruck für den noch zu bestimmenden Diagonalanteil von $\boldsymbol{G}$ zu erhalten, benutzt man wieder (3.10). Wegen der Linearität von $\langle \ldots \rangle$ erhält man $G^{(1)} = \langle \boldsymbol{g}\breve{\boldsymbol{G}}^{(1)} \rangle$ und somit

$$G^{(1)} = \Big\langle \boldsymbol{g}\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)} \Big(-\boldsymbol{\Sigma}_1(\breve{\boldsymbol{G}}^{(1)})\Big) \breve{\boldsymbol{G}}^{(0)} \Big\rangle + \Big\langle \boldsymbol{g}\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)} \Big(\boldsymbol{\Sigma}_2^{(1)}(\bar{\boldsymbol{G}}^{(0)}) - \boldsymbol{\Sigma}_3^{(1)}(\bar{\boldsymbol{G}}^{(0)})\Big) \breve{\boldsymbol{G}}^{(0)} \Big\rangle \tag{3.25}$$

Man erkennt wie oben, daß $\boldsymbol{\Sigma}_1(\breve{\boldsymbol{G}}^{(1)}) = G^{(1)}$ ist, und kann, da zudem $\boldsymbol{\Sigma}_1$ skalar ist, die Gleichung (3.25) ganz nach $G^{(1)}$ auflösen

$$G^{(1)} = \frac{\Big\langle \boldsymbol{g}\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)} \Big(\boldsymbol{\Sigma}_2^{(1)}(\bar{\boldsymbol{G}}^{(0)}) - \boldsymbol{\Sigma}_3^{(1)}(\bar{\boldsymbol{G}}^{(0)})\Big) \breve{\boldsymbol{G}}^{(0)} \Big\rangle}{1 + \Big\langle \boldsymbol{g} \cdot \Big(\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)}\Big)^2 \Big\rangle} \tag{3.26}$$

[15]Da $\bar{\boldsymbol{G}}$ und $\breve{\boldsymbol{G}}$ dieselbe Information tragen, kann man $\boldsymbol{\Sigma}_2^{(1)}$ und $\boldsymbol{\Sigma}_3^{(1)}$ wahlweise als Funktionale des einen oder anderen auffassen. Aus Eindeutigkeitsgründen seien hier die Formen $\boldsymbol{\Sigma}^{(1)}(\bar{\boldsymbol{G}})$ und $\boldsymbol{\Sigma}^{(0)}(\breve{\boldsymbol{G}})$ festgelegt, wie es der Darstellung der Diagramme in (3.16) und (3.17) entspricht.

Der somit gefundene Ausdruck für die $\mathcal{O}(\frac{1}{d})$-Korrektur der Gittersumme ist also ein explizites Funktional des Propagators $\bar{\boldsymbol{G}}^{(0)}$ in $d\!=\!\infty$. Allerdings hängt er auch von dessen Nichtdiagonalelementen, also den nicht-zurückkehrenden Gitterwegen ab.

Abschließend soll die der letzten Gleichung anhaftende Asymmetrie (zusätzliche Multiplikation mit $\boldsymbol{g}$ zu Beginn) noch eliminiert werden. Dazu dient die folgende, aus der Dysongleichung (3.12) abgeleitete, exakte Identität:

$$\boldsymbol{g}\breve{\boldsymbol{G}} = (1-\boldsymbol{\Sigma})\breve{\boldsymbol{G}} - \mathbf{1}$$

Da in der Ordnung $\mathcal{O}(1)$ die Identitäten $\boldsymbol{\Sigma}\!=\!\boldsymbol{\Sigma}^{(0)}\!=\!-\boldsymbol{\Sigma}_1(\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)})\!=\!-G^{(0)}$ gelten und $\boldsymbol{\Sigma}$ insbesondere diagonal ist, kann man durch Anwenden des Diagonaloperators $\langle\ldots\rangle$ (und evtl. Multiplikation mit geeigneten Faktoren) die folgenden drei Relationen erhalten, mit denen sich der obige Ausdruck vereinfacht. Die erste ist gleichbedeutend mit der bereits bekannten Beziehung (3.10) (man beachte $\langle\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)}\rangle\!=\!1$).

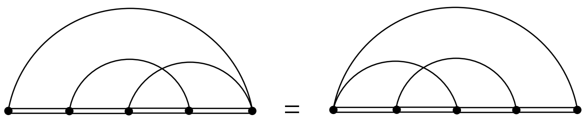
$$\langle\boldsymbol{g}\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)}\rangle = (1+G^{(0)})$$

$$1+\langle\boldsymbol{g}(\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)})^2\rangle = (1+G^{(0)})\langle(\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)})^2\rangle$$
$$\langle\boldsymbol{g}\cdot\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)}\boldsymbol{X}\rangle = (1+G^{(0)})\langle\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)}\boldsymbol{X}\rangle - \langle\boldsymbol{X}\rangle$$

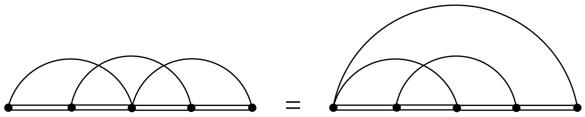
Schließlich läßt sich noch einen Wechsel von der Darstellung mit $\breve{\boldsymbol{G}}$ zur Darstellung mit $\bar{\boldsymbol{G}}$ mittels $\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)}\!=\!\mathbf{1}+\bar{\boldsymbol{G}}^{(0)}$ und $\langle(\breve{\boldsymbol{G}}^{(0)})^2\rangle\!=\!1+\langle(\bar{\boldsymbol{G}}^{(0)})^2\rangle$ vollziehen. Benutzt man nun noch die folgenden einsichtigen Beziehungen (das Argument $\boldsymbol{G}^{(0)}$ der Selbstenergiefunktionale ist der Übersichtlichkeit halber unterdrückt)

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{\Sigma}_2^{(1)}\rangle &= 0\\ \langle\boldsymbol{X}\boldsymbol{\Sigma}_3^{(1)}\boldsymbol{Y}\rangle &= \langle\boldsymbol{X}\boldsymbol{Y}\rangle\boldsymbol{\Sigma}_3^{(1)} \qquad (\boldsymbol{\Sigma}_3^{(1)} \text{ ist skalar})\end{aligned}$$

$$\langle\boldsymbol{\Sigma}_2^{(1)}\bar{\boldsymbol{G}}^{(0)}\rangle = \langle\bar{\boldsymbol{G}}^{(0)}\boldsymbol{\Sigma}_2^{(1)}\rangle$$



$$\langle\boldsymbol{\Sigma}_3^{(1)}\rangle = \langle\boldsymbol{\Sigma}_2^{(1)}\bar{\boldsymbol{G}}^{(0)}\rangle$$



so erhält man nach einiger Rechnung die Bestimmungsgleichung für die $\mathcal{O}(\frac{1}{d})$-Korrektur in folgender einfacher Form:

$$\boxed{G^{(1)} = \frac{Q_5 + 2\cdot Q_4}{1+Q_2} - Q_4} \qquad (3.27)$$

mit den abgekürzten Größen

$$
\begin{aligned}
Q_2 &= \left\langle \left(\bar{\boldsymbol{G}}^{(0)}\right)^2 \right\rangle &&= \sum_x \bar{G}^{(0)}_{0x} \bar{G}^{(0)}_{x0} \\
Q_4 &= \left\langle \boldsymbol{\Sigma}_2^{(1)}(\bar{\boldsymbol{G}}^{(0)}) \bar{\boldsymbol{G}}^{(0)} \right\rangle &&= \sum_x \bar{G}^{(0)}_{0x} \bar{G}^{(0)}_{x0} \bar{G}^{(0)}_{0x} \bar{G}^{(0)}_{x0} \qquad (3.28)\\
Q_5 &= \left\langle \bar{\boldsymbol{G}}^{(0)} \boldsymbol{\Sigma}_2^{(1)}(\bar{\boldsymbol{G}}^{(0)}) \bar{\boldsymbol{G}}^{(0)} \right\rangle &&= \sum_{x,y} \bar{G}^{(0)}_{0x} \bar{G}^{(0)}_{xy} \bar{G}^{(0)}_{yx} \bar{G}^{(0)}_{xy} \bar{G}^{(0)}_{y0}
\end{aligned}
$$

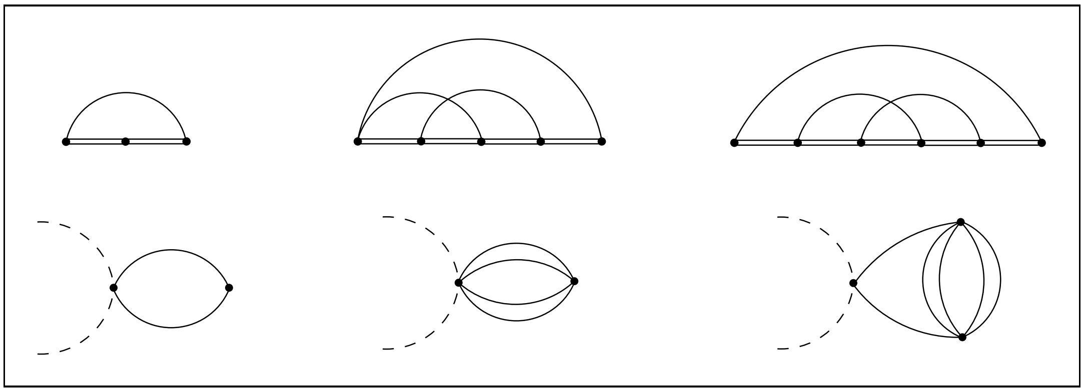


**Abbildung 3.2** $Q_2, Q_4$ und $Q_5$ in Index- und Ortsraumdarstellung

Dieses Ergebnis wurde bereits von Keiter, Kleineidam und Leuders (1997) angegeben und ergänzt die vorläufige Summation bei Keiter, Leuders und Schönenberg (1995). Mit der in diesem Kapitel vorgestellten Ableitung mit Hilfe der Technik der Lace-Entwicklung liegt ein Beweis für seine Vollständigkeit vor.

Die konkrete Bestimmung der Gittersumme bis einschließlich der ersten Ordnung in $\frac{1}{d}$, also des Ausdrucks $G^{(0)} + G^{(1)}$, vollzieht sich insgesamt in folgenden Schritten:

(i) Berechnung des *lokalen* Propagators nullter Ordnung $G^{(0)}$ mittels der selbstkonsistenten Gleichung (3.22).

(ii) Bestimmung des zugehörigten Nichtdiagonalteils $\bar{\boldsymbol{G}}^{(0)}$ nach (3.20).

(iii) Hieraus lassen sich $Q_2$, $Q_4$ und $Q_5$ nach obigen Formeln und damit $G^{(1)}$ berechnen.

Besitzen die Propagatoren des jeweiligen Gittersummenproblems Translationsinvarianz, so ist es mitunter günstiger, die Berechnungen im Fourierraum durchzuführen. Dort werden dann Matrixgleichungen wie z.B. (3.20) skalar. Das vollständige System von Gleichungen, explizit im $k$-Raum ausgeschrieben, lautet:

$$
\begin{aligned}
G^{(0)} &= \frac{1}{N} \sum_k \frac{g_k}{1 - (g_k - G^{(0)})} \\
\bar{G}^{(0)}_k &= \frac{g_k - G^{(0)}}{1 - (g_k - G^{(0)})}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
Q_2 &= \frac{1}{N}\sum_k (\bar{G}_k^{(0)})^2 \\
Q_4 &= \frac{1}{N^3}\sum_{k_1,k_2,k_3} \bar{G}_{k_1}^{(0)}\bar{G}_{k_2}^{(0)}\bar{G}_{k_3}^{(0)}\bar{G}_{k_1-k_2+k_3}^{(0)} \\
Q_5 &= \frac{1}{N^3}\sum_{k_1,k_2,k_3} (\bar{G}_{k_1}^{(0)})^2\bar{G}_{k_2}^{(0)}\bar{G}_{k_3}^{(0)}\bar{G}_{k_1-k_2+k_3}^{(0)} \\
G^{(1)} &= \frac{Q_5 + 2\cdot Q_4}{1+Q_2} - Q_4
\end{aligned}
$$

# Kapitel 4

# Der Self-avoiding Loop in unendlichen Raumdimensionen

Mit Hilfe der Lace-Entwicklung wurden im vorangegangenen Kapitel Bestimmungsrelationen für verallgemeinerte Walks in hohen Dimensionen hergeleitet. Diese lassen sich insbesondere auf die „klassischen“ Formen des Self-avoiding Loops und des Self-avoiding Walks anwenden. Als fundamentale, stochastische Modelle sind diese seit Jahrzehnten von großem Interesse. (Für eine Übersicht siehe die lesenswerten Darstellungen von Hughes (1995) und von Madras und Slade (1993).)

Bei allen bislang bekannten Untersuchungen des asymptotischen Verhaltens von Random Walks wird immer eine *endliche*, wenn auch mitunter *hohe* Raumdimension zugrundegelegt. Im vorliegenden Kapitel soll erläutert werden, inwieweit selbstvermeidende Gitterwege in *genuin unendlichen* Raumdimensionen[1] ein bisher noch nicht beschriebenes, nicht-triviales Verhalten zeigen, das sich nicht aus den bekannten Resultaten ableiten läßt.

Es soll daher zunächst der aktuelle Kenntnisstand zum asymptotischen Verhalten von Self-avoiding Walks und Loops in endlichen Dimensionen umrissen werden. Im Hauptteil des Kapitels folgt dann eine ausführliche mathematische Analyse des Verhaltens unendlichdimensionaler Self-avoiding Loops. Abschließend wird die Bedeutung der Ergebnisse für allgemeine, unendlichdimensionale Gittersummen, insbesondere für die effektive Single-Site-Näherung des periodischen Andersonmodells

[1] Unter „genuin unendlich“ wird hier der in der Einleitung beschriebene Grenzprozeß verstanden, bei dem die formale Raumdimension immer sehr viel größer als alle auftretenden Weglängen gewählt wird ($d \gg n$).

aufgezeigt.

## 4.1 Die Asymptotik von Walks und Loops

In Analogie zu klassischen statistischen Systemen werden Random Walks und Self-avoiding Walks anhand charakteristischer Konstanten wie z.B. kritischer Exponenten untersucht. Im Hinblick auf die Forderung einer unendlichen Resummation von Gitterprozessen in störungstheoretischen Berechnungen, aber auch auf die Bedeutung des Verhaltens langer Polymere (s. Abschnitt 3.1) ist das asymptotische Verhalten der beiden folgenden Größen von Bedeutung:

- Die **Zahl der Self-avoiding Walks** $c_n$ verhält sich gemäß

  $$c_n \sim \mu^n n^{\gamma-1} \qquad \text{für } n \to \infty$$

  mit dem *kritischen Exponenten* $\gamma$ und der sogenannten *Zusammenhangskonstanten* $\mu$. Für die Zahl der Self-avoiding Loops $u_n$ gilt ein ähnliches Gesetz, wobei man die zugehörige Zusammenhangskonstante mit $\mu_{\text{Polygon}}$ bezeichnet.

- Für die **mittlere quadratische Anfangs-End-Distanz** $\rho_n$ gilt:

  $$\rho_n := \sqrt{\frac{1}{c_n} \sum_{\omega \in \Omega_n} (\|\omega(n)\|_2)^2} \;\sim\; n^\nu$$

  Im Falle eines Random Walks nähme der kritische Exponent $\nu$ den Wert $\frac{1}{2}$ an. Man spricht hier von „Brownscher Diffusion“ bzw. „Gaußschem Verhalten“. Beim Self-avoiding Walk ist hingegen $\nu \geq \frac{1}{2}$ zu erwarten, da die Endpunkte durch die Excluded-Volume-Korrelationen auseinandergetrieben werden.

Die *Universalitätshypothese* besagt, daß die kritischen Exponenten $\gamma$ und $\nu$ nur von der Dimensionen des Systems abhängen, nicht dagegen von Details des Walks. So erwartet man, daß Walks auf unterschiedlichen Gittern derselben Dimension und mit unterschiedlich modellierter Excluded-Volume-Wechselwirkung dieselben kritischen Exponenten besitzen[2]. Die Zusammenhangskonstante $\mu$ hingegen spiegelt die

[2] So führten Brydges und Spencer (1985) die Lace-Entwicklung zunächst für schwach selbstvermeidende Walks ein. Die in der vorliegenden Arbeit untersuchten verallgemeinerten Walks, bei denen mit angemessen skalierter Sprungwahrscheinlichkeit auch Sprünge zu weiter entfernten Git-

Geometrie des jeweils betrachteten Gitters wider und wird auch als *effektive Koordinationszahl* bezeichnet. Für den (freien) Random Walk ist $\mu$ die tatsächliche Zahl der nächsten Nachbarn im Gitter[3].

Die beiden oben genannten Skalengesetze und die Existenz der Exponenten sind für $d=2$ und $d=3$ bislang unbewiesene Vermutungen, die aber durch eine große Zahl von Arbeiten auf den Gebieten der exakten Aufzählung und der Monte-Carlo Simulation untermauert wurden. Für den Fall $d \geq 4$ konnten analytische Methoden (wie z.B. die Lace-Entwicklung) strenge Ergebnisse liefern.

---

terplätzen zugelassen sind, gehören ebenfalls zu derselben Universalitätsklasse wie der klassische Self-avoiding Walk. Die in diesem Abschnitt referierten Ergebnisse wurden meist für klassische Self-avoiding Walks mit ausschließlich Nächste-Nachbarn-Sprüngen ermittelt, lassen sich aber zum Teil auf eine größere Klasse von Walks verallgemeinern.

[3] Hammersley und Morton bewiesen die Existenz von $\mu = \lim_{n\to\infty}(c_n)^{\frac{1}{n}}$ aus der sogenannten Submultiplikativität $c_{n+m} \leq c_n c_m$.

Die folgende Tabelle soll einen groben Überblick über den aktuellen Kenntnisstand geben. (Ausführliche Angaben finden sich bei Hughes (1995) [7.3].) Die Werte für $\mu$ beziehen sich hier auf ein hyperkubisches Gitter. Erläuterungen zu der Herkunft der Werte finden sich in der Fußnote[4].

| | Random Walk | | Self-avoiding Walk | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | Theorie | gemessen | Theorie | | | | gemessen |
| | | $(d=3)$ | $d=1^{a)}$ | $d=2^{c)}$ | $d=3^{c)}$ | $d\geq 4^{f)}$ | $(d=3)$ |
| $\mu$ | $2d$ | | 1 | $2.638^{d)}$ | $4.684^{d)}$ | | |
| $\nu$ | $\frac{1}{2}$ | $0.499^{b)}$ | 1 | $\frac{3}{4}$ $^{e)}$ | $0.592^{d)}$ | $\frac{1}{2}$ | $0.588^{b)}$ |
| $\gamma$ | 1 | | 2 | $\frac{43}{32}$ $^{e)}$ | $1.162^{d)}$ | 1 | |

Für die Belange dieser Arbeit wesentlich ist die Aussage, daß die kritischen Exponenten des Self-avoiding Walks ab der Dimension $d=4$ mit denen des Random Walks identisch sind, d.h. daß der Self-avoiding Walk „gaußsches“ (oder auch „brownsches“) Verhalten annimmt. In Analogie zum kritischen Verhalten vieler statistischer Modelle bezeichnet man daher die Dimension $d=4$ als *obere kritische Dimension* des Self-avoiding Walks und den Random Walk als das *Mean-Field-Modell* zum Self-avoiding Walk.

Auf der Ebene der nicht-universellen Konstanten $\mu$ ist folgendes festzustellen: Aufgrund des Ausschlusses der sofortigen Rückkehr muß die triviale Relation $\mu \leq 2d-1$ gelten. Aus der Betrachtung von Wegen, die immer nur in positive Achsenrichtung fortschreiten, folgt die untere Schranke $d \leq \mu$. Hara und Slade (1993) verbes-

[4]Bemerkungen zur Tabelle:
a) In einer Dimension wird der Self-avoiding Walk ballistisch, die angegebenen Koeffizienten sind daher trivial.
b) Die Werte wurden durch Lichtstreuungsexperimente an einem verdünnten Polymer (Polysteren) in einem guten Lösungsmittel (Benzen) bzw. einem Lösungsmittel am $\Theta$-Punkt (Cyclohexan) bestimmt (Cotton (1980)). Als Maß für die Ausdehnung diente allerdings nicht $\rho_n$, sondern der Gyrationsradius $R$ und als Maß für die Länge $n$ die Molekülmasse $W$, so daß das Skalengesetz $R \sim W^\nu$ lautet.
c) Streng bewiesene, exakte Werte für $d = 2, 3$ sind bislang unbekannt.
d) Aus einer großen Zahl von Arbeiten (vgl. Hughes (1995), [7.3.8]) werden hier repräsentativ die Werte nach Guttman (1987) angegeben, die mittels exakter Aufzählung gewonnen wurden.
e) Die rationalen Werte wurden von Nienhuis (1982) für das Honigwabengitter berechnet und sind – in Übereinstimmung mit der Universalitätshypothese – mit den numerisch bestimmten Näherungswerten für das quadratische Gitter konsistent.
f) Für $d=4$ werden die Skalengesetze noch durch einen logarithmischen Faktor der Form $(\log n)^{\frac{1}{4}}$ ergänzt. Die Werte von $\nu$ und $\gamma$ für $d \geq 5$ wurden von Hara und Slade (1992a/b) exakt nachgewiesen.

serten mit Hilfe der Lace-Entwicklung die erstmals (1964) von KESTEN aufgestellte $\frac{1}{d}$-Entwicklung von $\mu$ zu

$$\mu = 2d - 1 - \frac{1}{2d} - \frac{3}{(2d)^2} - \frac{16}{(2d)^3} - \frac{102}{(2d)^4} + \mathcal{O}(\tfrac{1}{d^5})$$

Im Grenzfall $d \to \infty$ sind die wesentlichen Korrekturen also durch sofortige Rückkehrprozesse bestimmt, langreichweitige Korrelationen spielen keine Rolle.

Die Self-avoiding Loops sind in endlichen Dimensionen mit den Self-avoiding Walks durch die zunächst überraschende Identität

$$\mu_{\text{Polygon}} = \mu$$

verbunden (z.B. HUGHES (1995) [7.2.4]). In ihrer Asymptotik sind also der offene und der geschlossene Typ des Self-avoiding Walks nicht zu unterscheiden. Hieraus folgt für die asymptotische Zahl der Self-avoiding Loops in hohen, aber endlichen Dimensionen

$$u_{2n} \sim (2d)^{2n}(1 + \mathcal{O}(\tfrac{1}{d})) \qquad \text{für } n \gg d \gg 1 \tag{4.1}$$

Man könnte nun aufgrund der vorangegangenen Feststellungen vermuten, daß in $d = \infty$ das Excluded-Volume-Problem unbedeutend wird und unrestringierte (gaußsche) Walks eine angemessene Näherung darstellen. Dies ist für offene Self-avoiding Walks auch tatsächlich der Fall, wie im Anhang C nachgewiesen wird. Für geschlossene Random Loops hingegen soll durch die im folgenden Abschnitt vorgestellten Berechnungen gezeigt werden, daß sich für einen Raum von *genuin unendlicher Dimension* ein völlig anderes Verhalten ergibt.

## 4.2 Random Loops und Self-avoiding Loops

### 4.2.1 Asymptotische Verfahren

Die in Abschnitt 3.1 eingeführte Methode der erzeugenden Funktionen macht das Problem der Random Walks analytischen Methoden zugänglich. Im Falle der *zurückkehrenden Gitterwege* (Random Loop und Self-avoiding Loop) ergibt sich jedoch eine besondere Schwierigkeit bei der Anwendung dieser Methode. Die in (3.2) definierten erzeugenden Funktionen $C(z)$ und $G(z)$ erweisen sich als *nicht-analytisch*. Die Folge ihrer Koeffizienten steigt so stark an, daß die Potenzreihe den Konvergenzradius

$R = 0$ besitzt ($R^{-1} = \limsup_{n\to\infty} |a_n|^{1/n}$). Dies ist unabhängig von der speziellen dimensionalen Skalierung der Einzelschritte und kann als Folge des überexponentiellen Anstieg der Anzahl der Diagramme erklärt werden.

Dieses Verhalten steht im Kontrast zu dem der offenen Gitterwege (Random Walk und Self-avoiding Walk), bei denen alle erzeugenden Funktionen konvergierende Potenzreihen sind. In diesem Fall erlaubt die Kenntnis der Konvergenzradien – besser noch die Kenntnis der Lage und der Residuen aller Singularitäten der erzeugenden Funktion – Rückschlüsse auf das asymptotische Verhalten der Koeffizienten (z.B. Wilf (1990) Kap.5). Im Falle von nicht-konvergenten (singulären) Potenzreihen gibt es keine allgemeinen Methoden (Guttmann (1989) [Abschnitt 9.1]).

Allerdings läßt sich auch mit nicht-konvergenten erzeugenden Funktionen mathematisch sinnvoll operieren. Diese sind nämlich unabhängig von ihrem analytischen Verhalten auch rein algebraisch im *Ring der formalen Potenzreihen* wohldefiniert. Innerhalb dieses Rings kann man (mit Einschränkungen) nicht nur Addition und Multiplikation, sondern auch Operationen wie Differentiation, Substitution, Inversion und Ermittelung einer reziproken Funktion ausführen (Wilf (1990), Kap.2). Alle im folgenden als Potenzreihen angegebenen Ausdrücke sollen in diesem Sinn verstanden werden.[5]

### 4.2.2 Der (freie) Random Loop

Bevor die Korrelationen, die sich für einen Self-avoiding Loop in hohen Dimensionen ergeben, berechnet und bewertet werden können, muß zunächst eine knappe asymptotische Analyse des *nichtrestringierten*, zurückkehrenden Gitterweges vorgenommen werden.

Da beim Random Loop keine Restriktionen der Gittersumme wie bei (3.4) vorliegen

$$C = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{x_1,\ldots,x_n \in \mathrm{R}^d} g_{0x_1} \cdot g_{x_1x_2} \cdot \ldots \cdot g_{x_{n-1}x_n} \cdot g_{x_n0} \tag{4.2}$$

kann der Ausdruck direkt mit Hilfe von (3.8) in den Fourierraum übertragen und geschlossen berechnet werden:

$$C(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \langle (g_k(z))^n \rangle = \left\langle \frac{g_k(z)}{1 - g_k(z)} \right\rangle$$

[5] „A generating function is a clothesline on which we hang up a sequence of numbers for display.“ Wilf (1995), S.1

Dabei ist

$$g_k(z) = z \underbrace{\frac{2}{\sqrt{d}} \sum_{i=1}^{d} \cos k_i}_{=:\omega_k} \tag{4.3}$$

der fouriertransformierte Einschrittpropagator des Random Walks. Ein Mittelwert der Form $\langle f(\omega_k)\rangle$ läßt sich durch ein Integral über den Parameter $\omega$ mit Hilfe von

$$\langle f(\omega_k)\rangle = \frac{1}{N}\sum_k f(\omega_k) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega\, \rho(\omega) f(\omega)$$

mit der (dimensionsabhängigen) Dichte $\rho$ gemäß (D.4)

$$\rho(\omega) = \frac{1}{N}\sum_k \delta(\omega - \omega_k) = \frac{1}{\pi}\int\limits_0^{\infty} ds \cos(s\omega) \left(J_0(\tfrac{2st}{\sqrt{d}})\right)^d$$

ausdrücken. Dieses Vorgehen ist völlig analog zur Bestimmung der freien Zustandsdichte des Elektronenbandes wie sie in Anhang D (mit $g_k = \frac{1}{z-\epsilon_k}$ statt $g_k = z\omega_k$) durchgeführt wurde.

Damit erhält man einen expliziten Ausdruck für die erzeugende Funktion des Random Loops bei *beliebiger* Raumdimension $d$:

$$C(z) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega\, \rho(\omega) \frac{z\omega}{1 - z\omega} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega\, \rho(\omega) \frac{(z\omega)^2}{1-(z\omega)^2} \tag{4.4}$$

Die letzte Form ergibt sich, wenn man beachtet, daß alle ungeraden Anteile des Integranden verschwinden, oder gleichbedeutend, daß nur Loops gerader Länge existieren.

Hier sieht man auch, woran eine reguläre Potenzreihendarstellung um $z = 0$ scheitert. Für alle $z \in \mathbb{C}\backslash\mathbb{R}$ ist $C(z)$ aufgrund der Integraldarstellung analytisch, für alle $z \neq 0$ auf der reellen Achse hat der Integrand jedoch die Pole $\omega = \pm\frac{1}{z}$, was für $C(z)$ zu einem Analytizitätsschnitt längs $\mathbb{R}$ führt. Eine Potenzreihenentwicklung um $z=0$ kann daher auch keinen endlichen Konvergenzradius besitzen.

Da aufgrund dieses Charakteristikums analytische Methoden zur Bestimmung des asymptotischen Verhaltens scheitern, muß man die Koeffizienten $a_{2n}$ auf anderem Wege gewinnen:

Die obige Darstellung über das Integralmittel liefert

$$C(z) = \left\langle \sum_{n=1}^{\infty} (z\omega)^{2n} \right\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \omega^{2n}\rangle z^{2n}$$

Damit sind die Zahlen

$$a_{2n} = \frac{1}{(2n)!}\frac{d^{2n}}{dz^{2n}}\,C(z)\Big|_{z=0} = \langle \omega^{2n} \rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega\;\rho(\omega)\omega^{2n}$$

offensichtlich gleichbedeutend mit den Momenten der Dichte $\rho(\omega)$. Exakte Werte für die $a_{2n}$ in endlichen Dimensionen lassen sich jedoch mit den kombinatorischen Darstellungen, wie sie im Anhang B präsentiert werden, weitaus einfacher bestimmen. An dieser Stelle sollen lediglich die zum Vergleich mit dem Self-avoiding Loop benötigten Werte für unendliche Dimensionen bestimmt werden.

Da, wie schon festgestellt, die „Dispersionsrelation“ des Random Loops ($\omega_k$ in (4.3)) formal identisch mit der des Bandelektronpropagators ($\epsilon_k$ in (D.1)) ist, läßt sich auch die im Anhang D hergeleitete Entwicklung für die zugehörige Dichte $n(\omega)$ übertragen (es ist lediglich $t=1$ zu setzen)

$$\rho(\omega) = \rho^{(0)}(\omega)\cdot\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{d^n}\,r_1^{(n)}\left(\frac{\omega}{2}\right) \text{ mit } \rho^{(0)}(\omega) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}e^{-(\frac{\omega}{2})^2}$$

mit den geraden Korrekturpolynomen $r^{(n)}$ wie in (D.11) dargestellt.

Das Ergebnis für $d=\infty$ erhält man sofort[6] mit $r_0(x) = 1$:

$$C^{(0)}(z) = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega\; e^{-\frac{\omega^2}{4}}(z\omega)^n = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(2n)!}{n!}z^{2n}$$

also

$$\boxed{a_{2n} = \frac{(2n)!}{n!}d^n + \mathcal{O}(d^{n-1})} \tag{4.5}$$

Die nächsten Korrekturen folgen analog: Aus $r_1(x) = -\frac{x^4}{4} + \frac{3x^2}{4} - \frac{3}{16}$ erhält man nach kurzer Rechnung die Korrektur nächsthöherer Ordnung:

$$a_{2n} = \frac{(2n)!}{n!}\left(d^n - \left(\frac{n(n-1)}{4}\right)d^{n-1}\right) + \mathcal{O}(d^{n-2})$$

Dieses Resultat läßt sich auch mit rein kombinatorischen Mitteln, wie sie im Anhang B entwickelt werden, erreichen (vgl. (B.3)).

[6] Es gilt $\int\limits_{-\infty}^{\infty} ds\, e^{-as^2}s^{2n} = \frac{\Gamma(n+\frac{1}{2})}{a^{n+\frac{1}{2}}} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}\frac{(2n)!}{(4a)^n n!}$

### 4.2.3 Der Self-avoiding Loop

Die vorangegangenen Rechnungen zeigen, daß der zurückkehrende Random Loop im Gegensatz zum offenen Random Walk in endlichen Dimensionen bereits eine nichttriviale dimensionale Entwicklung besitzt (B.2). Obwohl er den Excluded-Volume-Effekt noch gänzlich unberücksichtigt läßt, benötigt man die Näherung $d\!=\!\infty$, um eine einfache, geschlossene Darstellung der Koeffizienten zu erhalten (4.5). In diesem Abschnitt wird sich nun zeigen, welche Auswirkung die korrekte Berücksichtigung der Excluded-Volume-Korrekturen in unendlichen Raumdimensionen für den Self-avoiding Loop hat.

Wie schon oben erläutert, trivialisiert der offene *Self-avoiding Walk* in unendlichen Raumdimensionen zu einem freien (gaußschen) Random Walk. Etwaige Rückkehrprozesse können in $d\!=\!\infty$ vernachlässigt werden. In dieser Hinsicht zeigt der zum Ausgangspunkt zurückkehrende *Self-avoiding Loop* jedoch ein gänzlich anderes Verhalten. Trotz der Näherung $d\!=\!\infty$ muß man eine gewisse Klasse von elementaren und zusammengesetzten Rückkehrprozessen berücksichtigen. Diesem Verhalten trägt durch ihre charakteristische selbstkonsistente Gestalt (3.22) die mit Hilfe der Lace-Entwicklung gewonnene Bestimmungsgleichung für die erzeugende Funktion des Self-avoiding Walks in unendlichen Dimensionen $G^{(0)}(z)$ Rechnung.

Zu dieser Gleichung existieren die äquivalenten *impliziten* Relationen (3.21), eine *explizite* Formel läßt sich allerdings nicht angeben. Eine numerische Behandlung der durch (3.22) repräsentierten nichtlinearen Integralgleichung – wie im Falle der später durchzuführenden XNCA – ist nicht sinnvoll, da man an dem asymptotischen Verhalten der Koeffizienten interessiert ist und die Koeffizienten der erzeugenden Funktion als mehrfache Ableitungen numerisch nicht zuverlässig bestimmbar sind – zumal hier zusätzlich nichtanalytisches Verhalten vorliegt. Als eine naheliegende Möglichkeit der Bestimmung der $u_{2n}$ bleibt daher nur eine algebraische Berechnung der Koeffizienten der erzeugenden Funktion $G(z)$ des Self-avoiding Loops.

Die Bestimmungsgleichung für $G^{(0)}$ in $d\!=\!\infty$ sei dazu in die Integraldarstellung des vorigen Abschnitts gebracht. Da hier wieder nur Wege mit gerader Schrittzahl vorkommen, müssen zudem nur gerade Potenzen von $z$ berücksichtigt werden.[7]

$$G(z) = \left\langle \frac{(z\omega)^2}{(1+G(z))^2 - (z\omega)^2} \right\rangle$$

Entwickelt man den Ausdruck und setzt die Momente des freien Random Loops

[7] In diesem Abschnitt sind alle Rechnungen in der $d\!=\!\infty$-Näherung aufzufassen, und der dies anzeigende Index (0) wird unterdrückt.

$\langle\omega^{2n}\rangle$ ein, so erhält man eine Gleichung für die formale Potenzreihe $G(z)$. Die sich ergebenden Koeffizientengleichungen für die $u_{2n}^{(0)}$ konnten mit Hilfe von symbolischer Computeralgebra (Mathematica, siehe z.B. Wolfram (1992)) bis zur 19. Ordnung bestimmt und mit der Zahl $a_{2n}^{(0)} = \frac{(2n)!}{n!}$ der *unrestringierten* Random Loops in $d = \infty$ verglichen werden:

| $2n$ | $u_{2n}^{(0)}/d^n$ | $u_{2n}^{(0)}\Big/a_{2n}^{(0)}$ |
|---:|---:|---:|
| 2 | 2 | 1.000 |
| 4 | 4 | 0.3333 |
| 6 | 32 | 0.2667 |
| 8 | 432 | 0.2571 |
| 10 | 7936 | 0.2624 |
| 12 | 181120 | 0.2722 |
| 14 | 4893696 | 0.2829 |
| 16 | 152027904 | 0.2930 |
| 18 | 5325676544 | 0.3019 |
| 20 | 207464343552 | 0.3094 |
| 22 | 8892954624000 | 0.3158 |
| 24 | 415956264345600 | 0.3211 |
| 26 | 21084401714724864 | 0.3256 |
| 28 | 1151503642237272064 | 0.3293 |
| 30 | 67419863002851573760 | 0.3324 |
| 32 | 4213377103479567482880 | 0.3350 |
| 34 | 279972060057241280053248 | 0.3373 |
| 36 | 19712670236808003650584576 | 0.3393 |
| 38 | 1466158742296702001879187456 | 0.3410 |

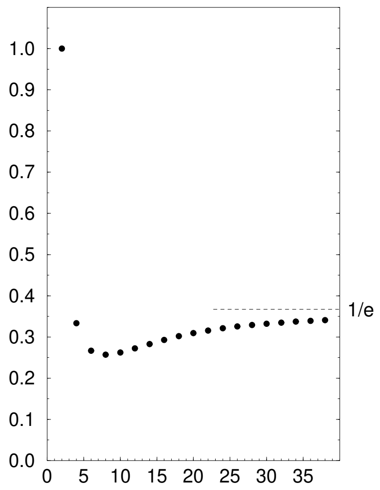



**Abbildung 4.2** $\dfrac{u_{2n}^{(0)}}{a_{2n}^{(0)}}$

**Abbildung 4.1**
Exakte Aufzählung der Self-avoiding Loops in $d{=}\infty$

Man erkennt die Tendenz, daß trotz unendlicher Raumdimensionen das Selbstüberschneidungsverbot bei den angegebenen Weglängen eine deutliche Einschränkung bedeutet. Eine Vernachlässigung der Excluded-Volume-Korrelationen, indem man den Self-avoiding Loop in $d{=}\infty$ durch den freien Random Loop ersetzt, ist also nicht zu rechtfertigen.

Ob sich allerdings das hier erkennbare Verhalten auch in den asymptotischen Bereich fortsetzt, läßt sich aus den geringen Weglängen, die man durch exakte Aufzählungen gewinnen kann, nicht extrapolieren. Es muß also der Grenzwert des Quotienten $u_{2n}^{(0)}/a_{2n}^{(0)}$ exakt bestimmt werden. Wenn dieser gegen 1 konvergierte, erwiese sich der Self-avoiding Loop in unendlichen Dimensionen als asymptotisch trivial.

Daß aber tatsächlich selbst in $d{=}\infty$ noch ein beträchtlicher Teil der Korrelationen durch den Excluded-Volume-Effekt verbleibt, ist die Aussage des im folgenden bewiesenen Satzes.

**Satz:** *In unendlichen Raumdimensionen hat unter den zurückkehrenden Gitterwegen (Random Loops) der Anteil solcher Wege, die keine Selbstüberschneidungen aufweisen (Self-avoiding Loops), als Funktion der Schrittzahl einen Grenzwert* $< 1$, *nämlich*

$$\boxed{\lim_{n\to\infty} \frac{u_{2n}}{a_{2n}} = \frac{1}{e}}$$

Die Zahl der Random Loops verhält sich daher asymptotisch wie

$$u_{2n} \sim \frac{1}{e}\frac{(2n)!}{n!} d^n + \mathcal{O}(d^{n-1}) \qquad \text{für } d \gg n \gg 1 \tag{4.6}$$

**Beweis:** Als Ausgangspunkt sei die folgende zu (3.22) äquivalente Form der Selbstkonsistenzgleichung für die erzeugende Funktion $G(z)$ gewählt (vgl. (3.21))

$$1 = \left\langle \frac{1}{1+G(z)-z\omega} \right\rangle = \frac{1}{z}\left\langle \frac{1+G(z)}{z-\omega} \right\rangle$$

Mit der Zustandsdichte $\rho^{(0)}$ in unendlichen Dimensionen (D.6) findet man in der rechten Seite die Integraldarstellung der komplexen Errorfunktion als Hilberttransformierte der Gaußfunktion wieder und erhält damit die folgende implizite Form der Selbstkonsistenzgleichung:

$$1 = \frac{1}{z}\frac{\sqrt{\pi}}{2i} w\left(\frac{1+G(z)}{2}\right)$$

Da zur Bestimmung der $u_{2n}$ die asymptotische Entwicklung von $G(z)$ um $z = 0$ benötigt wird, sei die Errorfunktion ebenfalls asymptotisch um $\frac{1}{z} = \infty$ entwickelt (Abramowitz und Stegun (1972) [7.1.23])

$$\frac{\sqrt{\pi}}{2i} w\left(\tfrac{z}{2}\right) = \frac{1}{z}\left(1 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(2m)!}{m!}\frac{1}{z^{2m}}\right)$$

Nach einigen Umformungen erhält man die transzendente Bestimmungsgleichung für $G(z)$:

$$G(z) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(2m)!}{m!}\left(\frac{z}{1+G(z)}\right)^{2m}$$

(Im Vergleich mit dem Ausdruck für die erzeugende Funktion des dazugehörigen unrestringierten Loops

$$C(z) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(2m)!}{m!} z^{2m}$$

erkennt man die spezifische Form der Selbstkonsistenz, die bei Berücksichtigung der $d=\infty$-Korrelationen hinzutritt.)

Zur Berechnung der Koeffizienten des derart bestimmten $G(z)$ werden sowohl $G(z)$ als auch entstehende Zwischenausdrücke formal in Potenzreihen entwickelt:

$$G(z) = \sum_{n=0}^{\infty} s_m z^{2m} \quad , \quad \frac{1}{1+G(z)} = \sum_{l=0}^{\infty} r_l z^{2l} \quad , \quad \left(\frac{1}{1+G(z)}\right)^{2m} = \sum_{n=0}^{\infty} q_n^{(m)} z^{2n}$$

Damit ergibt sich folgendes System linearer Differenzengleichungen, das äquivalent zur betrachteten Selbstkonsistenzgleichung ist

$$\begin{aligned} r_l &= -\sum_{i=0}^{l-1} r_i s_{l-i} \\ q_n^{(m)} &= \sum_{k=0}^{n-1} q_k^{(m-1)} r_{n-k} \\ s_m &= \sum_{n=1}^{m} q_{m-n}^{(2n)} \frac{(2n)!}{n!} = \sum_{n=0}^{m-1} q_n^{(2(m-n))} \frac{(2(m-n))!}{(m-n)!} \end{aligned}$$

Diese Gleichungen sind iterativ nach dem Schema

$$s_1, \ldots, s_l \;\rightarrow\; r_1, \ldots, r_l \;\rightarrow\; q_1^{(m)}, \ldots, q_l^{(m)} \;\rightarrow\; s_{l+1}$$

auflösbar. Da der Beweis im wesentlichen auf einer asymptotischen Entkopplung des Gleichungssystems beruht, ist es zum Zwecke einer Abschätzung von Zwischenergebnissen günstig, die Koeffizienten gemäß ihrem asymptotischen Verhaltens zu gewichten:

$$s_m = \frac{(2m)!}{m!}\tilde{s}_m \quad \text{und} \quad r_l = \frac{(2l)!}{l!}\tilde{r}_l$$

Mit dieser Normierung bedeutet $\tilde{s}_m$ die relative Zahl aller geschlossenen Random Walks in unendlichen Dimensionen, die nicht selbstüberschneidend sind:

$$\tilde{s}_m = \frac{u_{2m}}{a_{2m}}$$

Die Iterationsgleichungen für $\tilde{s}_m$ und $\tilde{r}_m$ schreiben sich dann als

$$\tilde{r}_l = -\sum_{i=0}^{l-1} \tilde{r}_i \tilde{s}_{l-i} \binom{l}{i} \Big/ \binom{2l}{2i} \tag{4.7}$$

$$\tilde{s}_m = \sum_{n=0}^{m-1} q_n^{2(m-k)} \frac{m!(2(m-n))!}{(m-n)!(2m)!} \tag{4.8}$$

und man kann zeigen, daß mit $|\tilde{s}_m| < 1$ auch $|\tilde{r}_l|$ beschränkt bleibt. Zur Bestimmung von $\tilde{s}_m$ für große $m$ ist eine explizite Formel für $q_n^{(m)}$ günstiger:

$$q_n^{(m)} = \sum_{\substack{l_1,\ldots,l_m \\ l_1+\ldots+l_m=n}} r_{l_1}\ldots r_{l_m} = \sum_{\substack{\{\lambda_i\}_{i=0,1,\ldots} \\ \sum \lambda_i = m \\ \sum i\lambda_i = n}} m! \prod_i \left[ \frac{1}{\lambda_i!} \left( \frac{(2i)!}{i!} \right)^{\lambda_i} \tilde{r}_i^{\lambda_i} \right]$$

In der letzten Darstellung sind alle identischen Monome in den $\tilde{r}_l$ zusammengefaßt worden. In dieser Darstellung kann man die Beiträge der größten Ordnung in $m$ isolieren: Im Fall $m \gg n$ hat der kombinatorische Faktor maximale $m$-Potenz, wenn $\lambda_1 = n$ und $\lambda_0 = m - n$ ist. Dann gilt

$$q_n^{(m)} = \binom{m}{n} \left( \frac{2!}{1!} \right)^n \tilde{r}_1^n + \mathcal{O}(m^{n-1}) = \frac{2^n m^n}{n!} \tilde{r}_1^n + \mathcal{O}(m^{n-1})$$

Dies ermöglicht für große $m$ ein Aufbrechen der Gleichungskette, und $\tilde{s}_m$ hängt im Grenzfall $n \to \infty$ nur von $\tilde{r}_1 = -1$ ab. Untersucht man den kombinatorischen Koeffizienten in (4.8) auf sein Verhalten für $m \gg n$, so ergibt sich mit $\tilde{c}_n^{2(m-n)} \sim \binom{2(m-n)}{n}$

$$q_n^{2(m-n)} \frac{m!(2(m-n))!}{(m-n)!(2m)!} = (\tilde{r}_1)^n \left( \frac{2^n (2m)^n}{n!} + \mathcal{O}(m^{n-1}) \right) \frac{m^n}{(2m)^{2n}} = \frac{(-1)^n}{n!} + \mathcal{O}(m^{-1})$$

Die Summanden, für die man nicht $m \gg n$ annehmen kann, lassen sich ebenfalls als $\mathcal{O}(m^{-1})$ abschätzen, so daß man im Grenzfall großer $m$ das gewünschte Ergebnis erhält:

$$\tilde{s}_m = \sum_{n=0}^{m'(\ll m)} \frac{(-1)^n}{n!} + \mathcal{O}(m^{-1}) \qquad \Longrightarrow \qquad \lim_{m\to\infty} \tilde{s}_m = \frac{1}{e} \qquad \square$$

Eine erst kürzlich erschienene, rein mathematische Arbeit über die Kombinatorik *konvexer Polygone* (Stark und Wormald (1997)) – im übrigen die erste, die auch beliebig hohe Dimensionen $d$ mitberücksichtigt – bestätigt dieses Ergebnis.

Anmerkung:
Bemerkenswert ist, daß eine verwandte kombinatorische Fragestellung, das sogenannte *Rencontre-Problem*, dasselbe Grenzverhalten zeigt: Betrachtet man unter allen Permutationen von $n$ Elementen nur diejenigen, die keine Fixpunkte ($\sigma(i) = i$) besitzen und bezeichnet deren Zahl mit $s_n$, so findet man

$$\lim_{n\to\infty} \frac{s_n}{n!} = \frac{1}{e}$$

Das obige Ergebnis für Self-avoiding Walks läßt sich allerdings nicht auf offensichtliche Weise hierauf reduzieren.

## 4.3 Bedeutung der Ergebnisse

Vergleicht man die bekannte asymptotische Formel für den Self-avoiding Loop in endlichen Dimensionen (4.1) mit dem neuen Ergebnis für genuin unendliche Dimensionen (4.6)

$$u_{2n} \sim (2d)^{2n}(1 + \mathcal{O}(\tfrac{1}{d})) \qquad \text{für } n \gg d \gg 1 \tag{4.1}$$

$$u_{2n} \sim \frac{1}{e}\frac{(2n)!}{n!}d^n(1 + \mathcal{O}(\tfrac{1}{d})) \qquad \text{für } d \gg n \gg 1 \tag{4.6}$$

so fallen die folgenden Unterschiede ins Auge:

1. In endlichen Dimensionen skaliert der Koeffizient $u_{2n}$ zunächst mit $d^n$ (4.6), für asymptotische Weglängen jedoch schließlich wie $d^{2n}$ (4.1). Dieses Verhalten spiegelt sich im oben erwähnten Zusammenfallen der Zusammenhangskonstanten $\mu$ und $\mu_{\text{Polygon}}$ wider. In unendlichen Dimensionen hingegen besteht bei allen Weglängen eine Skalierung mit der Form $u_{2n} \sim d^n$.

2. In unendlichen Dimensionen steigt die Zahl der Wege *überexponentiell* mit $n$ ($u_{2n} \sim n^n$). Dies läßt sich leicht dadurch erklären, daß für beliebig hohes $n$ Loops mit der Länge $2n$ und *maximaler Dimensionalität* $d = n$ existieren, die für endliche Dimension ab $n > d$ ausgeschlossen sind. Genau diese Klasse von Wegen ist es, die im Fall unendlicher Raumdimension zur Gittersumme hinzukommt und die das asymptotische Verhalten dominiert.

3. Diese neue Klasse von echt unendlichdimensionalen Korrelationen ist auch die Ursache dafür, daß der unendlichdimensionale Self-avoiding Loop nicht mit seinem unkorrelierten Pendant zusammenfällt und sich sich auch im Grenzfall *nicht-gaußisch* verhält. Mathematisch spiegelt sich diese Tatsache in dem Faktor $\frac{1}{e}$ wider, der in (4.6) gegenüber (4.5) hinzutritt.

Der letzte Punkt ist eine Besonderheit des *zurückkehrenden* Self-avoiding Loops. Der offene Self-avoiding Walk zeigt dieses außergewöhnliche Verhalten in unendlichen Dimensionen nicht, sondern wird entprechend dem endlichdimensionalen Self-avoiding Walk oberhalb der kritischen Dimension $d = 4$ trivial. Da dies für den Fall genuin unendlicher Raumdimension in der Literatur bisher nicht untersucht wurde, gibt Anhang C einen kurzen Beweis hierfür.

Daß der Self-avoiding Loop in unendlichen Dimensionen nichttrivial bleibt, läßt sich auch anhand eines anschaulichen Argumentes leicht verstehen: Während der offene Walk bei jedem Schritt mit der Wahrscheinlichkeit 1 in eine *neue* Raumrichtung geht, wird der zurückkehrende Walk gezwungen, für jeden Schritt in eine bestimmte Raumrichtung, in derselben Raumdimension auch wieder einen Schritt zurück auszuführen. Dadurch steigt die Wahrscheinlichkeit der Selbstüberschneidung und der Excluded-Volume-Effekt erzeugt Korrelationen, die auch in $d=\infty$ nicht verschwinden.

Die Situation ist aber eine völlig andere, wenn man eine hohe, aber *endliche* Dimension $d$ zugrundelegt. Alle Rechnungen des vorangegangenen Abschnittes waren unter der Voraussetzung $d \gg n$ vorgenommen worden, wobei $n$ die jeweils betrachtete Weglänge bezeichnet. Die asymptotischen Aussagen für $n \to \infty$ werden für Wege, deren *Dimensionalität* (vgl. S.145) in die Größenordnung der Raumdimension kommt (also $2n \simeq d$), aber ungültig. Die durch die Einengung asymptotisch langer Wege in einen endlichdimensionalen Raum entstehenden Korrelationen werden in „hohen“ Raumdimensionen (im Sinne der Einleitung) aus dem folgenden Grund nicht berücksichtigt: Alle Rechnungen für hohe Dimensionen sind Entwicklungen um den Punkt $\frac{1}{d} = 0$. Dabei bleibt das spezifisch unendlichdimensionale Verhalten dieses Ausgangspunktes jedoch in jeder Ordnung einer Korrekturrechnung bestehen. Aus diesem Grunde kann eine Korrektur endlicher Ordnung die beschriebenen, für den Fall $d=\infty$ spezifischen Korrelationen nicht eliminieren. Dies deuten bereits die kombinatorischen Berechnungen im Anhang B für den *nichtkorrelierenden* Random Loop an. Eine Verbesserung der $d=\infty$-Werte durch $\mathcal{O}(\frac{1}{d^n})$-Korrekturen vermag nur bei *endlichen* Weglängen die tatsächlichen Werte für endliche Dimensionen besser zu approximieren. Dies zeigt sich besonders deutlich an der Tabelle zum Ende des Anhangs B. Man erkennt, wie die Tatsache, daß bei höheren Weglängen der Walk gezwungen ist, in bereits besuchte Raumdimensionen zurückzukehren, dazu führt, daß die ersten Korrekturen einer dimensionalen Entwicklung die Zahl der Wege nicht mehr korrekt wiedergeben (für $a_n^{(1)}$ etwa ab $n \simeq d$).

Die in diesem Kapitel für den unendlichdimensionalen Self-avoiding Loop untersuchten Phänomene treten in derselben Weise auch bei einer Näherung hoher Dimensionen für die *Gittersumme der effektiven Single-Site-Näherung des Andersongitters* auf, so daß man die folgenden allgemeinen Aussagen zum Excluded-Volume-Problem bei zurückkehrenden Gitterwegen treffen kann:

*Der unendlichdimensionale Self-avoiding Loop ist <u>generisch</u> von jedem endlichdimensionalen verschieden. Korrekturen durch eine nach endlich vielen Schritten ab-*

*brechende Entwicklung nach $\frac{1}{d}$ verbessern nur die Näherung für kleine Weglängen. Die Asymptotik (und damit das Verhalten fast aller Beiträge der Gittersummation) bleiben die eines unendlichdimensionalen Weges.*

Dies läßt sich auch in der folgenden Form ausdrücken:
*Die Grenzübergänge $d \to \infty$ und $n \to \infty$ sind nicht vertauschbar und führen im betrachteten Fall zu nichtäquivalenten Systemen. Die Näherung $d = \infty$ (und eine Entwicklung um diesen Grenzfall) ist also nur bedingt geeignet, um das Verhalten endlichdimensionaler Systeme zu approximieren.*

Diese Erkenntnisse werden zusammen mit weiteren Überlegungen zum Andersongitter in eine Bewertung der Näherung hoher räumlicher Dimension einfließen.

# Kapitel 5

# Das Andersongitter in hohen Dimensionen

## 5.1 Die Gittersumme in hohen Dimensionen $d$

In diesem Abschnitt werden konkret die Ausdrücke für die $d{=}\infty$-Näherung und die $\frac{1}{d}$-Korrekturen der Gittersumme für das Andersongitter berechnet, wozu die in Kapitel 3 in allgemeinem Rahmen gewonnenen Ergebnisse verwendet werden.

### 5.1.1 Das Tight-Binding-Band in hohen Dimensionen

Zur korrekten Lösung der Gitter-Selbstkonsistenzgleichung in $d{=}\infty$ und in $\mathcal{O}(\frac{1}{d})$ muß das *ungestörte* Elektronenband, beschrieben durch den Propagator $g_{xy}$, nach der inversen Raumdimension bis zur ersten Ordnung entwickelt werden. Es wird dazu als einfachstes Modell beweglicher Ladungselektronen ein Tight-Binding-Band mit einem isotropen Hopping ausschließlich zwischen nächsten Nachbarn angenommen:

$$t_{xy} = \tilde{t}\delta_{<x,y>} = \begin{cases} \tilde{t} & \text{für nächste Nachbarn} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Damit die Modelle in verschiedenen Dimensionen vergleichbar bleiben und ein vernünftiger Grenzübergang zu unendlichen Raumdimensionen resultiert, wird die Skalierung der Hoppingstärke gemäß $\tilde{t} := \frac{t}{\sqrt{d}}$ vorgenommen (vgl. Metzner und Vollhardt (1989)). Die mit der Dimensionszahl sich erhöhende Beweglichkeit der Elektronen wird auf diese Weise durch ein verringertes Hopping kompensiert, so daß eine endliche kinetische Energie und eine nichttriviale Banddichte im Grenzfall $d \to \infty$

verbleiben. Eine Verallgemeinerung für ein Hopping über mehrere Gitterplätze ist nach MÜLLER-HARTMANN (1989) möglich, solange man sich auf Sprünge entlang der Koordinatenachsen beschränkt.

Im folgenden werden alle benötigten Eigenschaften des Propagators $g_{xy}$ des Tight-Binding-Bandes angegeben. Die zugehörigen Rechnungen und Angaben zu weiteren Korrekturen finden sich im Anhang D.

Der Diagonalteil der Bandelektron-Greenfunktion im Grenzfall $d=\infty$, d.h. in nullter Ordnung in $\frac{1}{d}$, lautet

$$g_{00}^{(0)}(z) = \frac{1}{2t}\frac{\sqrt{\pi}}{i}w\left(\tfrac{z}{2t}\right) \qquad \mathfrak{Im}\, z > 0$$

mit der komplexen Errorfunktion $w(z)$ (ABRAMOWITZ und STEGUN (1972) [7.1.4]). Das führt zu der gaußförmigen Spektraldichte

$$\rho^{(0)}(\omega) = -\frac{1}{\pi}\mathfrak{Im}\, g_{00}^{(0)}(\omega + i\delta) = \frac{1}{2t\sqrt{\pi}}\, e^{-\left(\frac{\omega}{2t}\right)^2}$$

Ebenfalls benötigt wird die Korrektur erster Ordnung in $\frac{1}{d}$

$$g_{00}^{(1)}(z) = \frac{1}{d}\left[q_1\left(\tfrac{z}{2t}\right) g_{00}^{(0)}(z) + \tfrac{1}{2t}q_2\left(\tfrac{z}{2t}\right)\right] \tag{5.1}$$

mit den Korrekturpolynomen

$$q_1(x) = \frac{1}{4}(-4x^4 + 12x^2 - 3) \qquad q_2(x) = \frac{1}{2}(2x^3 - 5x)$$

Alternativ kann man diese Korrektur aufgrund von (D.10) auch in der folgenden Form ausdrücken:

$$g_{00}^{(1)} = -\frac{1}{d}\frac{t^4}{4}g_{00}^{[iv]}$$

Die nichtdiagonalen Elemente $g_{xy}$ lassen sich mit analogen Methoden berechnen. Es stellt sich heraus, daß für die folgenden Betrachtungen, bei denen das Endergebnis nur bis auf $\mathcal{O}(\frac{1}{d^2})$-Terme genau sein muß, die führende Ordnung in $\frac{1}{d}$ ausreicht[1]:

$$g_{xy} = d^{-\frac{\delta}{2}}\left[\frac{1}{t^\delta}\frac{\partial}{\partial z}g_{00}^{(0)}(z) + \mathcal{O}(d^{-\frac{1}{2}})\right] \qquad \text{mit } \delta=\delta(x,y) \tag{5.2}$$

[1] Diese Beziehung gilt allerdings nur in niedrigster Ordnung, in höheren Ordnungen lassen sich die Gittersprünge nicht durch einfaches Ableiten der diagonalen Greenfunktion ausdrücken, sondern sind vielmehr Linearkombination verschiedener Ableitungsordnungen. Das präzise Resultat findet sich im Anhang D, dort sieht man insbesondere, daß $g_{xy} = g_{yx}$.

Der Propagator im Spezialfall nächster Nachbarn sei mit $g_{01}$ bezeichnet. Es gilt

$$g_{01} = d^{-\frac{1}{2}} t \frac{\partial}{\partial z} g_{00} + \mathcal{O}(\tfrac{1}{d}) \tag{5.3}$$

Mit diesem Rüstzeug läßt sich insbesondere die $\frac{1}{d}$-Korrektur der Gittersumme durch einfach auszuwertende Ausdrücke darstellen.

Bei der gewählten Skalierung der Hoppingstärke ergibt sich mit (5.2) das für die allgemeinen Berechnungen des Kapitels 3 benötigte Skalierungsverhalten des Einschrittpropagators:

$$g_{xy} \sim d^{-\frac{\delta(x,y)}{2}}$$

Somit lassen sich die Ergebnisse des Abschnittes 3.3 auf die Bestimmung der Gittersumme des periodischen Andersonmodells in der Näherung hoher Raumdimensionen anwenden.

### 5.1.2 Die Gittersumme des Andersongitters in $d=\infty$

Die in Abschnitt 3.3 gewonnenen, vergleichsweise abstrakten Ausdrücke für $d=\infty$ (3.22) und die $\frac{1}{d}$-Korrekturen (3.27) stellen allerdings noch Identitäten für Matrizen dar, deren Größe mit der Zahl der Gitterplätze skaliert. In diesem und dem folgenden Abschnitt sollen diese Ausdrücke für das konkrete System des Andersongitters berechnet und so explizit formuliert werden, daß sie analytischen Fragestellungen zugänglich sind.

Dazu muß zunächst die lokale Streumatrix $T(z)=V^2F(z)$ wieder in die Gittersumme resubstituiert werden. Da die lokale Streuung im folgenden als translationsinvariant angesehen wird, geschieht dies am einfachsten, indem jedem Propagator (sowohl dem Einschrittpropagator $g$ als auch dem gesuchten, effektiven Propagator $G$) ein $T$ zugeordnet wird. Das ist gleichbedeutend mit den Ersetzungen $G \to T \cdot G$ und $g \to T \cdot g$ in den jeweiligen Bestimmungsgleichungen.

Für den lokalen effektiven Propagator in $d=\infty$ erhält man aus (3.22)

$$G^{(0)}(z) = \left\langle \frac{g_k(z)}{1 - T(z)(g_k(z) - G^{(0)}(z))} \right\rangle \tag{5.4}$$

Hierbei wurde bereits die Darstellung des Diagonaloperators $\langle \ldots \rangle$ im $k$-Raum (3.7) gewählt. Der ungestörte Bandpropagator $g_k(z) = \frac{1}{z-\epsilon_k}$ erfüllt die Identität

$$(g_k(z))^{-1} - x = (g_k(z-x))^{-1}$$

und daher kann man den obigen Ausdruck umformen zu

$$\frac{g_k(z)}{1-T(z)(g_k(z)-G^{(0)}(z))} = \frac{1}{1+T(z)G^{(0)}(z)} \cdot g_k(z-\frac{T(z)}{1+T(z)G^{(0)}(z)})$$

Nach Mittelung läßt sich so die Matrixgleichung (3.22) bzw. die $k$-Summe (5.4) als eine einfache skalare Selbstkonsistenzgleichung über die ungestörte lokale Bandgreenfunktion $g^{(0)}$ mit verschobenem Argument schreiben:

$$\boxed{G^{(0)} = \frac{1}{1+T(z)G^{(0)}(z)} \cdot g_{00}(z-\frac{T(z)}{1+T(z)G^{(0)}(z)})} \tag{5.5}$$

Für die Berechnung der nächsthöheren Ordnung werden auch die nichtdiagonalen Anteile $G^{(0)}_{xy}$ in der $d{=}\infty$- Näherung benötigt. Durch eine den soeben durchgeführten Umformungen analoge Rechnung erhält man

$$\bar{G}^{(0)}_{xy}(z) = \frac{T(z)}{(1+T(z)G^{(0)}(z))^2} \cdot \bar{g}_{xy}(z-\frac{T(z)}{1+T(z)G^{(0)}(z)}) \tag{5.6}$$

wobei der reduzierte Einschrittpropagator $\bar{g}$ durch $\bar{g}_{xy} := g_{xy} - g_{00}\delta_{xy}$ definiert wird. Man sieht insbesondere sofort, daß $\boldsymbol{G}^{(0)}$ alle Symmetrien von $\boldsymbol{g}$ erbt, so z.B. $\bar{G}^{(0)}_{xy} = \bar{G}^{(0)}_{yx}$ und die Skalierungseigenschaft

$$\bar{G}^{(0)}_{xy} \sim d^{-\frac{\delta(x,y)}{2}} \tag{5.7}$$

### 5.1.3 Die Gittersumme des Andersongitters in $\mathcal{O}(\frac{1}{d})$

Bevor nun die Ergebnisse des Abschnittes 3.3 auch auf die dimensionalen Korrekturen des Andersongitters angewandt werden, sei noch eine wichtige Feststellung vorausgeschickt. Beim Übergang zu einer $\mathcal{O}(\frac{1}{d})$-Rechnung müssen nicht nur Korrekturen weiterer beitragender Gitterwege gemäß (3.27) einbezogen werden, es ist auch zu beachten, daß der Einschrittpropagator $g_{xy}$ für den Grenzfall $d{=}\infty$ bestimmt worden war. Er muß ebenfalls um $\frac{1}{d}$-Beiträge korrigiert werden. Man muß also in der Selbstkonsistenzgleichung (5.5) $g^{(0)}_{00}$ durch $g^{(0)}_{00} + g^{(1)}_{00}$ mit $g^{(1)}_{00}$ aus (5.1) ersetzen, wobei sich ein etwas anderes $G^{(0)}$ ergibt:

$$G^{(0')} = \frac{1}{1+T(z)G^{(0')}(z)} \cdot g_{00}(z-\frac{T(z)}{1+T(z)G^{(0')}(z)}) \tag{5.8}$$

$G^{(0')}$ enthält also neben allen Beiträgen für $d{=}\infty$ zusätzliche $\frac{1}{d}$-Korrekturen. Die im folgenden berechneten Korrekturbeiträge sind allerdings aufgrund ihrer Struktur bereits von der Ordnung $\mathcal{O}(\frac{1}{d})$, hier muß also nur das aus (5.5) und (5.6) bestimmte $G^{(0)}_{xy}$ eingesetzt werden.

Im folgenden soll ausgeführt werden, wie aus den abstrakten Ausdrücken im Ortsraum und im $k$-Raum, die gegen Ende von Kapitel 3 angegeben wurden, konkrete, elementar auswertbare Berechnungsformeln für die Korrekturterme $Q_2, Q_4$ und $Q_5$ erwachsen.

Mit von nun an unterdrücktem Argument $z$ sei abkürzend $q = q(z)$ definiert als

$$q = \frac{1}{1 + TG^{(0)}_{00}}$$

Zudem wird das häufig auftauchende, verschobene Argument mit $\tilde{z} = z - T(z)q(z)$ abgekürzt. Damit gilt für den in alle $Q$-Ausdrücke einzusetzenden, nichtdiagonalen $d\!=\!\infty$-Propapagator $\bar{\boldsymbol{G}}^{(0)}$:

$$\bar{G}^{(0)}_{xy} = q^2 \bar{g}_{xy}(\tilde{z})$$

Bei der Resubstitution von $T(z)$ lautet die Gleichung für die $\frac{1}{d}$-Korrekturen (3.27)

$$\boxed{G^{(1)}(z) = \frac{1}{T(z)} \left( \frac{Q_5 + 2 \cdot Q_4}{1 + Q_2} - Q_4 \right)} \tag{5.9}$$

Die Berechnung von $Q_2 = T^2 \left\langle (\bar{G}^{(0)}_k(\tilde{z}))^2 \right\rangle$ bereitet keine Schwierigkeiten, wenn man $\langle (g_k(z))^2 \rangle = -\frac{\partial}{\partial z} g(z)$ beachtet:

$$\boxed{Q_2 = -T^2 q^4 (g'(\tilde{z}) + g^2(\tilde{z}))} \tag{5.10}$$

($g$ steht abkürzend für $g^{(0)}_{00}$, die Ableitung $g'$ ist eine partielle, vor Einsetzen des Argumentes $\tilde{z}$.)

Zur vereinfachten Berechnung von $Q_4$ muß noch die folgende Überlegung angestellt werden. Betrachtet man die Definition von $Q_4$ im Ortsraum (3.28), so erkennt man, daß aufgrund des Skalenverhaltens (5.7) in führender Ordnung in $\frac{1}{d}$ nur Sprünge zu nächsten Nachbarn von Belang sind:

$$\sum_x (\bar{G}^{(0)}_{0x})^2 (\bar{G}^{(0)}_{x0})^2 = 2d \cdot (\bar{G}^{(0)}_{01})^4 + \mathcal{O}(\tfrac{1}{d^2})$$

Mit (5.6) und (5.3) führt das schließlich auf

$$\boxed{Q_4 = \frac{1}{d} 2T^4 q^8 (t \cdot g'(\tilde{z}))^4 + \mathcal{O}(\tfrac{1}{d^2})} \tag{5.11}$$

Etwas mehr Schwierigkeiten bereitet der Ausdruck für $Q_5$ (s. Abb. 3.2 auf Seite 66):

$$Q_5 = \sum_{x,y} \bar{G}^{(0)}_{0x} (\bar{G}^{(0)}_{xy})^3 \bar{G}^{(0)}_{y0}$$

Es müssen hier in niedrigster Ordnung in $\frac{1}{d}$ nur die Beiträge berücksichtigt werden, bei denen $x$ und $y$ nächste Nachbarn sind. Dann bleibt aber noch die Summe über nächste Nachbaarpare $(x, y)$

$$\sum_{(x,y)\ \text{n.N.}} \bar{G}^{(0)}_{0x} \bar{G}^{(0)}_{y0}$$

zu bestimmen. Dazu sei die Summe aus einer anderen Perspektive betrachtet: Statt den Gitterplatz 0 festzuhalten und alle nächsten Nachbarpaare $(x, y)$ zu durchlaufen, kann man aufgrund der Translationsinvarianz ein *festes* Paar $(0, 1)$ nächster Nachbarn wählen und alle indirekten Wege von 0 über beliebiges $x$ nach 1 durchlaufen. Dabei erhält man genau den gleichen Satz von Wegen wie in der ersten Summe, wenn man das Paar $(0, 1)$ *in jede Raumrichtung genau einmal* legt. Die Summe ist also gleichwertig mit folgendem Ausdruck

$$d \sum_x \bar{G}^{(0)}_{0x} \bar{G}^{(0)}_{x1}$$

Es gilt nun die folgende Identität für *jeden Propagator der Form* $g_k = \frac{1}{z-\epsilon_k}$, unabhängig von der Dimension oder der Dispersion, solange nur die auftauchenden Summen konvergieren:

**Satz:** Seien $x$ und $y$ *beliebige* Gitterplätze, dann gilt

$$\sum_w g_{xw}(z) g_{wy}(z) = -\frac{\partial}{\partial z} g_{xy}(z)$$

**Beweis:** Durch Fourierdarstellung und Ausnutzen der Relation $\frac{\partial}{\partial z} g_k(z) = -g_k^2(z)$ erhält man

$$\begin{aligned} &\sum_w \frac{1}{N^2} \sum_{k_1,k_2} e^{-ik_1(w-x)} e^{-ik_2(y-w)} g_{k_1}(z) g_{k_2}(z) \\ &= \frac{1}{N} \sum_k e^{-ik(y-x)} g_k^2(z) = -\frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{N} \sum_k e^{-ik(y-x)} g_k(z) \end{aligned}$$

□

So einfach diese Aussage zu beweisen ist, impliziert sie doch die wesentliche Tatsache, daß der indirekte Sprung zwischen Gitterplätzen genauso skaliert wie der direkte Propagator. Dies bedeutet insbesondere, daß man für Skalierungsfragen Zwischenpunkte vom Grade 2 eliminieren kann. Die unmittelbare Verallgemeinerung auf mehrere Zwischengitterplätze lautet:

$$\sum_{z_1 \dots z_n} g_{1z_1} \dots g_{z_n y} = (-1)^n n! \frac{\partial^n}{\partial z^n} g_{xy} \sim d^{-\frac{\delta(x,y)}{2}}$$

Aufgrund dieser Betrachtungen erhält man schließlich für $Q_5$ den Ausdruck

$$\boxed{Q_5 = -\frac{1}{d} T^5 q^{10} (t\, g'(\tilde{z}))^3 t\, (g''(\tilde{z}) + 2g(\tilde{z})g'(\tilde{z}))} \tag{5.12}$$

Die auftretenden höheren Ableitungen von $g = g_{00}$ kann man mit Hilfe der Rekursionsformel (D.7) bestimmen.

## 5.2 Das Anderson-Fano-Gitter in $d = \infty$

Die Gültigkeit der Gitter-Selbstkonsistenzgleichung (3.22) in unendlichen Raumdimensionen ist nicht auf das periodische Andersonmodell beschränkt, sondern kann auch auf andere Modellsysteme mit einem analogen Gitteranteil angewandt werden.

In Abschnitt 2.4 wurde erläutert, wie das Gesamtsystem des Andersongitters in ein lokales Problem und die den Gittereinfluß beschreibende Gittersumme aufgetrennt wurde:

- Das lokale Problem ist ein **effektives Single-Site-System** und umfaßt alle *lokalen* Korrelationen, wie sie z.B. beim Single-Impurity Andersonmodell durch die lokale Wechselwirkung $U$ entstehen. Diese lassen sich nur näherungsweise und in gewissen Parameterbereichen (z.B. mit der NCA) behandeln.
- Die *nicht-lokalen* Korrelationen werden durch das **Excluded-Volume-Problem** der Gittersumme, das in dieser Arbeit untersucht wird, beschrieben. Dieses läßt sich in unendlichen Raumdimensionen *exakt* lösen. Im Falle endlicher Dimensionen stellt die Selbstkonsistenzgleichung der Gittersumme eine Näherung dar, die durch Hinzunahme von dimensionalen Korrekturen noch verbessert werden kann.

Um die Qualität dieses effektiven Single-Site-Ansatzes zu prüfen, soll er in diesem Abschnitt auf ein exakt lösbares Gittersystem angewandt werden. Ein solches entsteht z.B., wenn man im periodischen Andersonmodell die lokale Coulombwechselwirkung $U = 0$ setzt[2]. Dieses wechselwirkungsfreie Andersonmodell, das auch als *Anderson-Fano-Modell* bezeichnet wird, kann z.B. die Bildung virtuell gebundener Zustände erklären (vgl. HEWSON (1993), [Kap.1.4]). Es soll nun – parallel zu der vor-

[2]Dies ist äquivalent zum Grenzfall $n = 1$, dem Andersongitter mit nur einem Spinkanal.

gestellten Behandlung des vollen Andersonmodells – mit Hybridisierungs-Störungstheorie berechnet werden. Da das Modell aber nur noch Einteilchenterme enthält, läßt es sich – sowohl in seiner Einstörstellenform als auch in der periodischen Form – exakt lösen. (Eine kurze Lösung mit Hilfe von Bewegungsgleichungen findet sich im Anhang E.) Im Vergleich wird festzustellen sein, daß die Berechnung über die Gittersumme den exakten Grenzfall reproduziert.

Bemerkung:
Neben dem hier betrachteten Grenzfall $U \to 0$ des periodischen Andersonmodells gibt es noch weitere, exakt lösbare Grenzfälle (siehe z.B. Czycholl (1986))

- Im Fall $V \to 0$ entkoppeln Band und Störstellen, und der Hamiltonoperator ist bereits einteilchendiagonal. Die Selbstkonsistenzgleichung reproduziert diesen Trivialfall: Für $V = 0$ wird das Band nicht modifiziert – effektives und ungestörtes Band sind identisch – und das lokale System ist ein triviales lokales Mehrniveausystem, das man exakt diagonalisieren kann.
- Ähnlich wird der Grenzfall eines unendlich schmalen Bandes $\epsilon_k \to \epsilon_0$ trivial. Das Andersonmodell wird ein rein lokales Problem, das exakt diagonalisiert werden kann. Die Bandspektralfunktion wird durch einen Deltapeak mit renormierter Energie dargestellt. Auch diesen Grenzfall reproduziert die Selbstkonsistenzgleichung.
- Als einziger nicht-trivialer Grenzfall, der weiterhin echte Vielteilcheneffekte beinhaltet, bleibt der gemischte Grenzfall $U \to \infty, N \to \infty$ bei gleichzeitig verschwindender Hybridisierung $V^2 \to 0$, so daß $NV^2 = \Gamma$ konstant bleibt. Wie auch in den beiden vorangehenden Fällen existiert allerdings kein generisches Gitterproblem, und die räumlichen Korrelationen, die durch die Gitterselbstkonsistenzgleichung repräsentiert werden, verschwinden.

Als einziger, exakt lösbarer Grenzfall, bei dem ein echtes Gittermodell zu lösen ist, bleibt also das $U=0$-Andersongitter.

Der Hamiltonoperator des Anderson-Fano-Gitters hat in $k$-Darstellung die folgende Gestalt:

$$H_{\mathrm{PAM,U=0}} = \sum_k \epsilon_k c_k^+ c_k + \epsilon_f \sum_k f_k^+ f_k + V(\sum_k c_k^+ f_k + f_k^+ c_k)$$

Eine Behandlung dieses Systems über einen effektiven Single-Site-Ansatz vollzieht sich nun in den folgenden Schritten: Da das lokale Problem wechselwirkungsfrei ist, muß nicht auf die NCA als Näherung zurückgegriffen werden. Seine $f$-Greenfunktion läßt sich vielmehr exakt angeben (E.5), allerdings muß die ungestörte ($V=0$) Single-Impurity-Bandgreenfunktion $G_c^{(0)}$ durch die des effektiven Bandes $\tilde{G}_c$ ersetzt werden:

$$G_{f,k} = \frac{1}{z - \epsilon_f - V^2 \tilde{G}_c}$$

$\tilde{G}_c$ wird über die Gitterselbstkonsistenzgleichung in $d{=}\infty$ (5.5) berechnet:

$$\tilde{G}_c = \frac{1}{1+V^2 G_f \tilde{G}_c} \cdot G_c^{(0)}(z - \frac{V^2 G_f}{1+V^2 G_f \tilde{G}_c})$$

Mit Hilfe der beiden T-Matrix-Gleichungen (E.4) des effektiven Single-Impurity-Modells

$$G_c = \tilde{G}_c + \tilde{G}_c V^2 G_f \tilde{G}_c \quad \text{und} \quad G_f = \frac{1}{z-\epsilon_f} + \frac{1}{z-\epsilon_f} V^2 G_c \frac{1}{z-\epsilon_f}$$

kann man noch die echte Bandgreenfunktion $G_c$ ermitteln und das Argument der Selbstkonsistenzgleichung vereinfachen. Es ergeben sich die beiden Gleichungen

$$\begin{aligned} G_c(z) &= G_c^{(0)}(z - \frac{V^2}{z-\epsilon_f}) \\ G_f(z) &= \frac{1}{z-\epsilon_f} + \frac{V^2}{(z-\epsilon_f)^2} \cdot G_c^{(0)}(z - \frac{V^2}{z-\epsilon_f}) \end{aligned} \tag{5.13}$$

Diese stimmen mit den exakten Lösungen des *periodischen* Modells (E.3) aus Anhang E überein. Offensichtlich gilt dieses Gleichungssystem *in allen Dimensionen* und *für jedes Band*, so daß auch bei endlicher Dimension die für $d{=}\infty$ ermittelte Gittergleichung *exakt* ist. Das manifestiert sich darin, daß die Selbstkonsistenz bezüglich $G_c$ aus den Gleichungen herausgefallen ist.

*Die effektive Single-Site-Näherung ($d{=}\infty$-Näherung) für das Andersongitter wird im Grenzfall $U \to 0$ exakt.*

# Kapitel 6

# Numerische Ergebnisse für das Andersongitter

Die bisherigen Aussagen über die Qualität der näherungsweisen Beschreibung endlichdimensionaler Systeme durch unendlichdimensionale Modelle fanden im Rahmen der Analyse von allgemeinen Random bzw. Self-avoiding Loops statt. Im vorangegangenen Kapitel wurden die allgemeinen Resultate für Gittersummen in hohen Dimensionen schließlich auf das Andersongitter in der effektiven Single-Site-Näherung angewandt. Dies führte zu expliziten Ausdrücken, die einer numerischen Auswertung zugänglich sind. Damit können nun konkrete, selbstkonsistente Berechnungen vorgenommen werden, woraus sich weitere Kriterien für die Qualität der $d=\infty$-Näherung und ihrer $\frac{1}{d}$-Korrekturen ergeben.

Zunächst seien einige kurze Erläuterungen zu den verwendeten numerischen Verfahren vorausgeschickt. Für Details sei auf den Abschnitt F.1 im Anhang verwiesen. Sodann werden die selbstkonsistent berechneten Ergebnisse für verschiedene effektive Single-Site-Ansätze vorgestellt und interpretiert. Da die für $d=\infty$-Rechnungen charakteristische Divergenzproblematik wesentlich durch die Struktur der Bestimmungsgleichung für das effektive Band bedingt sind, soll deren Lösungsstruktur in einem letzten Abschnitt noch einmal unabhängig vom Single-Impurity-Problem systematisch analysiert werden.

## 6.1 Numerische Verfahren

Die hier vorzustellenden verschiedenen Variationen der effektiven Single-Site-Theorie des Andersongitters setzen sich entsprechend der theoretischen Formulierung aus zwei Teilproblemen zusammen. Für beide muß in einer numerischen Behandlung mit dem Computer eine adäquate Lösung implementiert werden.

- Es müssen die durch die Gittersumme (2.12) repräsentierten räumlichen Korrelationen in ihren unterschiedlichen Näherungen berechnet werden. Hierzu gehören die bereits bekannten Formulierungen der LNCA (2.20) und XNCA (5.5), die Ergänzung der XNCA um dimensionale Korrekturen (5.9), sowie noch vorzustellende Mischformen dieser Ansätze.
- Es muß die lokale f-Streumatrix eines Single-Impurity Systems mit *beliebig vorgegebenem* effektiven Band berechnet werden. Hierzu werden die NCA-Gleichungen (2.5), (2.7) herangezogen.

Beide Teilprobleme sind in hohem Maße nichtlinear, so daß das Gesamtproblem selbstkonsistent gelöst werden muß. Es ergibt sich demnach bereits die in Abbildung 6.1 dargestellte, mehrfach selbstkonsistente Grobstruktur eines effektiven Single-Site-Problems (s. Abbildung 6.1):

- Das Single-Impurity-Problem wird (zunächst für ein ungestörtes Elektronenband $\rho_0$) durch Iteration der NCA-Gleichungen (2.5) bis zur Selbstkonsistenz gelöst (a)[1] und die lokale f-Greenfunktion $G_f$ (2.5) aus den berechneten Selbstenergien bestimmt (b).
- Aus der lokalen Streumatrix $T = V^2 G_f$ (c) wird eine neue effektive Bandgreenfunktion $\tilde{G}_c$ bestimmt (d). In $d = \infty$ geschieht dies aus der Selbstkonsistenzbedingung (5.5). Im Fall der LNCA läßt sich $\tilde{G}_c$ explizit berechnen (2.20).
- Die resultierende, neue effektive Banddichte $\tilde{\rho} = -\frac{1}{\pi}\mathfrak{Im}\,\tilde{G}_c$ (e) geht dann in die Neuberechnung des Einstörstellenproblems ein. Erst wenn die effektive Banddichte selbstkonsistent reproduziert wird (gemessen nach einem numerischen Gütekriterium), endet die Iteration.

[1] (a)–(e) beziehen sich auf Abbildung 6.1.

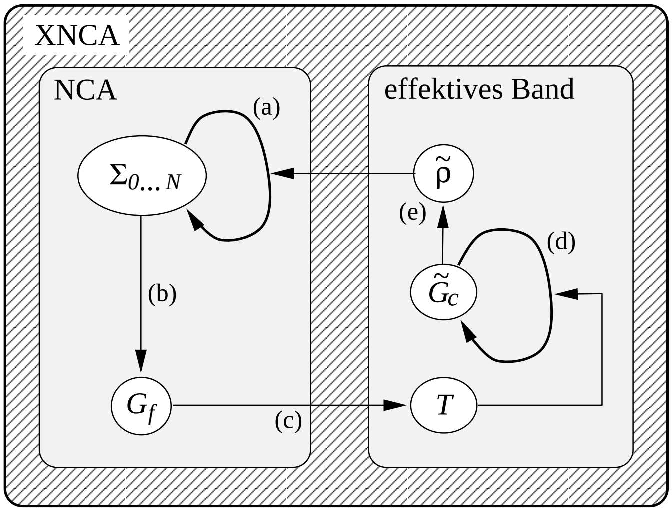



**Abbildung 6.1** Struktur einer effektiven Single-Site-Rechnung

Die Schwierigkeiten, die sich bei der numerischen Behandlung der NCA-Gleichungen ergeben, sind bereits seit längerem bekannt und sind vor allem auf die beiden folgenden Probleme zurückzuführen:

Zum einen verschwinden die beteiligten Propagatoren nicht unterhalb einer Grundzustandsenergie, sondern besitzen exponentiell auslaufende Enden, deren Beiträge bei numerischer Intergration divergieren können. Um dem abzuhelfen, müssen die NCA-Gleichungen in eine modifizierte Darstellung gebracht werden, in der sie eine numerisch stabile Lösung erlauben. Die hier verwendete äquivalente Formulierung der NCA-Gleichungen findet sich in Anhang F.1 beschrieben.

Zum zweiten ergibt sich durch die stark singulären Strukturen, die sich bei tiefen Temperaturen ausbilden, die Notwendigkeit, die beteiligten Dichten bzw. Greenfunktionen für eine numerische Integration flexibel an den relevanten Stellen abzustützen. Dies wird allein durch die im Laufe der Iteration variierende effektive Banddichte unabdingbar. Um diese Schwierigkeiten zu bewältigen, wurde eine Methode entwickelt, die beteiligten, nur numerisch zugänglichen Funktionen automatisch gemäß der Verteilung ihres spektralen Gewichtes abzustützen. Dabei wird im Verlaufe der Iteration das Stützstellennetz immer wieder an Veränderungen in der Funktion angepaßt. Eine kurze Erläuterung dieses Verfahrens wird in Anhang F.2 vorgestellt.

Das entwickelte Programm ist somit in der Lage in weiten Parameterbereichen, ohne individuelle Anpassung von bestimmten Prozeduren, d.h. ohne äußere Eingriffe, effektive Single-Site-Rechnungen durchzuführen. Insbesondere lassen sich so die unterschiedlichen Resultate der verschiedenen Autoren, sowie auch weitere, zukünftige effektive Single-Site-Ansätze behandeln und vergleichen. (Anhang F gibt zu diesem

Zweck eine kurze Übersicht über die Leistungsmerkmale und Hauptstrukturen des Programms.)

Insbesondere sind alle in dieser Arbeit vorgestellten numerischen Resultate mit dem beschriebenen Programm erzeugt worden. Für die Originalergebnisse der verschiedenen Autoren sei auf die jeweils angegebenen Literaturstellen verwiesen.

## 6.2 Effektive Single-Site-Rechnungen für das Andersongitter

Es sei noch einmal darauf hingewiesen, daß die im folgenden vorgestellten Ergebnisse alle aus Näherungen stammen, die sich allein durch ihre Behandlung der räumlichen Korrelationen – beschrieben durch die Excluded-Volume-Gittersumme (2.12) – unterscheiden. Die verwendeten $\mathcal{O}(\frac{1}{d})$-Korrekturen wurden zwar bezüglich der Auswertung der Gittersumme vollständig aufsummiert, weitere Ergänzungsterme zu den $d{=}\infty$-Abschätzungen des Einstörstellenansatzes gemäß der Argumentation in Abschnitt 2.4.1 bleiben hier allerdings unberücksichtigt

In den folgenden Abschnitten gelte die verkürzte Schreibweise $G := \tilde{G}_c = G_{00}^{(0)}$ für den effektiven Bandpropagator, $T := T(z) = V^2 G_f(z)$ für die Streumatrix und $g := g_{00}$ für die jeweils verwendete lokale Greenfunktion der ungestörten Bandpropagation.

### 6.2.1 Ergebnisse der XNCA

Zur Berechnung der Gittersumme in der XNCA wurde für den effektiven Propagator $\tilde{G}_c$ die *Selbstkonsistenzgleichung* (5.4) abgeleitet. Die Mittelung $\langle \ldots \rangle$ ließ sich dabei durch einen Ausdruck, der allein das ungestörte Band bei einem verschobenem Argument (5.5) auswertet, ersetzen:

$$G^{\mathrm{XNCA}} = \frac{1}{1+TG^{\mathrm{XNCA}}}\, g(z - \frac{T}{1+TG^{\mathrm{XNCA}}})$$

mit dem Gaußband $g$ gemäß (D.5) und (D.6).

Bei der zugehörigen selbstkonsistenten Berechnung des Andersongitters wurden die folgenden Parameter zugrundegelegt:

| | | |
|---|---|---|
| Hoppingstärke | $t = 1/(2\sqrt{\pi})\text{eV} = 0.282\text{eV}$ | |
| $\Rightarrow$ Bandbreite | $D = 0.399\text{eV}$ | |
| $f$-Energie | $\epsilon_f = -0.20\text{eV}$ | (P1) |
| $f$-Entartung | $N = 6$ | |
| Hybridisierungsstärke | $V^2 = 0.011(\text{eV})^2$ | |
| Kondotemperatur | $T_K = 165.7K$ | |

Die Kondotemperatur (für das Single-Impurity-System) wurde nach der Formel

$$T_K = D\left(\frac{NW_0}{D}\right)^{\frac{1}{N}} \exp\left(\frac{\epsilon_f}{NW_0}\right)$$

mit der Hybridisierungsintensität $W_0 = \pi\Gamma = V^2\rho_c(\epsilon_F)$ und der Bandbreite $D = \sqrt{\langle E^2\rangle}$ ermittelt (vgl. z.B. Hewson (1993)).

Die folgenden beiden Abbildungen zeigen die typische Temperaturabhängigkeit der $f$-Spektraldichte. Unterhalb der Kondotemperatur entsteht in der $f$-Dichte $\rho_f$ die charakteristische *Abrikosow-Suhl-Resonanz* (Abbildung 6.2), die bereits für das Single-Impurity-System (SI), das den Fall verdünnter Störstellen beschreibt, charakteristisch ist (Abbildung 6.3).

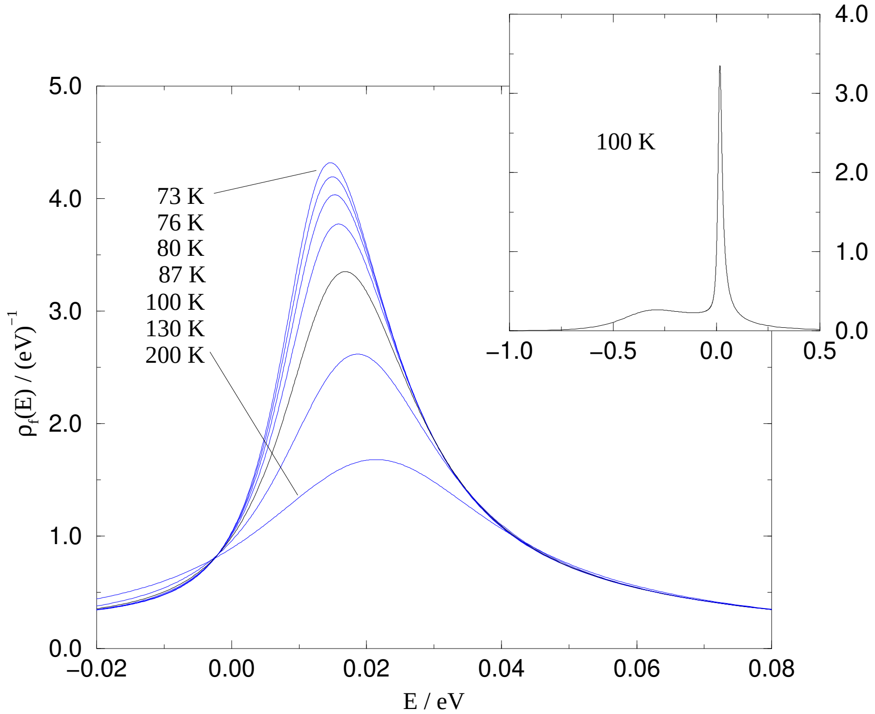



**Abbildung 6.2**

$f$-Dichte $\rho_f$ der XNCA für (P1)

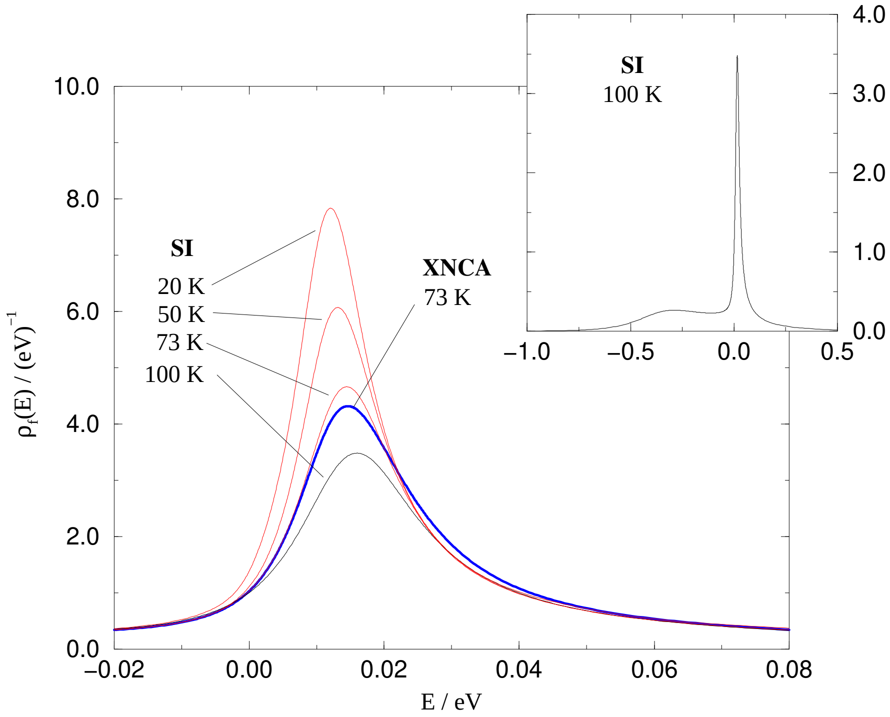



**Abbildung 6.3**

$f$-Dichte $\rho_f$ der Single-Impurity-Rechnung (SI) für (P1)

Die gegenüber dem verdünnten System hinzutretenden Gittereffekte erkennt man deutlichsten an der Spektraldichte des effektiven Bandes $\rho(E)$ (Abbildung 6.4). An der Stelle, an der in der $f$-Dichte die Resonanz entsteht, erfährt das effektive Band eine zunehmende Verstärkung. Über die Selbstkonsistenz wirkt diese erhöhte Banddichte auf die $f$-Dichte zurück. Mit abnehmender Temperatur wird diese Struktur in der Banddichte stark singulär und nimmt die Form eines nichtanalytischen Peaks an. Sobald dieser Peak voll ausgebildet ist, bricht die selbstkonsistente Bestimmung des effektiven Bandes zusammen. Dieser Zusammenbruch findet bei einer typischen Temperatur $T_\chi$ in der Größenordnung von etwa $0.5T_K$ statt. Oberhalb von $T_\chi$ gibt es in der Temperaturabhängigkeit der $f$-Dichte jedoch kein Anzeichen für dieses singuläre Verhalten. Das Einstörstellensystem (Abbildung 6.3), bleibt bis zu wesentlich tieferen Temperaturen lösbar. Auch erscheint der Einfluß der vergrößerten effektiven Banddichte auf die Resonanz in der $f$-Dichte gering. (Weitere Bemerkungen hierzu folgen am Schluß des Abschnittes.) Der Zusammenbruch der XNCA läßt sich also allein anhand der Eigenschaften der Selbstkonsistenzleichung charakterisieren – was in Abschnitt 6.4 geschehen soll.

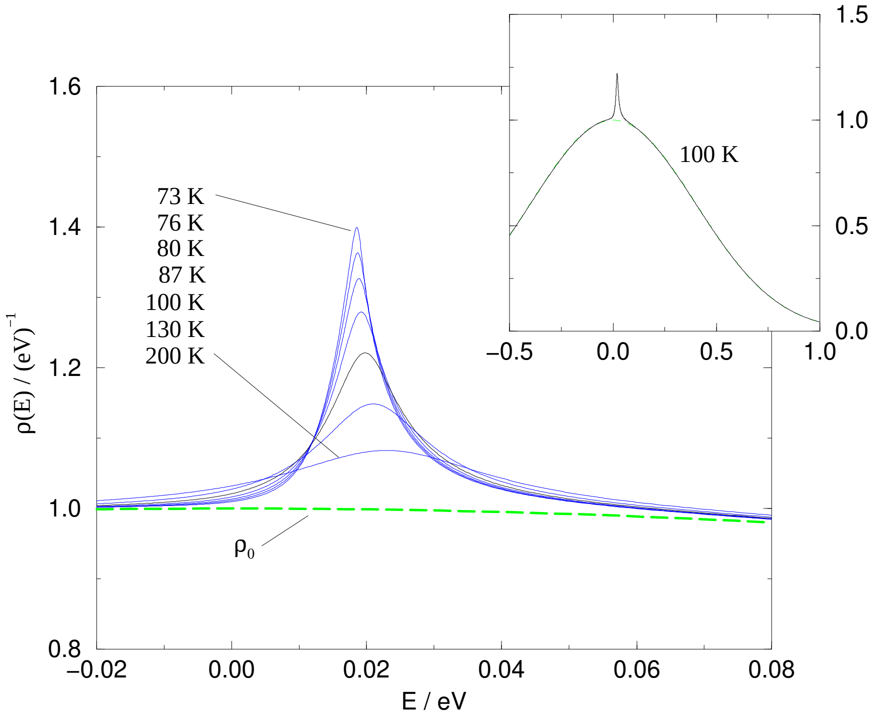



**Abbildung 6.4**
Effektive Banddichte $\rho$ und
ungestörte Banddichte $\rho_0$ der XNCA

Die hier beschriebene Verhaltensweise der numerischen Lösungen der XNCA findet sich bei allen Autoren, die das Andersongitter in $d = \infty$ mit der effektiven Einstörstellenmethode behandeln. Unterhalb von $T_\chi$ führt eine Bestimmung der effektiven Dichte durch Iteration bis zur Selbstkonsistenz nicht mehr zu einer stabilen Lösung, sondern zeigt divergentes Verhalten im Bereich des Peaks. Um dennoch zu Temperaturen unterhalb von $T_\chi$ vorzudringen, werden zumeist zwei Wege beschritten:

- Durch verfeinerte numerische Analyse lassen sich im Bereich des Peaks weitere instabile Lösungen ausmachen[2]. Setzt man aus ihnen eine durchgehende Lösung zusammen, so findet man, daß die effektive Banddichte unter Beibehaltung ihrer singulären Struktur weiter anwächst. Auf diese Weise gelangt man allerdings nur zu unwesentlich niedrigeren Temperaturen. Im Schlußteil dieses Kapitels (Abschnitt 6.4) wird sich herausstellen, warum dieses Vorgehen physikalisch nicht zu rechtfertigen ist. In allen Darstellungen dieser Arbeit sind daher auch unterhalb von $T_\chi$ keine effektiven Banddichten mehr angegeben.

[2]Persönliche Mitteilung von P. Schönenberg. Vgl. auch die Abbildungen 8.6 und 8.7 bei Gruissem (1995).

- Eine weitere Möglichkeit, das singuläre Verhalten zu umgehen, besteht darin, die Selbstkonsistenz dahingehend abzuschwächen, daß man nur endlich viele Iterationsschritte durchgeführt. Die Bedeutung dieses Verfahrens wird im folgenden Abschnitt 6.2.2 näher untersucht.

An dieser Stelle sollen die Ergebnisse zweier typischer $d=\infty$-Rechnungen eingeordnet werden.

Hülsenbeck und Qin (1994) arbeiten mit einem zur Selbstkonsistenzgleichung äquivalenten Gleichungssystem (vgl. Abschnitt 2.4.3) und stoßen folglich auf dasselbe pathologische Verhalten in der numerischen Lösung des Andersongitters. Sie wählen das in $d=\infty$ korrekte Gaußband als ungestörtes Band und die Parameter

| | |
|---|---|
| Hoppingstärke | $t = 0.5\text{eV}$ |
| $\Rightarrow$ Bandbreite | $D = 0.707\text{eV}$ |
| $f$-Energie | $\epsilon_f = -0.15\text{eV}$ |
| $f$-Entartung | $N = 6$ |
| Hybridisierungsstärke | $V^2 = 0.01(\text{eV})^2$ |
| Kondotemperatur | $T_K = 58.8K$ |

(P2)

Hiermit läßt sich die in obiger Arbeit angegebene Temperaturabhängigkeit der effektiven Banddichte im wesentlichen bestätigen (Abbildung 6.5). Bei $T_\chi \simeq 25K \simeq 0.5T_K$ findet der charakteristische Zusammenbruch unter Ausbildung einer singulären effektiven Banddichte statt. Die Autoren geben ebenfalls an, bei tieferen Temperaturen numerische Schwierigkeiten mit Instabilitäten in der Bestimmung des effektiven Bandes zu haben. (Die dort angegebenen absoluten Temperatur- und Energiewerte sind allerdings inkonsistent und scheinen auf einer falschen Skalierung, die nicht mehr zurückverfolgbar ist, zu beruhen.)

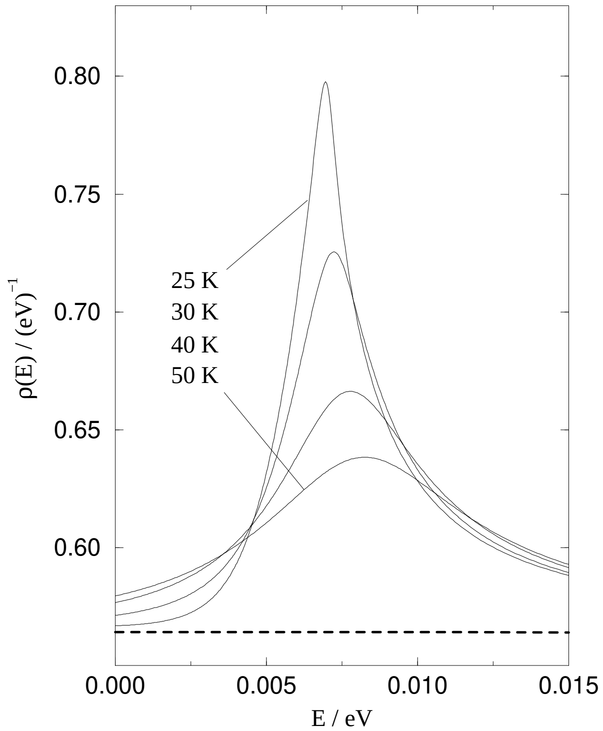



**Abbildung 6.5**

Effektive Banddichte $\rho$ für (P2)

Im Gegensatz zu den bisher vorgestellten Rechnungen legen KIM, KURAMOTO und KASUYA (1987a und 1990) ein Kastenband mit halber Breite $D$ zugrunde:

$$\rho(E) = \frac{1}{2D}\Theta(D - |E|) \quad , \qquad g(z) = \frac{1}{2D}\log\frac{z/D+1}{z/D-1}$$

Dies ist allerdings mit der Annahme unendlicher Dimensionen nicht vereinbar, da nach dem zentralen Grenzwertsatz jedes kartesische Produkt identischer eindimensionaler Dispersionen für $d\to\infty$ in ein Gaußband mündet. Für die spezifischen Pathologien der Gitter-Selbstkonsistenzschleife scheint dies aber unerheblich zu sein.

Es werden die folgenden Parameterwerten zugrundegelegt[3] ($1\text{eV} = 11604K$):

| | | |
|---|---|---|
| Bandbreite | $D = 10^4 K = 0.862\text{eV}$ | |
| (Kastenband !) | | |
| $f$-Energie | $\epsilon_f = -1500K = -0.129\text{eV}$ | |
| $f$-Entartung | $N = 6$ | (P3) |
| Hybridisierungsstärke | $W_0 = 42.91K$ | |
| | $\Rightarrow V^2 = 0.0064(\text{eV})^2$ | |
| Kondotemperatur | $T_K = 16.0K$ | |

[3]Der Wert für $W_0$ ist in der Arbeit mit $135 = 500/\pi$ nicht korrekt angegeben und wurde für die vorliegenden Rechnungen korrigiert.

Hiermit lassen die die Ergbnisse der Arbeit oberhalb der Zusammenbruchstemperatur, die hier $T_\chi \simeq 7.5K$ beträgt, reproduzieren. Wieder ist die Ausbildung der singulären Struktur in der Banddichte deutlich zu erkennen (Abbildung 6.6).

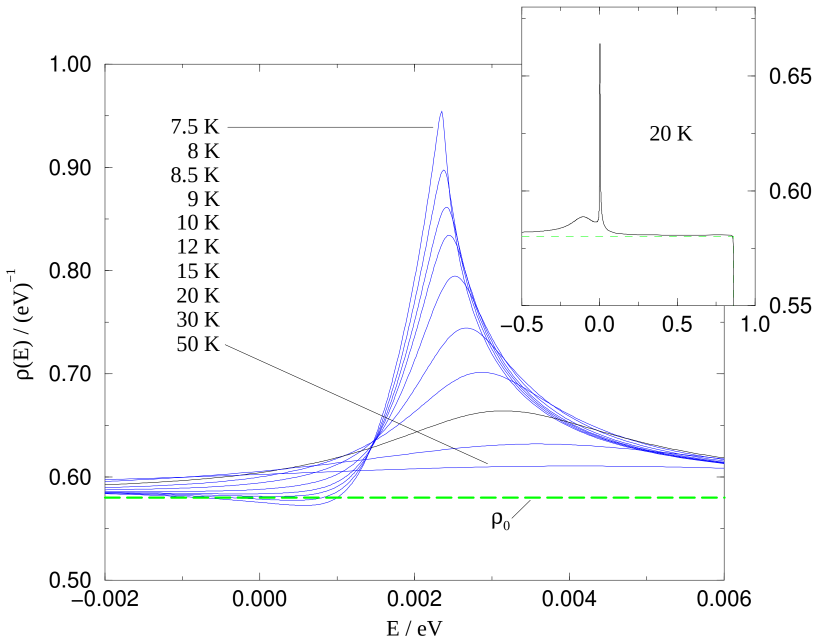



**Abbildung 6.6**
Effektive Banddichte $\rho$ und
ungestörte Banddichte $\rho_0$ für (P3)

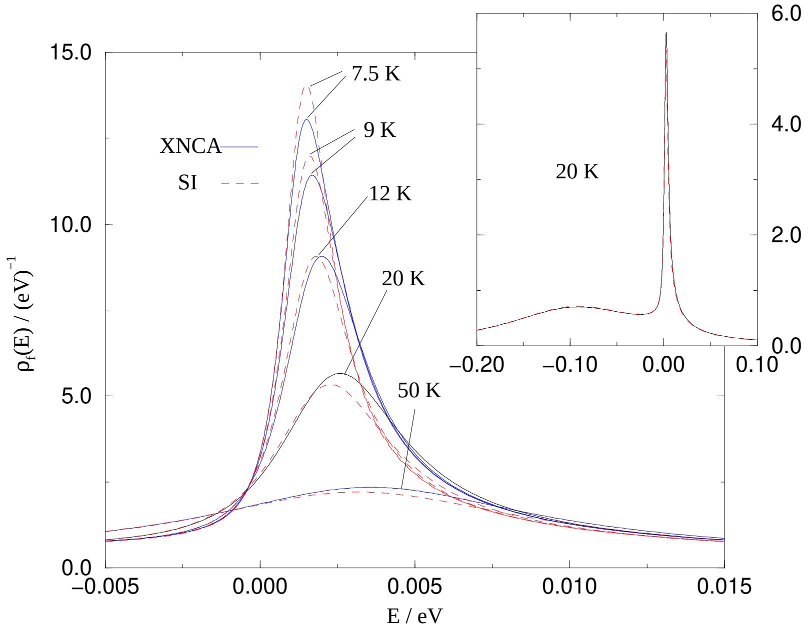



**Abbildung 6.7**
$f$-Dichte $\rho_f$ für (P3)
XNCA und zugehöriges Single-Impurity-System

Daneben läßt sich aus den gleichzeitig dargestellten $f$-Dichten der vollen Gitterrechnung (XNCA) und der Einstörstellenrechnung (SI) (Abbildung 6.7) eine weitere Tatsache entnehmen: Die Vielteilchenresonanz wird abhänging von der Temperatur durch die Gittereffekte einmal verstärkt ($T=20K$) und ein anderes Mal abgeschwächt ($T = 50K$). Man kann also keineswegs von einer „kooperativen Verstärkung" des Kondoeffektes sprechen (vgl. Kim, Kasuya und Kuramoto (1987a). Diese belegen die Verstärkung lediglich bei der Temperatur $T=20K$.) Vielmehr ist bei hinreichend tiefen Temperaturen eher die entgegengesetzte Beobachtung zutreffend (Hülsenbeck und Qin (1994)). Nach den obigen Beobachtungen ist dieser Effekt aber in keinem Fall von Bedeutung, da er lediglich die Zusammenbruchstemperatur leicht verschiebt.

Die Methode, die die Autoren verwenden, um auch jenseits des Zusammenbruchs noch numerische Lösungen zu erhalten (XNCA-1), wird im folgenden Abschnitt näher betrachtet.

### 6.2.2 Ergebnisse von LNCA, XNCA-1 und Mischformen

Ein häufig gewähltes Verfahren, den Lösungszusammenbruch bei der numerischen Berechnung des effektiven Bandes zu umgehen, ist, die Selbstkonsistenzgleichung nicht auszuiterieren. Kim, Kasuya und Kuramoto (1990) schlagen z.B. vor, sich mit einer einfachen Iteration zu begnügen, und bezeichnen die so entstehende Näherung mit XNCA-1:

$$G^{\mathrm{XNCA-1}} = \frac{1}{1+Tg}\, g(z - \frac{T}{1+Tg})$$

Dies wird mit einem störungstheoretischen Argument, das den Fehler als $\mathcal{O}(V^6)$ klassifiziert, begründet. Diese Näherung ist jedoch in $d=\infty$ (und auch bezüglich der von den Autoren vertretenen $\mathcal{O}(\frac{1}{z_n})$-Näherung) nicht mehr korrekt. Zudem belegen sie die Übereinstimmung der numerischen Ergebnisse lediglich für die $f$-Dichte der XNCA und der XNCA-1 bei $T = 20K$, welche jedoch bei tieferen Temperaturen zunehmend voneinander abweichen.

Ebenso wie die XNCA-1 ist auch die LNCA, die von den räumlichen Korrelationen der Gittersumme lediglich die sofortige Rückkehr ausschließt (2.19), nicht in $d=\infty$ exakt. Auch hier ist kein Lösungszusammenbruch festzustellen (vgl. Grewe (1983b)), und die Lösungen können bis zu deutlich tieferen Temperaturen verfolgt werden. Die folgende gemeinsame Darstellung von XNCA-1 und LNCA bei abnehmender Temperatur mit den Parametern (P1) macht dies deutlich.

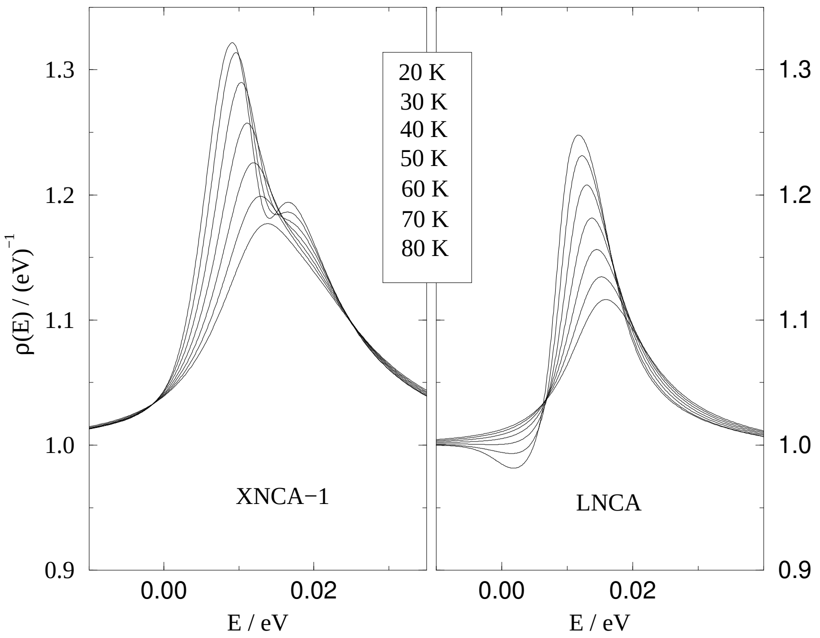



**Abbildung 6.8**
Effektive Banddichte $\rho$
von XNCA-1 und LNCA für (P1)

Besonders auffällig ist die bei beiden Verfahren sich ausbildende Feinstruktur des Peaks, die in anderen Parameterbereichen durchaus noch ausgeprägter sein kann. Wieso diese bei selbstkonsistenten Rechungen, wie der XNCA nicht entsteht, läßt sich erkennen, wenn man das fortschreitende Entstehen der Divergenz bis zum Lösungszusammenbruch in der folgenden Abbildung verfolgt. Sie zeigt, wie die vollständige selbstkonsistente Lösung von der Iterationszahl der Gitterselbstkonsistenzgleichung abhängt. Die entstehenden Näherungen wären somit als XNCA-1, XNCA-2, etc. zu bezeichnen. Es wurde der Parametersatz (P1) und eine Temperatur einmal unterhalb und einmal oberhalb $T_\chi$ gewählt.

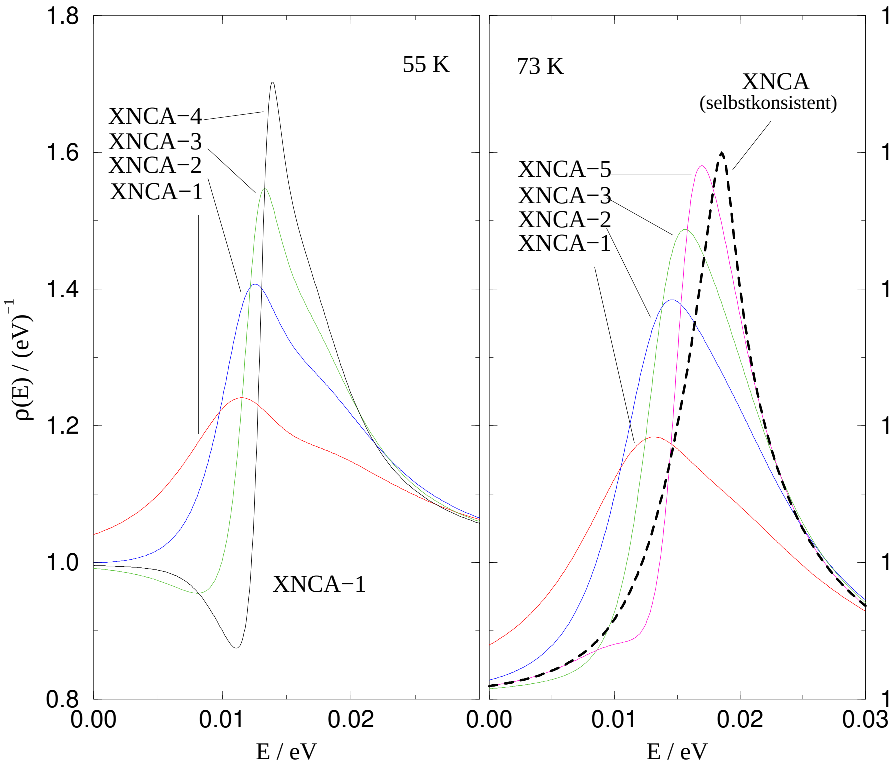



**Abbildung 6.9**
effektive Banddichte $\rho$
der XNCA-1, XNCA-2 etc. für (P1)

Bei $T < T_\chi$ erkennt man, wie die zusätzliche Mulde sich bei fortschreitender Iterationstiefe immer stärker gegen die Stelle verschiebt an der die Singularität entsteht, bis die Lösung schließlich zusammenbricht. Oberhalb der Zusammenbruchstemperatur läßt sich dieselbe, allerdings schwächer ausgeprägte Entwicklung verfolgen. Für dieses Verhalten läßt sich die folgende Erklärung, welcher auch auf der Ebene der Self-avoiding Loops Bedeutung zukommt, angeben. Nichtselbstkonsistente Verfahren, wie die LNCA oder die XNCA-1 berücksichtigen nur Excluded-Volume-Korrekturen auf einer endlichen Längenskala längs des Weges durch das Gitter. Die Iterationstiefe entspricht dann der Einbeziehung von Korrelationen auf immer größerer Längenskala. Das Verschwinden der Feinstrukturen des Peaks bzw. die Divergenz deuten somit ein weiteres Mal daraufhin, daß für $d\!=\!\infty$ die langskaligen Korrelationen das System dominieren.

Die hier bereits angedeutete Verwandtschaft der nicht selbstkonsistenten Verfahren läßt sich mit Hilfe einer gemeinsamen Formulierung von XNCA und LNCA (Keiter, Leuders, Melsheimer und Schönenberg (1995), s.a. Ende Abschnitt 2.4.2) auch auf formaler Ebene verstehen. Von den Gewichtungsfaktoren $\frac{1}{n}$ wird zunächst durch Einführung eines formalen Parameters $\lambda$ abgesehen (2.16). Das Ergebnis $G^{<\infty>}$ der $d\!=\!\infty$-exakten Summation der Excluded-Volume-Effekte wird dann durch die parametrisch von $\lambda$ abhängende Selbstkonsistenzgleichung bestimmt

$$G^{<\infty>}(\lambda) = \frac{1}{1+\lambda T G^{<\infty>}(\lambda)}\, g(z - \frac{\lambda T}{1+\lambda T G^{<\infty>}(\lambda)}) \tag{6.1}$$

Der einfachen Iteration in der XNCA-1 entpricht die mit $^{<1>}$ indizierte Lösung, die aus der folgenden Gleichung zu gewinnen ist

$$G^{<1>}(\lambda) = \frac{1}{1+\lambda T g}\, g(z - \frac{\lambda T}{1+\lambda T g}) \tag{6.2}$$

Die mit $^{<\mathrm{nia}>}$ bezeichnete Näherung, die bei alleiniger Berücksichtigung des Ausschlusses sofortiger Rückkehr entsteht, ist bereits in (2.19) angegeben und läßt sich durch einige Umformungen in die folgende Form bringen

$$G^{<\mathrm{nia}>}(\lambda) = \left(\frac{1}{1+\lambda T g}\right) G^{<1>}(\lambda) + \left(1 - \frac{1}{1+\lambda T g}\right) g \tag{6.3}$$

Sie ist also (bis auf die Vorfaktoren) als eine einfache konvexe Linearkombination aus XNCA-1 und der Single-Impurity-Lösung $g$ zu identifizieren.

Während die drei Ausdrücke (6.1)–(6.3) für eine unterschiedliche Behandlung der räumlichen Korrelationen stehen, läßt sich die Wahl der Gewichtungsfaktoren nun über die Behandlung des Parameters $\lambda$ steuern. Dabei erhält man neben der XNCA und LNCA auch *Mischformen*

<table>
<tr><td></td><td>$\lambda = 1$</td><td>$\int_0^1 d\lambda \ldots$</td><td>$\lambda = 0$</td></tr>
<tr><td>$G^{<\infty>}$</td><td>XNCA</td><td>YNCA</td><td rowspan="3">SI</td></tr>
<tr><td>$G^{<1>}$</td><td>XNCA-1</td><td></td></tr>
<tr><td>$G^{<\mathrm{nia}>}$</td><td></td><td>LNCA</td></tr>
</table>

Die YNCA wurde bereits in der letztgenannten Arbeit eingeführt. Sie stellt gleichsam eine Mischform aus der LNCA und der XNCA dar, indem sie die Gittersummenprozesse in $d\!=\!\infty$ vollständig berücksichtigt, diese aber mit den LNCA-Vorfaktoren versieht. Da die parametrische Integration keinen Einfluß auf die Selbstkonsistenzstruktur hat, ergeben sich bei der YNCA dieselben Divergenzprobleme.

Um einen Überblick zu geben, werden in Abbildung 6.10 die Ergebnisse der verschiedenen Näherungen bei denselben Modellparametern gegenübergestellt. Die geringere Verstärkung der Banddichte der LNCA gegenüber der XNCA-1 läßt sich aus dem Ausdruck (6.3) verstehen. Dort wird dem XNCA-1-Propagator $G^{<1>}$ der ungestörte

Propagator $g$ beigemischt. Die schwächere Ausprägung des YNCA-Peaks gegenüber dem XNCA-Peak ist allein auf die Gewichtungsfaktoren zurückzuführen, bzw., was gleichbedeutend ist, auf die Parameterintegration, die gleichsam eine Mittelung über Systeme mit wachsender Ankopplung der lokalen Streuprozesse ($\lambda \in [0; 1]$) darstellt. Dadurch wird die Annäherung an das divergente Verhalten verlangsamt, aber nicht umgangen.

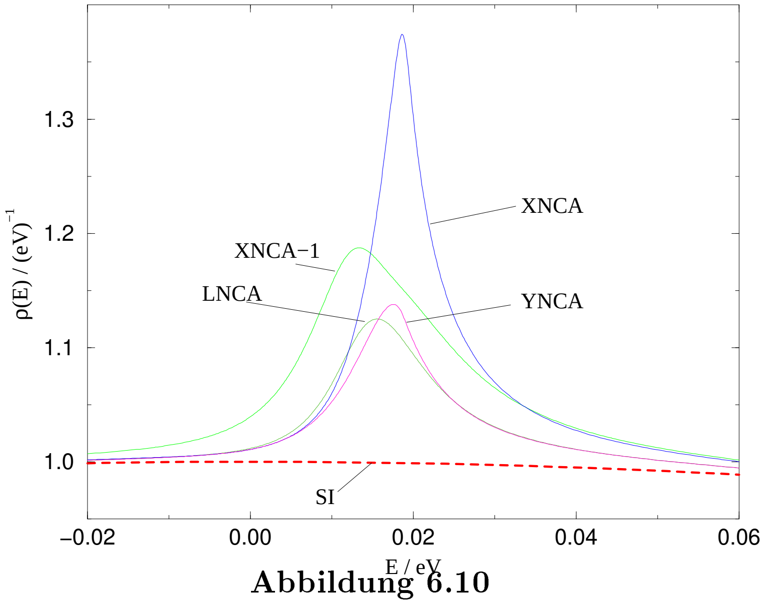



**Abbildung 6.10**
Banddichten $\rho$ der verschiedenen Näherungen
für (P1) und $T = 75K$

Als wichtigstes Ergebnis des hier vorgenommenen Vergleichs ist die folgende Tatsache festzuhalten:

*Der Zusammenbruch der Lösung für das effektive Band hängt nicht mit der unterschiedlichen Gewichtung der Mehrplatzprozesse zusammen, sondern ist charakteristisch für alle Nährungen, die die unendlichen Raumdimension insofern korrekt behandeln, als sie die Bestimmungsgleichung für das effektive Band vollständig selbstkonsistent lösen. Dies entspricht nach der Analyse der vorangegangenen Kapitel der Berücksichtigung von geschachtelten Rückkehrprozessen jeder Ordnung bei der Berechnung der Excluded-Volume-Korrekturen.*

### 6.2.3 Ergebnisse der XNCA mit $\frac{1}{d}$-Korrekturen

Angesichts der geschilderten Probleme in unendlichen Raumdimensionen liegt es nahe, die Modellbeschreibung hinsichtlich ihrer Dimensionalität zu verbessern. Hierzu dienen die in Abschnitt 5.1.3 bestimmten $\frac{1}{d}$-Korrekturausdrücke für die Gittersumme des Andersonmodells, die zusammen mit den Ergebnissen des Anhangs D numerisch direkt ausgewertet werden können. Für die so entstehende, mit XNCA-d bezeichnete Rechnung ergibt sich mit den Parametern (P1) das in Abbildung 6.11 dargestellte Verhalten.

Zunächst ist zu beachten, daß bereits das ungestörte Band durch die $\frac{1}{d}$-Korrekturen (D.12) modifiziert wird. Insbesondere wird die Zustandsdichte bei $E = 0$ erkennbar verringert. Das führt auch zu einer Abschwächung der Abrikosow-Suhl-Resonanz, so daß der Bereich des Zusammenbruchs erst bei tieferen Temperaturen erreicht wird.

Zwar ist obiger Ausdruck für die $\frac{1}{d}$-korrigierte Zustandsdichte immer noch normiert und besitzt dieselbe mittlere quadratische Breite. (Weitere Bemerkungen hierzu finden sich im nächsten Abschnitt.) Um jedoch die XNCA und die XNCA-d, d.h. das $d{=}\infty$-System und das $\mathcal{O}(\frac{1}{d})$-System, hinsichtlich des Einflusses der $f$-Resonanz miteinander vergleichen zu können, muß man eine entsprechende Reskalierung vornehmen. Dies soll hier dadurch geschehen, daß der XNCA dieselbe ungestörte Banddichte zugrundegelegt wird, wie der XNCA-d. Das Ergebnis ist in Abbildung 6.12 dargestellt.

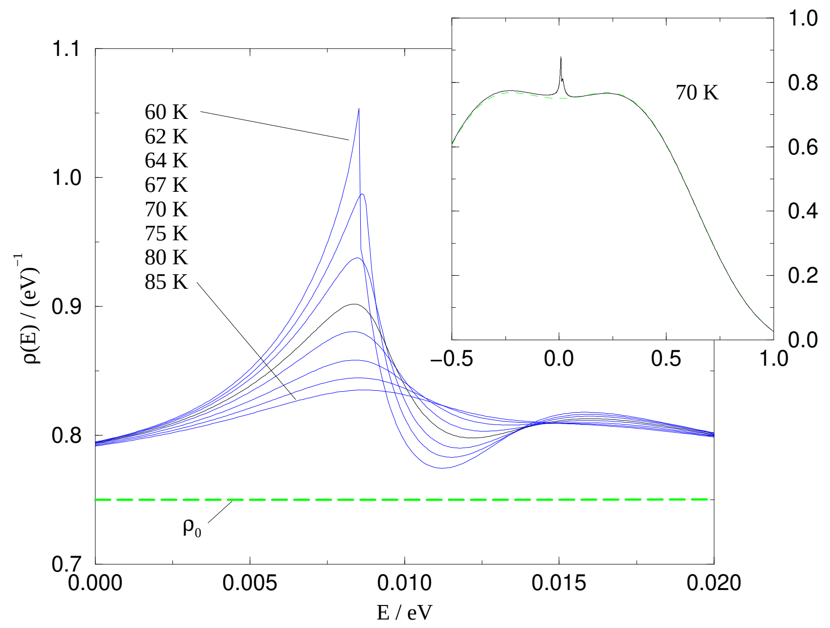



**Abbildung 6.11**

Effektive Banddichten $\rho$

der XNCA-d für (P1), $d = 3$

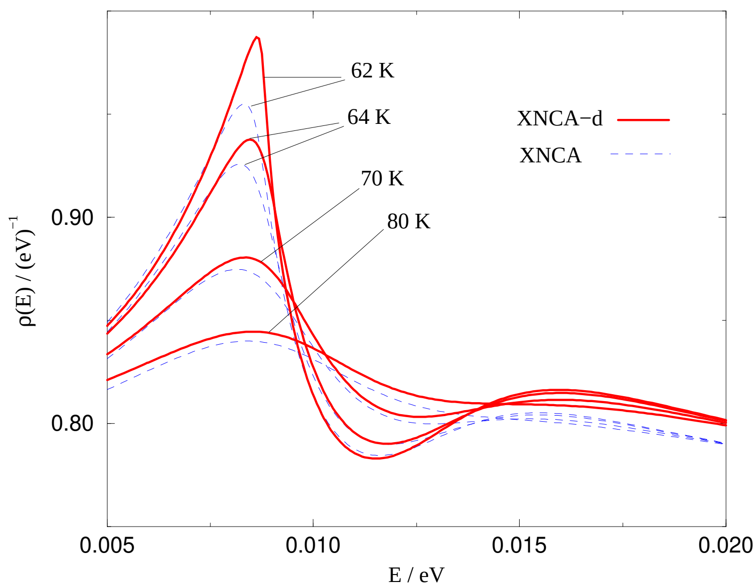



**Abbildung 6.12**
Effektive Banddichten $\rho$
der XNCA-d und XNCA für (P1), $d = 3$

Man kann also feststellen, daß die $\frac{1}{d}$-Korrekturen qualitativ keinen wesentlichen Einfluß auf den Zusammenbruch der Selbstkonsistenzgleichung haben[4]. Dieses Verhalten läßt sich auch aus der algebraischen Struktur der $\frac{1}{d}$-Korrekturen begründen. Die Korrekturterme $Q_2, Q_4$ und $Q_5$ sind lediglich Funktionale des Ausdruckes nullter Ordnung $G^{(0)}$. Dieser ist aber ebenso wie im Fall $d\!=\!\infty$ selbstkonsistent zu bestimmen und zeigt alle typischen Pathologien.

Eine allgemeine Bewertung einer $\frac{1}{d}$-Entwicklung findet in der Zusammenfassung (Kapitel 7) statt. Zunächst sollen jedoch noch einige weitere Feststellungen zu den Grenzen einer $\frac{1}{d}$-Entwicklung anhand des *ungestörten* Systems getroffen werden.

[4]Quantitativ findet lediglich eine leichte Verschiebung in der Zusammenbruchstemperatur $T_\chi$ statt. Diese hängt davon ab, wie man die Parameter der zu vergleichenden XNCA-d und XNCA wählt. Die von Keiter, Leuders und Kleineidam (1997) konstatierte Abschwächung der Divergenz hängt offenbar wesentlich mit der verringerten Dichte des ungestörten Bandes bei $E = 0$ zusammen.

## 6.3 Dimensionale Entwicklung des ungestörten Bandes

In diesem Abschnitt soll belegt werden, inwiefern die Problematik einer $d=\infty$-Berechnung als Ausgangspunkt für eine $\frac{1}{d}$-Entwicklung bereits für das ungestörte Leitungsband ersichtlich wird. Dazu werden die in Anhang D abgeleiteten expliziten Ausdrücke für die ersten Glieder einer $\frac{1}{d}$-Entwicklung des Tight-Binding-Bandes (D.12) näher untersucht.

$$\rho_0(E) = \frac{1}{2t\sqrt{\pi}} e^{-(\frac{E}{2t})^2} \left[ 1 + \frac{1}{d} \left( -\frac{3}{16} + \frac{3}{4} \left( \frac{E}{2t} \right)^2 - \frac{1}{4} \left( \frac{E}{2t} \right)^4 \right) + \frac{1}{d^2}(\ldots) + \ldots \right]$$

Setzt man hierin konkret $d=1,2,3$, so ergeben sich die in Abbildung 6.13 bis 6.15 dargestellten Banddichten. Die mit $n = 2, \ldots, 12$ bezeichneten Kurven zeigen die vollständig bis zur Ordnung $\mathcal{O}(\frac{1}{d^n})$ entwickelte ungestörte Banddichte der jeweiligen Dimension $d$. Zudem werden in den eingeschobenen Darstellungen die in niedrigster Ordnung korrigierten Dichten der jeweiligen exakten Dichte und dem Gaußband in $d=\infty$ gegenübergestellt.

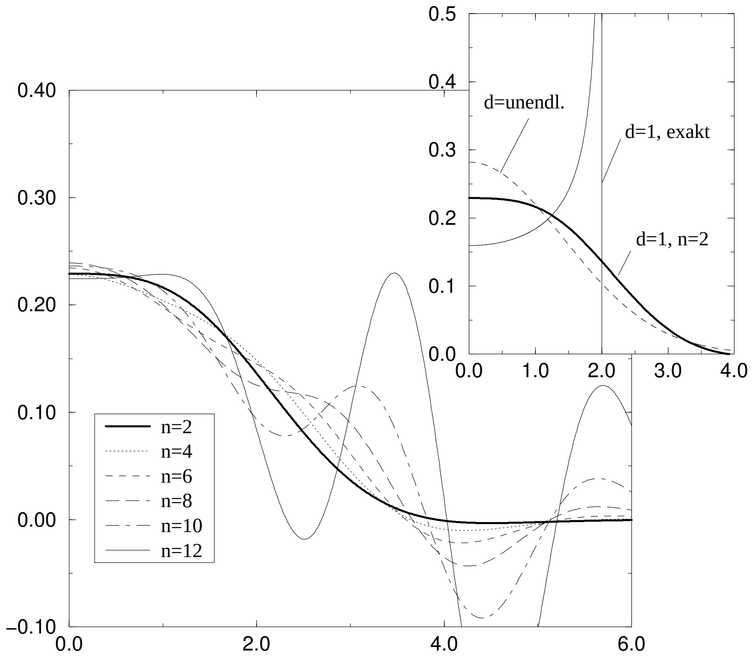



**Abbildung 6.13**
$\mathcal{O}(\frac{1}{d^n})$-Entwicklungen der ungestörten Banddichten in $d = 1$

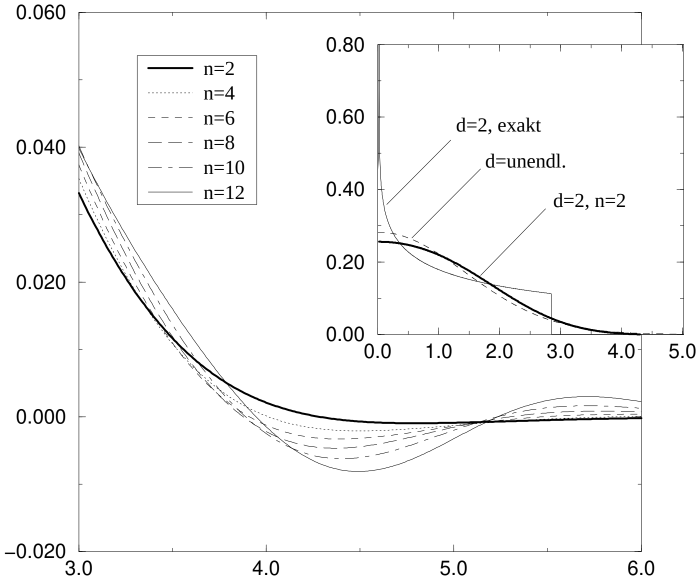



**Abbildung 6.14**
$\mathcal{O}(\frac{1}{d^n})$-Entwicklungen der
ungestörten Banddichten in $d = 2$

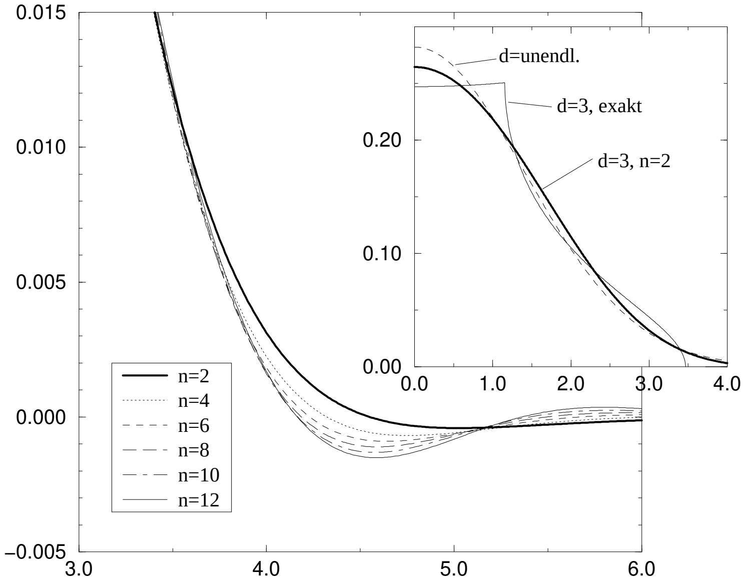



**Abbildung 6.15**
$\mathcal{O}(\frac{1}{d^n})$-Entwicklungen der
ungestörten Banddichten in $d = 3$

Aus den dargestellten Banddichten ergeben sich zwei fundamentale Einwände gegen die physikalische Korrektheit einer solchen Entwicklung.

1. Zunächst ist zu bemerken, daß alle hier dargestellten Dichten normiert sind und dieselbe mittlere quadratische Breite haben. Diese Eigenschaft ergibt sich bei der $\frac{1}{d}$-Entwicklung automatisch. Die verringerte spektrale Dichte bei $E = 0$ kann bei gleichbleibender Breite aber nur durch Bereiche kompensiert werden, in denen die Dichte *negativ* wird. Dieses unphysikalische Verhalten stellt sich allerdings in den Modellrechnungen als unproblematisch heraus. Die negativen Werte befinden sich in den exponentiell unterdrückten Randbereichen und beeinflussen das Verhalten des Systems an der Fermikante nicht.

2. Gravierender scheint aber der folgende Einwand: Die Korrekturausdrücke der verschiedenen Ordnunge zeigen, daß man für die Dimension $d=3$ und noch weniger für $d=2$ und $d=1$ eine angemessene Approximationen der endlichdimensionalen Bänder erhält. Die beste Korrektur ergibt sich noch für $n = 2$. Hierbei werden die Dichten tendenziell korrekt modifiziert, von einer Darstellung der Van-Hove-Singularitäten ist man jedoch noch weit entfernt. Bei Mitnahme höherer Ordnungen verschlechtert sich das Ergebnis zunehmend. Die resultierenden Oszillationen, die in $d=2$ und 3 bei höheren $n$ ebenfalls so ausgeprägt werden wie für $d=1$, machen die Entwicklung schnell unbrauchbar.

   Die Ursache hierfür liegt darin begründet, daß es sich um eine *asymptotische Entwicklung* handelt (siehe z.B. Dingle (1973) oder Negele und Orland (1988)). In diesem Szenario erreichen die Korrekturen für eine (von $d$ abhängige) Ordnung $n$ eine optimale Approximation und verschlechtern sich von da an rapide. Bessere Approximationen höherer Ordnung erhält man allein durch Wahl eines entsprechend kleineren Parameters $\frac{1}{d}$.

Dieses für asymptotische Entwicklungen typische Verhalten führt zu der Feststellung, daß bereits für das ungestörte endlichdimensionale System der Grenzfall $d=\infty$ kein günstiger Ausgangspunkt ist. Für die physikalisch relevanten Dimensionen $d=1,2,3$ ist also zweifelhaft, ob $\frac{1}{d}$ ein hinreichend kleiner Parameter ist.

## 6.4 Analytische Eigenschaften der $d = \infty$-Selbstkonsistenzgleichung

Alle Eigenschaften, die bei der Erweiterung des Einstörstellenmodells zum Andersongitter hinzutreten, wurden durch die Selbstkonsistenzgleichung (5.5) der XNCA in der Näherung unendlicher Raumdimensionen bestimmt:

$$G = \frac{1}{1+TG} \cdot g(z - \frac{T}{1+TG}) \tag{6.4}$$

(Die charakteristischen Eigenschaften des freien Propagators $g$ wie z.B. der Schnitt längs der reellen Achse und das asymptotische Verhalten setzen sich somit auf die durch (6.4) bestimmte Lösung für $G$ fort.)

Bei der vorausgegangenen, ausführlichen numerischen Analyse dieses Kapitels hat sich gezeigt, daß es die spezifische *selbstkonsistente Form* der Bestimmungsgleichung ist, die in bestimmten Parameterbereichen den Zusammenbruch der physikalischen Lösung bewirkt. Um die derart unterbrochene Selbstkonsistenzschleife der XNCA auch zu tieferen Temperaturen fortzusetzen, können die bereits erwähnten numerisch instabilen Teillösungen herangezogen werden. Sie bestehen aus zwei Teilästen und lassen sich bis in den Bereich einer asymptotischen Lösung der Selbstkonsistenzgleichung der Form $G = -\frac{1}{T}$ hinein fortsetzen. Hier deutet sich bereits ein genaueres Bild von der Struktur des Zusammenbruchs an.

Ein einfaches Zusammensetzen von derart ermittelten Teillösungen ist allerdings aus dem folgenden Grund nicht angemessen: Erhält man in verschiedenen Bereichen auf der reellen Achse ($z = x + i\delta$) mehrere Greenfunktionen mit unterschiedlichen Geltungsbereichen, so kann man diese nicht durch abschnittsweise Definition konsistent zusammenfügen. Eine naives Zusammensetzen der Spektraldichten, die den Imaginärteil der Greenfunktionen beschreiben, läßt sich nicht gleichzeitig auch für die Realteile erreichen. Dies liegt an der Kausalitätsbedingung für die Greenfunktionen, die sich in der Kramers-Kronig-Relationen niederschlägt. Diese verbindet Real- und Imaginärteil auf eine nichtlokale Weise (d.h. entlang der gesamten reellen Achse) miteinander und läßt so keine stückweise Neudefinition zu.

Um das pathologische Verhalten der Selbstkonsistenzgleichung zu verstehen, ist also eine genaue Kenntnis der Lösungsstruktur der Selbstkonsistenzgleichung unerläßlich. Diese soll im folgenden Abschnitt untersucht werden.

### 6.4.1 Exakte Lösungen der Selbstkonsistenzgleichung

Da die Selbstkonsistenzgleichung für den Propagator des effektiven Bandes $G$ das Ergebnis der Näherung unendlicher Raumdimension ist, muß als ungestörter Propagator $g$ der zur Gaußdichte gehörende eingesetzt werden. Dieser ist mit der komplexen Errorfunktion verwandt (D.5) und damit echt transzendent, was eine exakte, geschlossene Lösung unmöglich macht.

Um dennoch Informationen über die Lösungsstruktur der Selbstkonsistenzgleichung zu erhalten, wird das ungestörte Elektronenband im folgenden durch algebraisch einfacher zu behandelnde Bänder ersetzt. Als solche einfache Modellsysteme erweisen sich das *Lorentzband* $\rho_{\text{Lor}}^{(0)}$ und das *Quadrat des Lorentzbandes* $\rho_{\text{Lor}}^{(1)}$:

$$\rho_{\text{Lor}}^{(n)} := c_n \frac{1}{(x^2+1)^{n+1}}$$

Diese haben mit Blick auf das Gaußband die folgenden Vorteile:

- Sie führen zu einer algebraisch auflösbaren Selbstkonsistenzgleichung, da sie nicht transzendent sind.
- Sie haben in der komplexen Ebene die Topologie einer Greenfunktion (im Gegensatz zum Propagator $g(z)$ (4.3) beim bereits untersuchten Problem des Self-avoiding Loops)
- Das Lorentzband approximiert in seinen Potenzen das Gaußband gleichmäßig (s. Gleichung (6.5)). Man kann daher annehmen, daß es die *topologischen* Eigenschaften der Lösung des Gaußbandes gut widerspiegelt.

Diesen Vorteilen stehen mathematisch eng mit ihnen zusammenhängende Vorbehalte gegenüber, die sich aber für die folgenden Untersuchungen als nicht relevant erweisen.

- Im Gegensatz zur vom Gaußband erzeugten Errorfunktion, die eine ganze Funktion ist, besitzt die Greenfunktion „verdeckte“ Pole (s.u.).
- Die Lorentzbänder haben keine endliche Reichweite und besitzen daher nicht alle Momente der Energiemittelung. Dem einfachen Lorentzband kann man nicht einmal eine Breite zuschreiben.

Die zu den normierten Potenzen des Lorentzbandes

$$\rho_{\text{Lor}}^{(n)} = \frac{4^n}{\pi} \frac{(n!)^2}{(2n)!} \cdot \frac{1}{(x^2+1)^{n+1}}$$

gehörenden Greenfunktionen $g_{\text{Lor}}^{(n)}$ bestimmt man mit Hilfe des Residuensatzes:

$$g_{\text{Lor}}^{(n)}(z) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_{\text{Lor}}^{(n)}(x)}{z-x} dx = c_n \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(z-x)(x+i)^{n+1}(x-i)^{n+1}}$$

Für $\mathfrak{Im}\, z > 0$ schließt man die Integrationskontur in der unteren Halbebene und berechnet das Integral aus dem Residuum bei $x = -i$, wo eine Polstelle n-ter Ordnung vorliegt, und erhält:

$$g_{\text{Lor}}^{(n)}(z) = \sum_{m=0}^{n} (2i)^m \frac{n!(2n-m)!}{(n-m)!(2n)!} \frac{1}{(z+i)^{m+1}}$$

Für $n = 0, 1, 2$ führt dies zu den folgenden Bändern und Greenfunktionen[5]

$$\begin{aligned}
\rho_{\text{Lor}}^{(0)}(x) &= \frac{1}{\pi(x^2+1)} & g_{\text{Lor}}^{(0)}(z) &= \frac{1}{z+i} \\
\rho_{\text{Lor}}^{(1)}(x) &= \frac{2}{\pi(x^2+1)^2} & g_{\text{Lor}}^{(1)}(z) &= \frac{1}{z+i} + \frac{i}{(z+i)^2} = \frac{z+2i}{(z+i)^2} \\
\rho_{\text{Lor}}^{(2)}(x) &= \frac{8}{3\pi(x^2+1)^3} & g_{\text{Lor}}^{(2)}(z) &= \frac{1}{z+i} + \frac{i}{(z+i)^2} - \frac{2}{3(z+i)^3}
\end{aligned}$$

Die Greenfunktionen $g_{\text{Lor}}^{(n)}$ sind offensichtlich alle meromorph in $\mathbb{C}$ mit einer $n+1$-fachen Polstelle bei $-i$. Dieser Pol ist jedoch „verdeckt“, da die obige Darstellung nur für $\mathfrak{Im}\, z > 0$ gilt. Die Darstellung der Greenfunktion in der unteren Halbebene erhält man in diesem Fall aus $G(z) = \overline{G(\bar{z})}$, also durch formales Substituieren $i \to -i$. Dies führt dann auf den charakteristischen Analytizitätsschnitt auf der rellen Achse mit $\rho_{\text{Lor}}^{(n)}(x) = -\frac{1}{\pi} \mathfrak{Im}\, g_{\text{Lor}}^{(n)}(x + i\delta)$.

Es bleibt noch nachzutragen, inwiefern das Lorentzband das Gaußband approximiert. Um für verschiedene $n \in \mathbb{N}$ Bänder vergleichbarer Breite zu bekommen, muß man die $\rho_{\text{Lor}}^{(n)}$ noch mit $\sqrt{n}$ skalieren:

$$\bar{\rho}_n(x) = \tfrac{1}{\sqrt{n}}\, \rho_{\text{Lor}}^{(n)}(\tfrac{x}{\sqrt{n}})$$

Die Breite der $\bar{\rho}_n$ konvergiert für $n \to \infty$ gegen $\sigma = \frac{1}{\sqrt{2}}$ und es gilt

$$\bar{\rho}_n(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{n}} \underbrace{\frac{2 \cdot 4 \cdot 6 \ldots\ldots \ldots 2n}{1 \cdot 3 \cdot 5 \ldots (2n-1)}}_{\substack{\sim \sqrt{n\pi} \\ \text{Wallis Produkt}^6}} \underbrace{\frac{1}{\left(\frac{x^2}{n}+1\right)^{n+1}}}_{\to e^{-x^2}} \quad \stackrel{n\to\infty}{\longrightarrow} \quad \frac{1}{\sqrt{\pi}}\, e^{-x^2} \tag{6.5}$$

[5]Die Koeffizienten der Greenfunktionen bleiben für wachsende $n$ nicht etwa konstant, wie man aus der Darstellung für $n = 0, 1, 2$ vielleicht ablesen möchte. Lediglich der nullte Koeffizient bleibt für alle $n$ erhalten, da die Greenfunktion das asymptotische Verhalten $g_{\text{Lor}}^{(n)}(z) \sim \frac{1}{z}$ besitzen muß.

Aufgrund der einfachen Struktur der lorentzartigen Greenfunktionen kann man nun eine exakte Lösung für die Selbstkonsistenzgleichung angeben. Zunächst ist festzustellen, daß wegen der Asymptotik ($g \sim \frac{1}{z}$ für $z \to \infty$) die Selbstkonsistenzgleichung (6.4) *unabhängig von der Struktur des ungestörten Elektronenbandes*, insbesondere also auch beim Gauß- und beim Lorentzband, die Lösung

$$G(z) = -\frac{1}{T(z)} \tag{6.6}$$

besitzt. Diese wird im folgenden als *asymptotische Lösung* der Selbstkonsistenzgleichung bezeichnet. Aus physikalischer Sicht ist sie zu verwerfen, da sie für hohe Energien nicht abfällt. Allerdings hat diese Lösung, wie im folgenden gezeigt wird, einen beträchtlichen Einfluß auf das allgemeine Lösungsverhalten der Selbstkonsistenzgleichung.

Ein offensichtlicher Einbruch der Lösung wird durch den Analytizitätsschnitt von $g_{\text{Lor}}^{(n)}$ auf der reellen Achse bewirkt. Dies macht sich bemerkbar, sobald das Argument der Selbstkonsistenzgleichung die reelle Achse schneidet, was für zu große Werte der Streumatrix $T$ zu erwarten ist. Dieses Phänomen zeigt sich für $z = x + i\delta$ entlang der reellen Achse, sobald die folgende Bedingung nicht mehr erfüllt ist:

$$\mathfrak{Im}\,\frac{T}{1+TG} \geq 0 \quad \Leftrightarrow \quad \rho(x) \leq -\frac{1}{\pi}\mathfrak{Im}\,(-\frac{1}{T}) \tag{6.7}$$

Das bedeutet gerade, daß die Spektralfunktion der asymptotischen Lösung und die interessierende selbstkonsistente Lösung sich schneiden.

Konkretere Aussagen über dieses Problem und weitere Aspekte der geschilderten singulären Verhaltensweisen sollen nun anhand von $\rho_{\text{Lor}}^{(0)}$ und $\rho_{\text{Lor}}^{(1)}$ gemacht werden. Dabei sei die Analyse beschränkt auf die obere komplexe Halbebene $\mathfrak{Im}\,z > 0$, das Verhalten in der unteren erhält man immer analog vermittels $\overline{G(\bar{z})} = G(z)$, was dem Austausch $i \leftrightarrow -i$ in allen beteiligten Greenfunktionen gleichkommt.

### (A) Lösung für das Lorentzband

Die Gleichung (6.4) mit $g_{\text{Lor}}^{(0)}(z) = \frac{1}{z+i}$ wird gelöst durch

$$G(z) = \frac{1}{z+i} \quad \text{für} \quad \mathfrak{Im}\,z > \mathfrak{Im}\,\frac{T}{1+TG}$$

[6] ABRAMOWICZ und STEGUN (1972)[6.1.49]

Auf der reellen Achse ($z = x + i\delta$) ist die Gültigkeitsbedingung wieder gleichbedeutend mit (6.7). Bemerkenswert ist, daß diese physikalische Lösung innerhalb ihres Gültigkeitsbereiches *identisch* mit der freien Lösung ist, d.h. daß die lokale Streuung $T$ *überhaupt nicht an das Band ankoppelt.* Erst wenn die lokale Streuung (in Form von $-\frac{1}{\pi}\mathfrak{Im}\, T(z)$) zu groß wird und daher die asymptotische Lösung das ungestörte Band schneidet, bricht diese Abkoppelung zusammen und man kann keine Greenfunktionslösung mehr angeben.

Es ist jedoch anzumerken, daß das einfache Lorentzband in dem Sinne entartet ist, daß es außer der asymptotischen Lösung und der reproduzierten ungestörten Banddichte keine weiteren Lösungen mehr erzeugt. Das allgemeine Verhalten der Selbstkonsistenzgleichung, wie es aus numerischen Berechnungen für den Fall des Gaußbandes hervorging, ist somit nicht typisch wiedergegeben. Daher soll im folgenden das quadrierte Lorentzband mehr Aufschluß über die Art dieses Lösungsübergangs geben.

### (B) Lösung für das quadrierte Lorentzband

Für diesen Fall führt die Selbstkonsistenzgleichung (6.4) mit $g_{\mathrm{Lor}}^{(1)}(z) = \frac{z+2i}{(z+i)^2}$ zu einer quadratischen Gleichung und wird durch den folgenden Ausdruck gelöst:

$$\boxed{G_{\pm}(z) = \frac{1}{z+i} + \frac{1}{2T(z)}\left(-1 \pm \sqrt{1 + \frac{4i\,T(z)}{(z+i)^2}}\right)} \tag{6.8}$$

$$\text{für } \mathfrak{Im}\, z > \mathfrak{Im}\, \frac{T}{1+TG}$$

Für $z = x{+}i\delta$ reduziert sich die letzte Bedingung wieder auf (6.7). Natürlich existiert ebenfalls wieder die asymptotische Lösung (6.6). Die weitere, nichttriviale Lösung spaltet sich offenbar in zwei Äste auf.

Zur näheren Untersuchung der Lösungsmannigfaltigkeit sei nun zunächst angenommen, daß das Argument der Wurzel sich nur in einer Umgebung der 1 bewegt, die die 0 nicht enthält. Dies ist z.B. der Fall, wenn man sich auf hinreichend große $z$ beschränkt, oder im Grenzfall hinreichend kleiner Hybridisierung ($T = V^2 G_f \to 0$) sogar für alle $z$. In diesem Falle besitzt die Wurzel zwei analytisch von $z$ abhängende Lösungszweige, die man gemäß $\pm\sqrt{1+z} = \pm(1 + \frac{1}{2}z - \frac{1}{4}z^2 + \ldots)$ in eine Potenzreihe entwickeln kann. Man erkennt so, daß die beiden Lösungen $G_{\pm}$ der ungestörten physikalischen Lösung ($G_+ \to g_{\mathrm{Lor}}^{(1)}$) bzw. der ungestörten unphysikalischen Lösung ($G_- \to -\frac{1}{T}$), an die sie sich jeweils asymptotisch annähern, zugeordnet werden können:

$$\begin{aligned} G_+(z) &= \frac{1}{z+i} + \frac{i}{(z+i)^2} + \frac{2T}{(z+i)^4} + O(T^2) \;\rightarrow\; g^{(1)}_{\mathrm{Lor}} \\ G_-(z) &= -\frac{1}{T} + \frac{1}{z+i} - \frac{i}{(z+i)^2} - \frac{2T}{(z+i)^4} + O(T^2) \;\rightarrow\; -\frac{1}{T} \end{aligned}$$

Wird nun $T(z)$ zu groß, wie dies zuerst im Bereich der Fermikante auftritt, so definiert (6.8) nicht mehr ein Paar von eindeutigen, analytischen Lösungen, sondern vielmehr eine einzige analytische Funktion über einer *zweiblättrigen Riemannschen Fläche* (siehe z.B. BEHNKE und SOMMER (1965)). Diese entsteht dadurch, daß man die komplexe Ebene längs eines Halbstrahles aufschneidet und zwei identische Kopien überkreuz zusammenheftet. (s. Abbildung 6.20.)

An allen Nullstellen des Wurzelargumentes $(1+\frac{4i\,T(z)}{(z+i)^2})$ entsteht ein *Verzweigungspunkt erster Ordnung*[7]. Dieser Übergang findet statt, sobald der Verzweigungspunkt, definiert durch das Wurzelargument, in die obere komplexe Halbebene eintritt, also für

$$\frac{4i}{(z+i)^2} = -\frac{1}{T(z)} \quad \text{mit} \quad \mathfrak{Im}\, z > 0$$

Diese Übertrittsbedingung läßt sich nicht allein am Imaginärteil der beteiligten Greenfunktionen, also an den Spektraldichten, ablesen. Nimmt man aber vereinfachend an, daß der Realteil von $T$ bei $x=0$ verschwindet (was bei symmetrischer Streudichte, also bei symmetrischem $\mathfrak{Im}T$ der Fall ist), so erhält man als Bedingung

$$\rho_\chi := \frac{1}{\pi} \cdot \frac{4(1-x^2)}{(x^2+1)^2} = -\frac{1}{\pi}\mathfrak{Im}\,(-\frac{1}{T}) \tag{6.9}$$

Dieser Fall tritt, wie anhand der folgenden Berechnungen zu sehen sein wird, im allgemeinen früher ein, als der der Übertritt des unphysikalischen Astes in die negative komplexe Ebene gemäß (6.7), denn vor einer Aufspaltung der Lösungen gilt

$$\rho_\chi > \rho_+ = -\frac{1}{\pi} G_+ > \rho_2 = \frac{2}{\pi}\frac{1}{(x^2+1)^2} \qquad \text{bei } x = 0$$

[7] Verzweigungspunkte einer analytischen Funktion zeichnen sich vor anderen Stellen dadurch aus, daß sich die Funktion in keiner noch so kleinen Umgebung analytisch eindeutig definieren läßt. Setzt man die betreffende Funktion von einem Analytizitätspunkt aus sukzessive lokal analytisch fort und umkreist dabei den Verzweigungspunkt, so wechselt man von einem Blatt auf das nächste. Kehrt man beim zweiten Umlauf wieder zurück zum Ausgangspunkt zurück, so handelt es sich um einen Verzweigungspunkt erster Ordnung.

### 6.4.2 Darstellung des Lösungszusammenbruchs

Um das hier angedeutete komplizierte Verhalten des sukzessiven Zusammenbruchs physikalisch eindeutiger Lösungen zu illustrieren, sei im folgenden eine konkrete Modell-Streumatrix $T(z)$ angenommen. Als Modell-f-Dichte sei gewählt:

$$\rho_f(E) = \frac{a_{\epsilon_f}}{\pi} \frac{1}{(E/b_{\epsilon_f})^2 + 1} + \frac{a}{\pi} \frac{1}{(E/b)^2 + 1}$$

Dies entspricht einer typischen f-Dichte einer Anderson-Störstelle, wie sie auch aus der NCA resultiert, und beschreibt die beiden folgenden, wesentlichen Aspekte:

- das f-Niveau bei $\epsilon_f = -0.5$, das aufgrund der Hybridisierung lorentzförmig auf $\Delta = \pi\rho_c(0)V^2$ verbreitert ist (Im folgenden ist $a_{\epsilon_f} = 0.5, b_{\epsilon_f} = 0.25, V^2 = 0.01$ gewählt.)
- die schmale Abrikosow-Suhl-Resonanz an der Fermikante ($x = 0$). Sie wurde der einfachen Rechnung wegen ebenfalls lorentzförmig modelliert. Das Anwachsen dieses Peaks mit sinkender Temperatur wird über den Parameter $a$ kontrolliert. (Im folgenden ist immer $b = 0.01$ und $a \in [0.1, 0.6]$.)

Die Größen wurden so gewählt, daß die Modelldichte die voll selbstkonsistent berechnete Situation gut widerspiegelt.

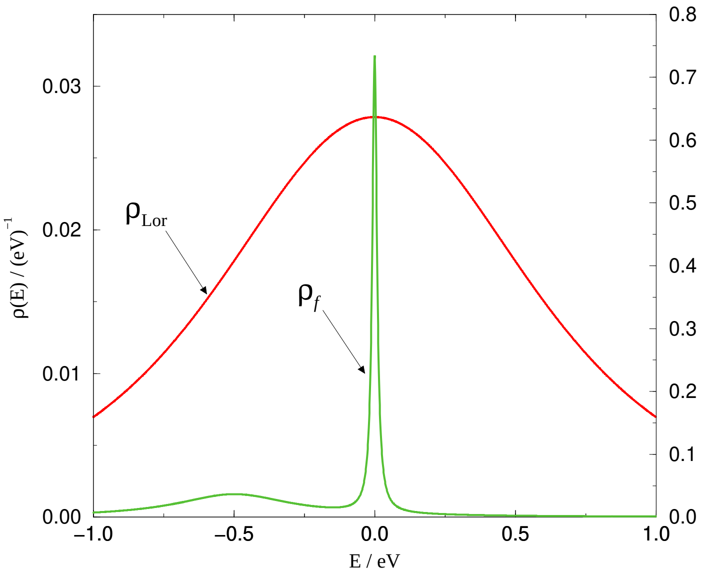



**Abbildung 6.16** Modelldichten zur exakten Berechnung der Gittergleichung

a) Ungestörte Modell-Banddichte $\rho^{(1)}_{\mathrm{Lor}}(x)$ (rechte Skala)
b) Spektraldichte der Modellstreumatrix (linke Skala)
$V^2\rho_f(x) = -\frac{1}{\pi}\mathfrak{Im}\,T(x)$ $(a = 0.1)$

Modifikationen aufgrund von Rückwirkungen der modifizierten effektiven Banddichte werden hierbei nicht berücksichtigt. Dieses Vorgehen ist zu rechtfertigen, da die vollständig selbstkonsistenten numerischen Berechnungen aus Abschnitt 6.2.1 gezeigt haben, daß der Lösungszusammenbruch wesentlich von der Spektraldichte der Streumatrix $T$ kontrolliert wird. Leichte Veränderungen der Streumatrix führen lediglich zu einer geringen Temperaturverschiebung des hier interessierenden Verhaltens, ohne einen qualitativen Einfluß zu haben. Ebenso wurde die konkrete Modellierung der Strukturen in der $f$-Dichte durch Lorentzpeaks aufgrund der sich ergebenden algebraischen Vereinfachung gewählt. Sie hat keinen relevanten Einfluß auf das interessierende Verhalten der Selbstkonsistenzgleichung.

Betrachtet man nun die effektive Banddichte bei Temperaturen oberhalb des Zusammenbruchs, so erhält man folgendes Bild:

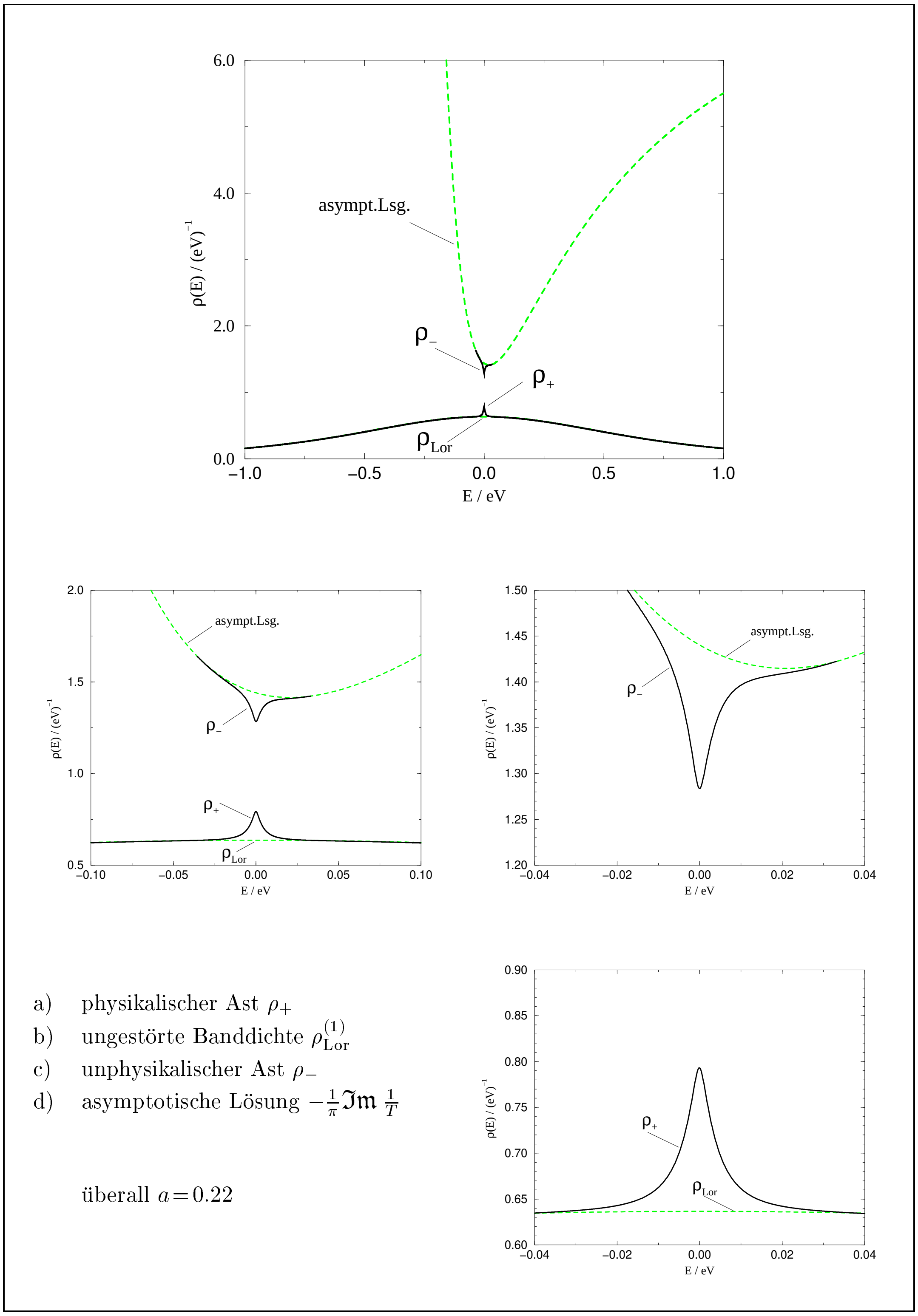



**Abbildung 6.17**
Banddichten der zu $\rho_{\mathrm{Lor}}^{(1)}$ gehörenden Gittergleichung

Man erkennt, daß die beiden Lösungsäste an der Fermikante charakteristische Peaks entwickeln, die auf die Vielteilcheresonanz in $T(z)$ zurückzuführen sind. Dabei ist der

Gültigkeitsbereich des unphysikalischen Lösungsastes $\rho_-$ durch die Argumentbedingung (6.7) stark auf eine Umgebung der Singularität einschränkt. Noch deutlicher wird diese Einschränkung in der folgenden Abbildung, in der die Spektraldichten der beiden Äste auf die positive imaginäre Halbebene fortgesetzt und nur im Bereich der Gültigkeit der Lösung aufgetragen sind. (Die logarithmische Auftragung, sowie die Wahl des symmetrischen Falls ($a_{\epsilon_f}=0$ nur in dieser Abbildung) wurden um der deutlicheren Darstellung willen vorgenommen.)

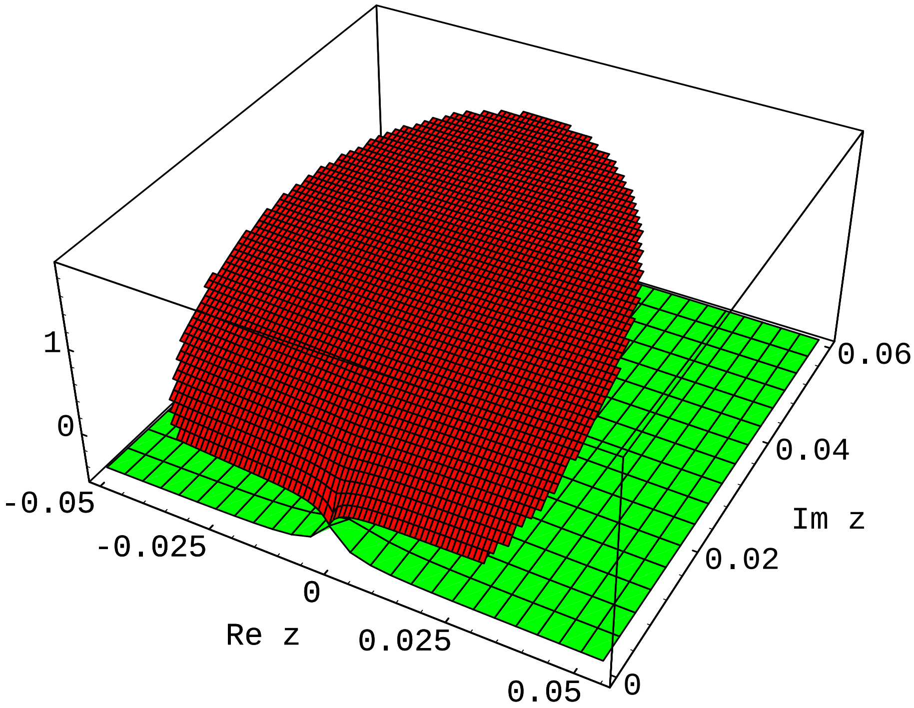



**Abbildung 6.18** Physikalischer (unten) und unphysikalischer Ast (oben) $\log(-\frac{1}{\pi}\mathfrak{Im}\, G_\pm)$ bei $a=0.27, a_{\epsilon_f}=0$.

Man erkennt auf der Vorderfläche des Plots (also bei $\mathfrak{Im}\, z=0$) die beiden Äste der Banddichte. Eine Vergrößerung des Bereichs um die Fermikante $E=0$ findet sich weiter unten in Abbildung 6.20.

Die Wahl des größeren Streuparameters $a=0.27$ führt erkennbar zu einer Annäherung der beiden Peaks. Dieses Verhalten wird in den folgenden Abbildungen deutlich:

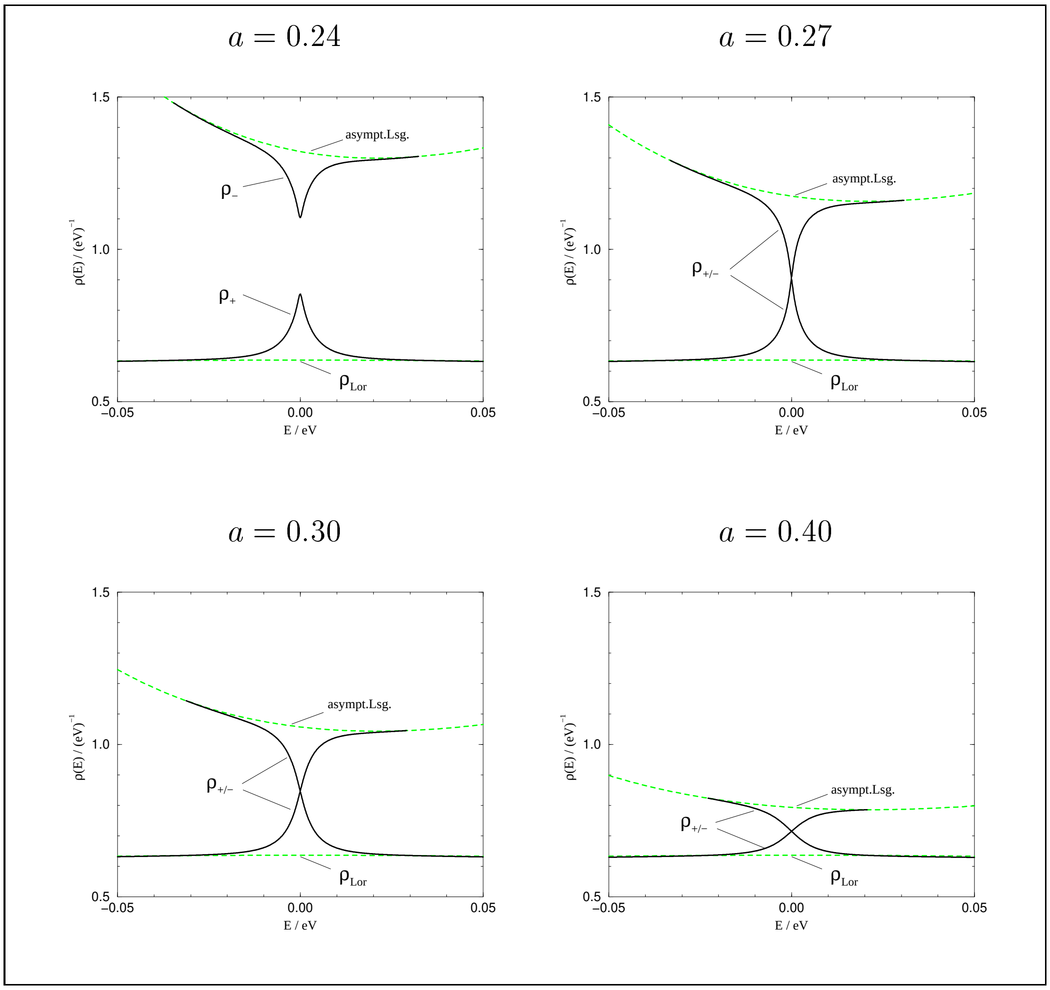



**Abbildung 6.19** Verschmelzen der Lösungsäste $\rho_\pm$
(Darstellung wie in Abbildung 6.17)

Bei weiter anwachsender Streumatrix $T$ nähern sich die beiden Äste einander an, wobei sich an der Resonanzstelle immer deutlicher eine nichtanalytische Peakstruktur auszubilden beginnt. Sobald die beiden Äste sich berühren, verschmelzen sie derart, daß man beim Durchlaufen des Energieparameters durch eine jeweils korrekte Wahl des Astes an der Verzweigungsstelle wieder Analytizität erreichen kann.

Will man jedoch eine auf der gesamten Energieachse definierte Lösung erhalten, so muß man eine Nichtanalytizität an der Überkreuzungstelle in Kauf nehmen, da der unphysikalische Ast nur auf einem beschränkten Energieintervall existiert. Diese Vorgehensweise verbietet sich jedoch, wie bereits oben erläutert, aus physikalischer Perspektive. Eine derart zusammengesetzte Spektraldichte besitzt keine eindeutige Greenfunktion.

Eine anschaulichere Vorstellung davon, was bei diesem Übergang im einzelnen geschieht, erhält man, wenn man die Fortsetzung der Lösungen in die positive komplexe

Halbebene aufträgt:

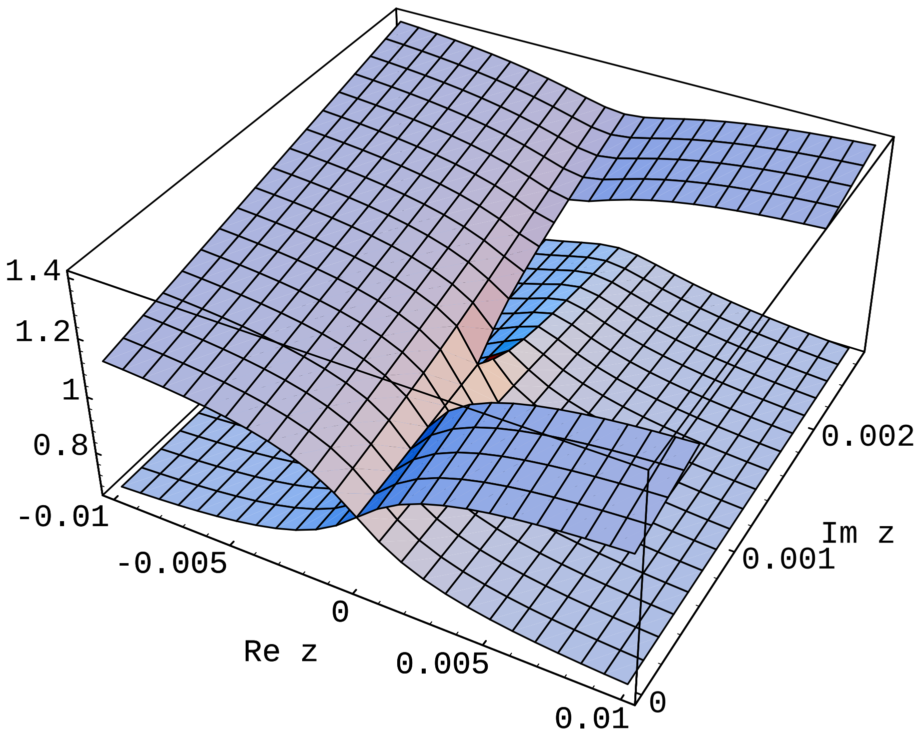



**Abbildung 6.20** Verschmelzen von physikalischem und unphysikalischem Ast zu einer mehrdeutigen Funktion über einer Riemannschen Fläche

$$-\frac{1}{\pi}\mathfrak{Im}\, G_{\pm} \text{ bei } a=0.28 \text{ und } a_{\epsilon_f}=0.$$

(Der obere Zweig ist zur besseren Sicht auf den Verzweigungspunkt teilweise ausgespart.)

Man erkennt deutlich die Struktur einer mehrdeutigen Lösung über einer zweiblättrigen Riemannschen Fläche und den in die positive imaginäre Halbebene eingetretenen Verzweigungspunkt. Nach dem Übertritt des Verzweigungspunktes verläuft notwendigerweise eine ganze Kurve mit der Bedingung $\mathfrak{Im}\,(\frac{1}{2T}\sqrt{1+\frac{4iT}{(z+i)^2}}) = 0$ vom Verzweigungspunkt bis zur rellen Achse, wo sie in den Spektraldichten bemerkbar ist. Der Selbstschnitt der Riemannschen Fläche findet allerdings nur im Imaginärteil statt. Die Realteile an diesen Stellen sind – mit der einzigen Ausnahme des Verzweigungspunktes selbst – durchaus verschieden.

In (6.9) wurde der Eintritt des Verzweigungspunktes, der das Aufspalten der Lösungen für die Banddichte erzeugt, im Falle einer symmetrischen Spektralfunktion charakterisiert über den Schnitt der Spektralfunktion der asymptotischen Lösung mit einer Dichte $\rho_\chi$ (der keine physikalische Bedeutung zuzumessen ist). Die folgenden Abbildungen stellen dar, wie diese Verschmelzung der Lösungsäste zu einer zweiblättrigen Lösung mit diesem Schnitt einher geht:

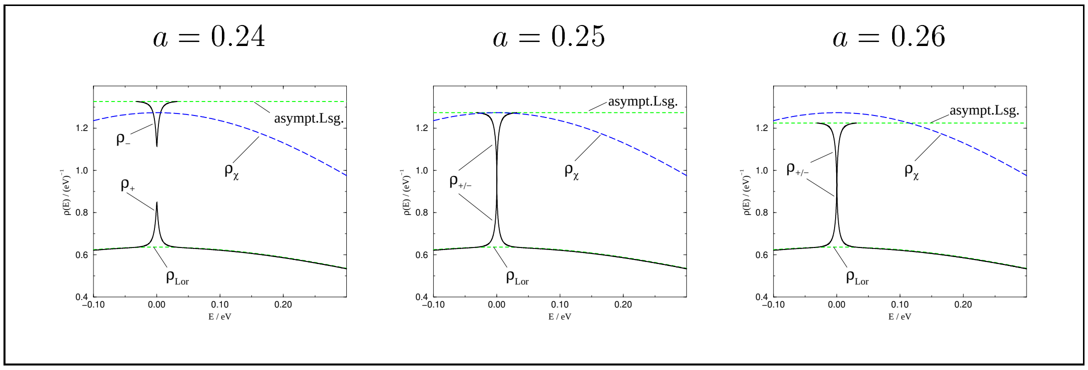



**Abbildung 6.21** Verschmelzen der Lösungsäste $\rho_\pm$
$a_{\epsilon_f} = 0$, sonst wie in Abbildung 6.17, zusätzlich $\rho_\chi$

Bei weiter wachsender Streumatrix drängt die absinkende asymptotische Lösung die beiden anderen Lösungen immer weiter zusammen (Abbildung 6.22) bis der der unphysikalische Lösungsast vollständig verschwindet. Schließlich entstehen sogar Definitionslücken im physikalischen Ast, was durch das Hineinlaufen des Argumentes der Selbstkonsistenzgleichung in die negative komplexe Halbebene verursacht wird.

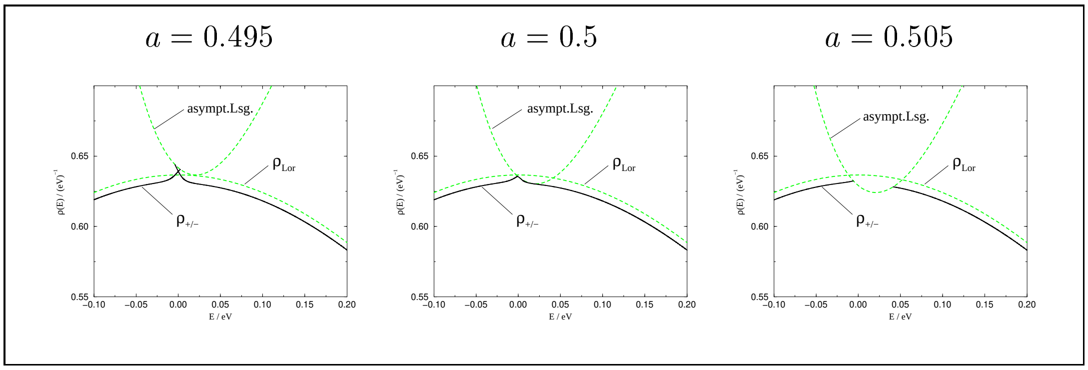



**Abbildung 6.22** Endgültiger Zusammenbruch
der Lösungen bei großer Streumatrix $T$.
(Bezeichungen wie in Abbildung 6.17)

Es sei noch einmal darauf hingewiesen, daß die hier beschriebenen Singularitäten nicht von den „verdeckten“ Polen der Lorentzbänder bei $-i$ herrühren und insofern kein Artefakt der Näherung des Gaußbandes durch lorentzartige Bänder sind. Alle hier beschriebenen Phänomene treten ebenso bei der physikalisch korrekten Gaußdichte auf, wie aus den umfangreichen numerischen Daten aus Abschnitt 6.2

zu ersehen ist. Dies bedeutet nichts anderes, als daß die zugehörigen Selbstkonsistenzgleichungen wohl algebraisch verschieden, aber dennoch topologisch äquivalent sind.

Die Grenzen der numerischen Lösung der Selbstkonsistenzgleichung im Rahmen einer effektiven Single-Site-Behandlung des Andersongitters lassen sich auf der Grundlage dieser Erkenntnisse folgendermaßen zusammenfassen:

Beim Zusammenbruch der Lösungen der Gittergleichung muß man offensichtlich zwei Übergänge deutlich unterscheiden:

- das Zusammentreffen der Singularitäten an der Fermikante und deren Verschmelzung zu einer zweideutigen Lösung und
- das Überkreuzen der asymptotischen Lösung mit dem physikalischen Ast. Dies zerstört eine physikalische Lösung vollständig und findet erst deutlich später statt.

Man kann daher festhalten, daß ein Zusammenbruch der Lösbarkeit der Gitterselbstkonsistenz bereits dann zu konstatieren ist, wenn sich eine singuläre Struktur in der Spektraldichte ausgebildet hat.

Zwar läßt sich auch weiterhin eine mathematisch wohldefinierte Lösung angeben, und zwar in Form einer mehrdeutigen Greenfunktion über einer Riemannschen Fläche, diese ist jedoch physikalisch nicht sinnvoll zu interpretieren. Eine Rekonstruktion der Dichte aus Teillösungen ist ebenfalls aus den oben erläuterten Gründen zu verwerfen.

Insbesondere läßt sich der Zusammenbruch der physikalischen Lösung nicht durch eine Verfeinerung der eingesetzten numerischen Methoden beheben. Er ist vielmehr der benutzten Selbstkonsistenzgleichung *inhärent.*

# Kapitel 7

# Zusammenfassung und Bewertung

## 7.1 Zusammenfassung

Zu Beginn dieser Arbeit wurde ein störungstheoretischer Zugang zum Andersongitters vorgestellt. Dazu war zunächst die Behandlung der lokalen Anteile in Form der wohlbekannten diagrammatischen Hybridisierungs-Störungstheorie für die Einzelstörstelle zusammenfassend darzustellen. Die Einbeziehung räumlicher Korrelationen, wie sie beim Andersongitter hinzutreten, wurde exemplarisch anhand der XNCA vorgestellt. Dabei wurde dieser Formalismus konsequent als Grenzfall unendlicher Raumdimension aufgefaßt. Aus den Schwierigkeiten bei der numerischen Auswertung bei tiefen Temperaturen, auf die alle Arbeitsgruppen stießen, welche das Andersongitter in unendlichen Dimensionen behandeln, ergab sich die Motivation, die Qualität der $d\!=\!\infty$-Näherung näher zu untersuchen.

Die aus der Gitterstörungstheorie resultierende Excluded-Volume-Gittersumme bildet den Ausgangspunkt aller folgenden, detaillierteren Untersuchungen. Hierbei wurden verschiedene neue Methoden zur Analyse des Excluded-Volume-Effektes im Hinblick auf seine Charakteristika in hohen Dimensionen entwickelt:

- Es wurde eine Interpretation der Gittersumme des Andersonmodells als erzeugende Funktion eines verallgemeinerten Self-avoiding Walks vorgestellt. Die so erzielte Darstellung erlaubt es, das Andersongitter und den Self-avoiding Loop mit denselben Methoden zu behandeln (Abschnitt 3.1).
- Mit der Lace-Entwicklung konnte eine Methode, die sich in der Theorie

der Self-avoiding Walks als sehr mächtig erwiesen hat, für die hier zu untersuchenden Excluded-Volume-Effekte in der Gittersumme nutzbar gemacht werden.

- Die Lace-Entwicklung wurde in dieser Arbeit zum ersten Mal für echt unendlichdimensionale Systeme eingesetzt und lieferte nach einer ausführlichen dimensionalen Analyse aller relevanten Diagrammbeiträge exakte Ausdrücke für die Gittersumme in $d = \infty$ sowie für die vollständigen $\frac{1}{d}$-Korrekturbeiträge. Es liegt hiermit erstmals eine strenge Ableitung für die $\frac{1}{d}$-Ausdrücke vor.

- Die $\frac{1}{d}$-Korrekturen wurden konkret für das Andersongitter ausgewertet und als Grundlage einer potentiellen Verbesserung der XNCA verwendet.

- Im Falle des Self-avoiding Loops konnte aus dem $d = \infty$-Ausdruck bewiesen werden, daß der Anteil nichtüberkreuzender Loops in unendlichen Dimensionen asymptotisch gegen den endlichen Wert $\frac{1}{e}$ konvergiert. Dieses Resultat ist angesichts der bisherigen Kenntnisse über endlichdimensionale Self-avoiding Walks besonders überraschend. Die Abweichung vom Mean-Field-Verhalten erwies sich als spezifisch für die *geschlossene, unendlichdimensionale* Variante des Self-avoiding Walks.

Die genannten Ergebnisse für den Self-avoiding Loop erlangen eine unmittelbare Bedeutung für die Behandlung des Andersongitters in $d = \infty$, d.h. für die effektive Einstörstellenmethode, wenn man den Self-avoiding Loop gleichsam als vereinfachtes Modellsystem auffaßt. Während der effektive Bandpropagator alle in $d = \infty$ relevanten Gitterprozesse *aufsummiert*, werden von der erzeugenden Funktion des Self-avoiding Walks diese lediglich *gezählt*. Innerhalb dieses Bildes ergibt sich der folgende Haupteinwand gegen eine $d = \infty$-Näherung:

*Während in jeder hohen, aber endlichen Dimension der Self-avoiding Loop trivialisiert, also alle räumlichen Korrelationen irrelevant werden, bleibt der unendlichdimensionale Self-avoiding Loop offenbar vom freien Random Loop verschieden. Das bedeutet aber, daß das unendlichdimensionale System gewissermaßen artifizielle Korrelationen erzeugt, die in keinem endlichdimensionalen System auftreten.*

Abschließend wurde der Blick zunächst wieder auf die alleinige Betrachtung des Andersongitters in der effektiven Single-Site-Näherung verengt. Hier konnte anhand numerischer Untersuchungen verschiedener mit der XNCA verwandter Variationen der effektiven Einstörstellenformulierung gezeigt werden, daß die numerischen Probleme der verschiedenen Gruppen allein auf die spezifische selbstkonsistente Form der Bestimmungsgleichung für das effektive Leitungsband zurückzuführen sind. Es wurde deutlich, daß Modifikationen wie die LNCA und die XNCA-1, welche diese selbstkonsistente Form aufbrechen, um zu tieferen Temperaturen zu gelangen, keinen Lösungszusammenbruch finden.

Dies ist auch in der Terminologie der Self-avoiding Walks zu verstehen: Ein Walk, bei dem allein die sofortige Rückkehr ausgeschlossen ist, besitzt gleichsam nur ein „endliches Gedächtnis“ und fällt nicht in dieselbe Universalitätsklasse wie ein echter Self-avoiding Walk. Eine Berücksichtigung der in dieser Arbeit explizit ermittelten $\frac{1}{d}$-Korrekturen zur XNCA vermochte an der Divergenzproblematik nichts Wesentliches zu ändern.

Da aber zunächst nicht auszuschließen war, daß es bisher unerkannt gebliebene Lösungen der Selbstkonsistenzgleichung gibt, wurde erstmals der Versuch unternommen, die spezifische Lösungsstruktur der Gleichung umfassend zu ermitteln. Dies gelang durch die Einführung von Modelldichten, die zu derselben „topologischen Struktur“ wie der des vollständigen Ausgangsproblems führen. Hierdurch wurde eine exakte Lösung der Selbstkonsistenzgleichung möglich, die einen *vollständigen Überblick über die topologische Struktur der Lösungsgesamtheit* gab, so daß die andeutungsweisen Ergebnisse einer anfänglichen numerischen Suche nun verstanden sind. Als wichtigstes Ergebnis ist zu nennen, daß der Lösungszusammenbruch mit der Ausbildung einer mehrdeutigen Lösung über einer Riemannschen Fläche einher geht. Da eine solche Lösung zwar von mathematischem Interesse, aber physikalisch nicht verwertbar ist, muß festgestellt werden, daß bereits mit der Ausbildung eines nichtanalytischen Peaks im effektiven Band eine physikalische Lösung nicht mehr existiert, so daß auch das Zusammensetzen bzw. die Auswahl von Teillösungen, wie es häufig praktiziert wird, nicht zu rechtfertigen ist.

Eine Bewertung des Versuches, die $d\!=\!\infty$-Ergebnisse durch eine $\frac{1}{d}$-Entwicklung zu verbessern, läßt sich auf der Basis der folgenden Ergebnisse vornehmen:

1. Die $\frac{1}{d}$-Korrekturen der Gittersumme, die zur XNCA-d führen, liefern für das Problem des Lösungszusammenbruchs keine Abhilfe (Abschnitt 6.2.3). Die räumlichen Korrelationen des $\frac{1}{d}$-Systems bleiben im wesentlichen dieselben wie die des $d\!=\!\infty$-Systems.

2. Bereits für das ungestörte Leitungsband führt eine $\frac{1}{d}$-Entwicklung nicht zu zufriedenstellenden Ergebnissen (Abschnitt 6.3).

3. Analoge Schwierigkeiten lassen sich auch bei der Untersuchung des freien Loops feststellen (Anhang B). Korrekturen endlicher Ordnung in $\frac{1}{d}$ liefer-

ten nur für Wege endlicher Länge eine Verbesserung. Das asymptotische Verhalten blieb das eines unendlichdimensionalen Self-avoiding Loops.

Hiernach läßt sich die folgende Kritik an einer $d = \infty$-Rechnung als Ausgangspunkt für eine $\frac{1}{d}$-Entwicklung festhalten:

*Korrekturen in der inversen Raumdimension eines genuin unendlichdimensionalen Systems vermögen mitunter ein endlichdimenionales nicht hinreichend zu approximieren. Durch Berücksichtigung einer* ***endlichen*** *Zahl von Ordnungen gelangt man nicht von dem typisch unendlichdimensionalen Verhalten fort. Solchermaßen korrigierte Systeme bleiben genuin unendlichdimensional.*

Dies läßt sich so verstehen, daß die spezifisch unendlichdimensionalen Korrelationen auf jeder Längenskala stattfinden und somit nicht durch Terme, welche nur Korrelationen auf endlicher Längenskala berücksichtigen, korrigiert werden können.

## 7.2 Ausblick

Angesichts der vielfältigen Probleme, die eine Theorie für das Andersongitter derzeit noch aufweist, wäre es sehr wünschenswert, wenn sich hier in naher Zukunft Fortschritte erzielen ließen. Dies gilt umso mehr, als sich die bekannten Methoden für das Andersonmodell mit einer einzelnen Störstelle als sehr erfolgreich herausgestellt haben. Jedoch scheint die Hinzunahme von Kohärenzeffekten durch die periodische Störstellenstruktur eine nichttriviale Erweiterung jenseits des effektiven Einstörstellenmodells zu erfordern. Hierbei muß das Hauptaugenmerk darauf liegen, eine angemessene Beschreibung räumlicher Korrelationen zu finden. An dieser Stelle kann allerdings keine Prognose gegeben werden, wie eine radikal neue Beschreibung auszusehen hat. Vielmehr soll angedeutet werden, auf welchen Wegen eine weitere Untersuchung des Andersongitters auf der Basis einer effektiven Einstörstellentheorie fortschreiten könnte.

### (a) Verbesserungen des lokalen Problems

Da dem Prinzip nach jede effektive Einstörstellentheorie auf der Reduktion des Gitterproblems auf ein Single-Impurity-Problem mit effektivem Band beruht, ist es in jedem Fall wünschenswert, die Behandlung des Single-Impurity-Problems zu verbessern.

**($a_1$)** Als flexibelste Methode für die Einzelstörstelle wurde bisher meist die auch in dieser Arbeit verwendete NCA herangezogen. Es wäre interessant zu untersuchen, wie sich etwaige Verbesserungen dieser Methode, also eine verbesserte Beschreibung lokaler Korrelationen, auf das Gitterproblem auswirken. Es ist bekannt, daß die Abrikosow-Suhl-Resonanz von der NCA in ihrer Höhe überschätzt wird und zudem leicht von der Fermikante in Richtung positiver Energien verschoben wird. Die sogenannte Post-NCA (Anders und Grewe (1994)), die höhere Vertexkorrekturen in die NCA-Gleichungen einbezieht, liefert hier leichte Verbesserungen: Der Resonanzpeak wird schwächer und rückt näher an die Fermikante heran. Der Einfluß auf die Gittertheorie dürfte sich jedoch als unerheblich herausstellen.

Eine genauere quantitative Aussage zu der Überschätzung der Resonanz ist insofern von Interesse, als die in dieser Arbeit abgeleitete Gleichung für den Lösungszusammenbruch (6.7) eine Bedingung für die Größe der Streumatrix, also letztlich der $f$-Dichte ist. Eine deutlich frühere Sättigung der lokalen Streuung könnte auch die Divergenzen des $d\!=\!\infty$-Systems beseitigen.

**($\boldsymbol{a_2}$)** Zu den weiteren aktuellen Ansätzen, die zu einer Verbesserung der NCA führen können, zählt der kürzlich entstandene Vorschlag von Keiter und Kilić (1998), die in der Störungsreihe enthaltenen Pauliprinzipverletzungen zu berücksichtigen. Bisher ist aber in dieser Richtung keine der NCA gleichkommende Resummation gelungen.

**($\boldsymbol{a_3}$)** Wie anhand der numerischen Ergebnisse aus Abschnitt 6.2 zu erkennen war, ist der typische Lösungszusammenbruch der XNCA allen echt selbstkonsistenten Bandbehandlungen eigen. Hierbei entsteht zwar in der effektiven Banddichte eine Singularität, die $f$-Dichte reagiert hierauf jedoch nur schwach und wächst wie im entsprechenden Einstörstellensystem mit fallender Temperatur weiter an (siehe besonders Abbildung 6.3). Das liegt darin begründet, daß die NCA im wesentlichen nur auf die Banddichte an der Fermikante, nicht aber auf die sich ausbildende Nichtanalytizität reagiert. Zudem tritt diese von der Fermikante verschoben auf, so daß auch die Post-NCA hier keine Abhilfe schaffen kann. Wie sich eine scharfe Struktur von der Art, wie sie sich in der Banddichte ausbildet, jenseits der NCA auf das Gittermodell auswirken kann, bleibt zu klären – insbesondere mit Blick auf Punkt **($\boldsymbol{c_1}$)**.

### (b) Verbesserungen des Gitterproblems

Die vorangegangenen Überlegungen haben die Beschreibung des Andersongitters über eine Selbstkonsistenzgleichung, also die Annahme eines $d=\infty$-Systems, als gegeben hingenommen. Angesichts der vielfältigen in dieser Arbeit vorgebrachten Vorbehalte gegen die $d=\infty$-Näherung des Andersongitters ist es aber angebracht, den Schwerpunkt zukünftiger Untersuchungen auf eine angemessene Behandlung der Gitterbeiträge zu legen.

**($b_1$)** Auch wenn gezeigt wurde, daß jede Korrektur endlicher Ordnung in $\frac{1}{d}$ zum $d=\infty$-System nicht zu einer besseren Approximation endlicher Dimensionen führt, so ist dennoch vorstellbar, daß gewisse unendliche Resummationen der $\frac{1}{d}$-Entwicklung hier eine Verbesserung bringen. Bei der Bestimmung eines Ausdrucks für die $\frac{1}{d}$-Korrekturen wurde allerdings deutlich, wie schwierig sich ein solches Unterfangen gestalten kann.

**($b_2$)** Es ist weiterhin zu bedenken, daß mit der XNCA nicht allein die durch die Gittersumme beschriebenen Korrelationen für den Grenzfall $d=\infty$ genähert bestimmt wurden. Auf dem Weg der Ableitung der XNCA wurden weitere Beiträge der Ordnung $\frac{1}{d}$, welche sich auf das Linked-Cluster-Problem, Anteile einer Kumulantenentwicklung und die fehlende Translationsinvarianz bezogen, identifiziert und weggelassen (vgl. Abschnitt 2.4.1). Bei einer Verbesserung in Richtung einer angemessenen Beschreibung endlicher Dimensionen liegen in einer diesbezüglichen Erweiterung der Theorie allerdings erhebliche Komplikationen.

**($b_3$)** Ein wichtiger Schritt auf dem Weg zu einem besseren Verständnis der räumlichen Korrelationen des Andersongitters ist sicherlich, zunächst einmal die Gittersumme in *endlichen* Dimensionen näher zu untersuchen. Dabei wird man mit einem anderen, für endliche Dimensionen spezifischen Typ von Korrelationen umzugehen haben. Speziell auf hohe Dimensionen angelegte Methoden, wie z.B. die Lace-Entwicklung, versagen hier. Ein möglicher Zugang wäre hier sicherlich – analog der Vorgehensweise für Self-avoiding Walks – die Gittersumme mit Monte-Carlo-Techniken auszuwerten.

**($b_4$)** Zieht man in Betracht, welch ein mächtiges Werkzeug die Lace-Entwicklung bei der Betrachtung von Korrelationen in hochdimensionalen Systemen darstellt, so ist sicherlich eine Übertragung der hier vorgestellten Ergebnisse auf andere Gittertypen denkbar. Angesichts der Universalitätshypothese, die besagt, daß das kritische Verhalten eines Systems im wesentlichen nur von der Dimension[1] abhängt, ist allerdings kein prinzipiell abweichendes Verhalten zu erwarten. Zudem gilt es hier, für mehrfach zusammenhängende Gitter[2] sinnvolle hochdimensionale Verallgemeinerungen zu finden.

Allgemein muß aber folgendes festgehalten werden: Auch wenn unendliche Raumdimensionen eine problematische Näherung für das Andersongitter darstellen, muß dies noch nicht bedeuten, daß die effektive Einstörstellenmethode zu verwerfen ist. Die ursprüngliche *lokale Näherung*, die älter als die hier vorgestellten $d=\infty$-Rechnungen ist, postuliert nur, daß man die Selbstenergie als Funktional der lokalen Größen, d.h. der diagonalen Propagatoren wählen kann. Dabei ist aber die genaue Form dieses Funktionals noch nicht festgelegt. Zwar hat das in dieser Arbeit verwendete Funktional die Eigenschaft, in unendlichen Dimensionen exakt zu werden, doch scheint es aufgrund seiner in dieser Arbeit ausführlich beschriebenen Pathologien keine angemessene Beschreibung für reale Systeme zu sein. Im Vertrauen auf den Wert einer lokalen Näherung gilt es daher, ein besseres Funktional zu finden. Ob dieses weiterhin zu singulärem Verhalten in der effektiven Banddichte an der Stelle der Abrikosow-Suhl-Resonanz führt, ist allerdings noch offen.

**(c) Weitere Ansätze**

**($c_1$)** Eine ganz andere Interpretation der numerischen Pathologien der Selbstkonsistenz erhält man, wenn man die Enstehung einer Nichtanalytizität beim Zusammenbruch als Andeutung eines *Phasenübergangs* ansieht. Exemplarisch wurde hier die Möglichkeit der Stabilisierung einer Schachbrettphase im Hinblick auf die Möglichkeit eines antiferromagnetischen Tieftemperaturverhaltens des Störstellengitters untersucht. Hierzu wurde angenommen, daß die lokalen Größen auf nichtäquivalenten Gitterplätzen eines (unendlichdimensionalen) hyperkubischen AB-Gitters verschieden sein können. Mit Hilfe einer Erweiterung der in dieser Arbeit vorgestellten Methoden zur Bestimmung der Gittersumme in $d=\infty$ auf Gitter vom AB-Typ, die eine entsprechend verringerte Translationsinvarianz besitzen, konnten die folgenden Bestimmungsgleichungen ermittelt werden. (Die jeweiligen Größen auf den A und B-Plätzen werden mit ei-

[1] Die Abhängigkeit von der Dimension des Ordnungsparameters ist hier nicht von Belang. Im Hinblick auf die Analogie zum $N \to 0$-Limes des $N$-Vektormodells ist diese als null anzunehmen.

[2] In einem einfach zusammenhängenden Gitter ist das Self-avoiding-Walk-Problem mangels Rückkehrmöglichkeit trivial.

nem $_\pm$ indiziert.)

$$G_\pm = \frac{\Delta_\pm}{1+T_\pm G_\pm}\, g(\Delta_\pm(z-S_\pm))$$

$$\text{mit}\quad \Delta_\pm := \sqrt{\frac{z-S_\mp}{z-S_\pm}} \qquad (\Delta_+\Delta_- = 1)$$

$$\text{und}\quad S_\pm := \frac{T_\pm}{z-T_\pm G_\pm}$$

Dies ist eine zweidimensionale, nichtlineare, implizite Bestimmungsgleichung für die $G_\pm$ und führt natürlich für $\Delta_\pm = 1$ wieder auf die Selbstkonsistenzgleichung des homogenen Systems (5.5). Auf der Grundlage dieser Formel sind sicherlich numerische Berechnungen möglich. Eine einfache algebraische Überlegung gibt jedoch Anlaß zu der Vermutung, daß diese Bemühung nicht ohne weiteres erfolgreich sein wird. Hierzu sei ein $T_\pm$ mit symmetrischer Dichte angenommen, so daß man sich auf die Untersuchung von $z=0$ beschränken kann. Es vereinfacht sich die Selbstkonsistenzbedingung zu der folgenden Gleichung mit den Hilfsgrößen $Q$ und $\tau$:

$$Q^2 g(Q) - Q = \tau \qquad \text{mit} \quad -Q := \sqrt{S_+S_-} \quad \text{und} \quad \tau := \sqrt{T_+T_-}$$

Man erhält dabei die gesuchten $G_\pm$ aus

$$G_\pm = -\frac{1}{T_\pm}\left(\frac{\tau}{Q}+1\right)$$

Da eine Brechung der Translationsymmetrie nur innerhalb des vollständigen effektiven Störstellenproblems möglich ist (bereits die $T_\pm$ müssen in Schachbrettphase vorliegen), wurde ein einfaches Funktional der Form $T(G) := -ia(1+ibG)$ betrachtet. Damit findet man, daß eine Lösungsverzweigung nur unter der Bedingung $b < 0$ möglich ist. Das ist gleichbedeutend mit einem $\rho_f$, das mit zunehmender Banddichte *sinkt.* Mit der NCA ist ein solches Verhalten jedoch nicht zu erreichen. Ein lokaler Ansatz hingegen, der auf Strukturen der Ableitungen von $G$ reagiert, etwa auf Nichtanalytizitäten an der Fermikante, könnte eine solche Aufspaltung ermöglichen. Hier wäre ein interessanter Ansatzpunkt für zukünftige Untersuchungen.

**($c_2$)** Es bleibt noch als höchst interessant zu erwähnen, daß eine zunächst nicht direkt verwandte theoretische Methode ganz ähnliche Verhaltensweisen wie das $d=\infty$-Andersongitter zeigt. Die sogenannte CPA („Coherent Potential Approximation“) ist eine näherungsweise Lösung von

Elektronen in einem Kristall mit Unordnung, d.h. mit stochastischem Potential $V$. Ähnlich wie in der XNCA gilt es hier, Streuprozesse unter Beachtung des Excluded-Volume-Problems aufzusummieren. Es ist bekannt, daß die CPA ebenfalls in $d = \infty$ exakt wird. Desweiteren weisen viele Versuche, die CPA über die lokale Näherung hinaus um Korrelationen innerhalb von Clustern zu erweitern, zu mehrdeutigen Spektraldichten (siehe z.B. Czycholl (1977)).

Eine direkte Formulierung der CPA über die Excluded-Volume-Gittersumme dieser Arbeit ist allerdings nicht gelungen, da die Summationsrestriktionen des Unordnungsproblems von prinzipiell anderer Natur sind. Hier läge dennoch ein interessanter Ansatz für weitere Untersuchungen, da man hoffen kann, daß sich aus den strukturellen Gemeinsamkeiten Rückschlüsse auf die allgemeine Natur der räumlichen Korrelationen ergeben.

## 7.3 Fazit

Angesichts der vielfältigen Vorbehalte, die sich im Verlauf der Argumentation gegen den Limes unendlicher Raumdimensionen ergeben haben, sollten zukünftig hochdimensionale Näherungen mit Vorsicht interpretiert werden. Im Gegensatz zu der Situation bei gewissen isingartigen Spinsystemen, bei denen die Näherung zu einem Mean-Field-System führt und somit Korrelationen vernachlässigt werden, muß bei der dynamischen Mean-Field-Theorie für Hubbardartige Systeme damit gerechnet werden, daß für das genuin unendlichdimensionale System sogar Korrelationen hinzutreten, die in endlichen Dimensionen keine Bedeutung haben. Hier muß man sich vergewissern, ob die Theorie nicht Artefakte erzeugt, die in den realen physikalischen Systemen, die man zu beschreiben trachtet, keine Entsprechungen haben.

Dieses unterschiedliche Verhalten im Grenzfall unendlicher Dimensionen läßt sich durch die unterschiedliche Qualität der jeweiligen Korrelationen erklären. Sind sie eher lokal, so liefert der Grenzübergang $d \to \infty$ einen lokalisierten Grenzfall, sind sie aber eher ausgedehnt, so resultieren Korrelationsbeiträge von räumlich ausgedehnten Strukturen, wie z.B. asymptotisch langen Wegen. Diese können dann in unendlichen Dimensionen derart dominieren, daß wie im Fall des Self-avoiding Loops das Mean-Field-Verhalten ausbleibt, oder gar, wie für die Selbstkonsistenzgleichung des Andersongitters, eine zu große lokale Streuung die theoretische Beschreibung des Systems gänzlich zum Zusammenbruch bringen kann.

Ein neuer Zugang, der diesbezüglich Verbesserungen erzielen will, kann nach den hier getroffenen Feststellungen dies nicht auf dem Wege endlicher Korrekturen mit dem Ausgangspunkt $d=\infty$ tun. Vielmehr müßten in starkem Maße Korrelationen in echt dreidimensionalen Systemen berücksichtigt werden. Daraus, daß für das ungleich einfachere System des Self-avoiding Walks gerade drei Dimensionen die problematischste Situation darstellen, läßt sich ersehen, daß dies eine überaus schwierige Aufgabe ist.

# Anhang A

# Die algebraische Lace-Entwicklung

Im folgenden wird eine Verallgemeinerung der *algebraischen* Formulierung der Lace-Entwicklung auf Gittersummen der Form (3.1) vorgenommen. Diese Methode wurde von Brydges und Spencer (1985) eingeführt, um das kritische Verhalten des schwach selbstvermeidenden Random Walks in hohen Dimensionen zu berechnen, und später von Hara und Slade (1992a/b) für den *klassischen* Self-avoiding Walk weiterentwickelt.

An dieser Stelle soll gezeigt werden, wie die algebraische Entwicklung und ihre graphische Darstellung die Diagrammtechniken zur Berechnung der Gittersumme in unendlichen Dimensionen und die diagrammatische Berechnung der $\frac{1}{d}$-Korrekturen aus vorangehenden Arbeiten (Leuders (1994), Melsheimer (1994), Gruissem (1995), Keiter, Leuders und Schönenberg (1995), Keiter, Kleineidam und Leuders (1997)) verallgemeinert und erweitert.

Mit den Bezeichnungen wie vor Gleichung (3.9) kann man die Gittersumme in der Form

$$G(x,y) = \sum_{\omega\in\Omega(x,y)} g_{\omega(0)\omega(1)} \cdot \ldots \cdot g_{\omega(n-1)\omega(n)} = \sum_{\omega\in\Omega^0(x,y)} G(\omega)$$

(mit $n = n_\omega$) über das Funktional

$$G(\omega) \coloneqq g_{\omega(0)\omega(1)} \cdot \ldots \cdot g_{\omega(n-1)\omega(n)} \cdot \underbrace{\prod_{0\le i<j\le n} (1-\delta_{ij}(\omega))}_{=:K_n(\omega)} \tag{A.1}$$

ausdrücken, wobei auch $\delta_{ij}(\omega) \coloneqq \delta_{\omega(i),\omega(j)}$ als ein Funktional des jeweiligen Random Walks $\omega$ zu lesen ist.

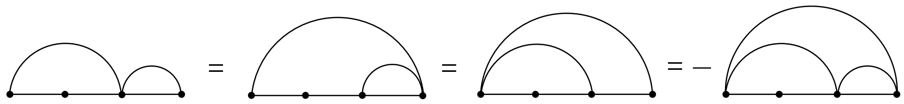
Das Funktional $K : \Omega^0 \to \{0,1\}$ ist gleich 1, wenn $\omega$ keine Selbstüberschneidungen besitzt, und verschwindet im anderen Falle. Multipliziert man die Produktdarstellung von $K$ aus, so erhält man

$$K_n(\omega) = \sum_{\Gamma \in \mathcal{G}_n} \underbrace{\prod_{(i,j)\in\Gamma} (-\delta_{i,j}(\omega))}_{=: K_\Gamma(\omega)} \tag{A.2}$$

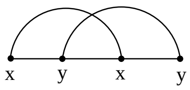
Dabei enthält $\mathcal{G}_n := \{\Gamma \mid \Gamma \subseteq \{(i,j) \mid 0 \le i < j \le n\}\}$ alle möglichen Mengen von Paaren aus $\{0, 1, \ldots, n\}$. Jedes $\Gamma \in \mathcal{G}_n$ läßt sich graphisch als Diagramm darstellen (siehe z.B. Abbildung A.2).

Die Summation über alle $\Gamma \in \mathcal{G} := \cup_n \mathcal{G}_n$ als Ausgangspunkt einer Excluded-Volume-Entwicklung der Gittersumme birgt jedoch zwei Probleme:

1. Es ergibt sich eine große Zahl von (überzählten) Beiträgen, die sich aufgrund verschiedener Vorzeichen z.T. gegeneinander aufheben:




2. Bei einer dimensionalen Analyse ergäbe sich, daß die einzelnen $K_\Gamma$ nicht zu einer festen minimalen Ordnung in $\frac{1}{d}$ beitragen:



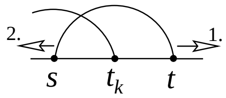

Beitrag zu $\mathcal{O}(\frac{1}{d})$ für $x \neq y$
Beitrag zu $\mathcal{O}(1)$ für $x = y$

Das führt dazu, daß für eine $\frac{1}{d}$-Berechnung schwer zu überblickende Familien von Diagrammen summiert werden müssen (vgl. Leuders (1994), Melsheimer (1994)).

Die daher rührenden Schwierigkeiten lassen sich durch eine geschickte *partielle Resummation* umgehen. Eine solche Resummation stellen die *„Laces“* dar, die hier vermittelt durch eine sogenannte *„Lace“-Abbildung* eingeführt werden. Eine Lace-Abbildung $\ell$ ordnet jedem $\Gamma \in \mathcal{G}$ einen reduzierten Graphen $\ell(\Gamma) \subseteq \Gamma$ zu. Für die Ziele der vorliegenden Arbeit wird $\ell$ Brydges und Spencer (1985) folgend durch folgende Reduktionsvorschrift definiert:

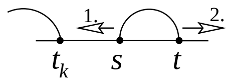
Seien bereits $(s_1, t_1), \ldots, (s_k, t_k) \in \Gamma$ ausgewählt.

(a) Gibt es Kanten $(s,t) \in \Gamma$ mit $\boxed{s < t_k < t \ (*)}$ , so wähle unter diesen diejenigen mit *maximalem* $t$, darunter wiederum diejenige (eindeutige) Kante mit *minimalem* $s$ als $(s_{k+1}, t_{k+1})$. Wiederhole Schritt (a), solange es Kanten mit der Eigenschaft $(*)$ gibt.




Gibt es keine Kanten mit (*) mehr, so fahre mit b) fort.

b) Gibt es Kanten $(s,t) \in \Gamma$ mit $\boxed{t_k < s \ (\dagger)}$ , so wähle diejenigen $(s,t) \in \Gamma$ mit *minimalem* $s \geq t_k$ und darunter wiederum diejenige mit maximalem $t$ als $(s_{k+1}, t_{k+1})$. (Dies kommt dem Beginn einer neuen Zusammenhangskomponente gleich und tritt z.B. gleich zu Beginn ein.) Kehre wieder zu Schritt (a) zurück.




(c) Das Verfahren endet, wenn es keine Kante $(s,t) \in \Gamma$ mit $(*)$ oder $(\dagger)$ mehr gibt.

**Abbildung A.1** Konstruktion der Lace-Abbildung $\ell$

Die Funktionsweise des durch die Schritte (a)–(c) definierten Algorithmus soll an dem folgenden Bild noch einmal illustriert werden:

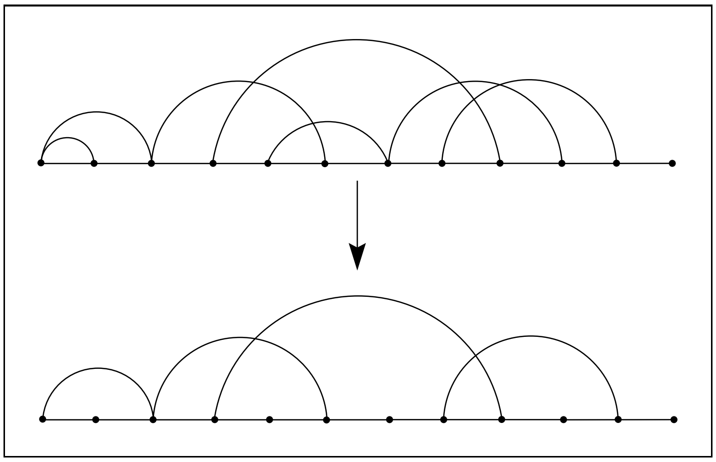


**Abbildung A.2**
Reduktion eines Graphen durch die Lace-Abbildung $\ell$

Diejenigen Graphen, die durch $\ell$ nicht mehr reduziert werden können, bezeichnet man als *Laces*: $\mathcal{L}_n := \{\Gamma \in \mathcal{G}_n \mid \ell(\Gamma)=\Gamma\}$, $\mathcal{L} := \cup_n \mathcal{L}_n$. Eine zu einem Lace $L$ hinzugefügte Kante $(s,t)$, die von der Lace-Abbildung wieder reduziert wird, nennt man *kompatibel* zu $L$. Die Menge der zu einem Lace $L$ kompatiblen Kanten bezeichnet man mit

$$C(L) = \{(s,t) \notin L \mid \ell(L \dot\cup \{(s,t)\}) = L\}$$

Man prüft leicht nach, daß die Lace-Abbildung $\ell$ die folgenden fundamentalen Eigenschaften besitzt:

(i) $\ell(\Gamma) \subseteq \Gamma$

(ii) $\ell(\Gamma) \subseteq G \subseteq \Gamma \Rightarrow \ell(G) = \ell(\Gamma)$

(iii) $\ell(\Gamma_1) = \ell(\Gamma_2) \Rightarrow \ell(\Gamma_1 \cup \Gamma_2) = \ell(\Gamma_1)$

Allein aufgrund dieser Eigenschaften kann man die beiden folgenden Aussagen verifizieren[1]

- $\ell^2 = \ell$, d.h. $\ell$ ist eine Projektion
- $\ell(\Gamma) = L \Leftrightarrow L \subseteq \Gamma \subseteq L \dot\cup C(L)$
  Genau die $\Gamma$, die (im booleschen Gitter) *zwischen* $L$ und $L \dot\cup C(L)$ liegen, werden durch $\ell$ zu $L$ reduziert. Diese Eigenschaft erweist sich als grundlegend für die Lace-Entwicklung.

Mit Hilfe der durch (A.1) definierten Lace-Abbildung $\ell$ wird nun die Summendarstellung des durch (A.2) dargestellten charakteristischen Funktionals $K$ umgeformt. Für einen Weg $\omega \in \Omega_n$ gilt:

$$\begin{aligned} K(\omega) &= \sum_{L\in\mathcal{L}_n} \left( \prod_{(s,t)\in L} (-\delta_{st}(\omega)) \right) \left( \sum_{\Gamma:\ell(\Gamma)=L} \left[ \prod_{(s,t)\in\Gamma\setminus L} \delta_{st}(\omega) \right] \right) \\ &= \sum_{L\in\mathcal{L}_n} (-1)^{|L|} \underbrace{\left( \prod_{(s,t)\in L} (\delta_{st}(\omega)) \prod_{(s,t)\in C(L)} (1-\delta_{st}(\omega)) \right)}_{=:\chi_L(\omega)} \end{aligned}$$

Die letzte Klammer definiert das *charakteristische Funktional* $\chi_L$ eines Laces, mit

[1] Die Eigenschaften (i)-(iii) *axiomatisieren* gemäß ZEILBERGER (1997) den Begriff der „Lace-Abbildung“ und führen zu einer abstrahierten Lace-Entwicklung. Die Wahl einer Abbildung $\ell$ mit den Eigenschaften (i)-(iii) kommt der Wahl eines entsprechenden Lace-Begriffs und der zugehörigen Lace-Entwicklung gleich. Man hat so die Möglichkeit, neben dem hier beschriebenen $\ell$ weitere, dem jeweiligen Problem angepaßte Lace-Abbildungen zu konstruieren.

dem sich $K(\omega)$ vereinfacht schreiben läßt als

$$\boxed{K(\omega) = \sum_{L\in\mathcal{L}} (-1)^{|L|}\chi_L(\omega)} \tag{A.3}$$

Dabei ist $|L|$ die Zahl der Kanten des Laces $L$, während $n_L$ die Zahl der Punkte des zugrundeliegenden Weges bezeichnet.

Die Summe über *alle Graphen* reduziert sich also auf eine Summe über *alle Laces*. Die charakteristische Funktion

$$K(\omega) = \begin{cases} 1 & \text{für } \omega(i) \neq \omega(j)\ \forall\{i,j\} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

wird ersetzt durch eine (vorzeichengewichtete) Summe über die den Laces $L$ zugeordneten, charakteristischen Funktionale

$$\chi_L(\omega) = \begin{cases} 1 & \text{für } \omega(i) = \omega(j)\ \forall\{i,j\} \in L \ \underline{\text{und}}\ \omega(i) \neq \omega(j)\ \forall\{i,j\} \in C(L) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Bemerkung:
An dem Ausdruck (A.3) kann man erkennen, inwieweit die Lace-Entwicklung eine Verallgemeinerung des aus der Kombinatorik bekannten *Prinzips des Ein- und Ausschlusses* ist. In einer allgemeineren Darstellung ersetzt man die Kantenmenge eines Graphen $\Gamma \in \mathcal{G}_n$ durch eine Menge von Eigenschaften $\Gamma \subseteq P$. Für eine Eigenschaft $p \in P$ und ein Element $\omega$ aus einer allgemeinen Menge $X$ testet das Funktional $\delta_p(\omega)$, ob $\omega \in X$ die Eigenschaft $p$ hat. Damit ermittelt die Summe

$$\sum_{\omega\in X} K(\omega) = \sum_{\omega\in X} \prod_{p\in P} (1 - \delta_p(\omega))$$

die Zahl $N_0$ aller $\omega \in X$, die *keine* Eigenschaft aus $P$ haben. Der einzelne Summand $N(L)$ der Lace-Entwicklung dieses Ausdrucks

$$\underbrace{\sum_{\omega\in X} K(\omega)}_{N_0} = \sum_{L\in\mathcal{L}} (-1)^{|L|} \underbrace{\sum_{\omega\in X} \chi_L(\omega)}_{N(L)}$$

entspricht dann der Zahl aller $\omega \in X$, die *alle* Eigenschaften aus $L$ und *keine* Eigenschaft aus $C(L)$ besitzen. Die Zahl $N_0$ bestimmt man also durch Ein- und Ausschluß bestimmter, durch die Lace-Abbildung $\ell$ charakterisierter Teilmengen.
Das klassische Prinzip vom Ein- und Ausschluß erhält man, wenn man als Lace-Abbildung die Identität $\ell = \mathrm{id}_P$ wählt. Dann ist jedes $L \subseteq P$ ein Lace und $C(L)$ ist für alle $L$ leer. Faßt man alle Mengen $L \subseteq P$ mit gleicher Anzahl von Eigenschaften $|L|$ zusammen, so erhält man

$$N_0 = \sum_n (-1)^n N_n$$

wobei $N_n$ die Zahl der Elemente $\omega \in X$ mit *genau* $n$ Eigenschaften bezeichnet.

Aus (A.1) und (A.3) ergibt sich die Lace-Entwicklung für den Propagator $G(\omega)$:

$$G(x,y) = \sum_{L\in\mathcal{L}} (-1)^{|L|} \left( \sum_{\omega\in\Omega_n^0(x,y)} G(\omega)\chi_L(\omega) \right) \qquad \text{mit } n = n_L$$

Die hiermit durchgeführte Resummation der Beiträge zur Excluded-Volume-Gittersumme durch die Lace-Entwicklung soll abschließend noch eine weitere, im Prinzip von den vorangegangenen Ausführungen unabhängige Vereinfachung in Form einer Selbstenergie-Resummation erfahren. Dazu stellt man fest, daß man jeden Graphen $\Gamma \in \mathcal{G}$ (und parallel das entsprechende Funktional $K_\Gamma$) auf offensichtliche Weise nach *zusammenhängenden* Teilgraphen (bzw. Faktoren in einer noch zu definierenden Funktionalalgebra) zerlegen kann. Ein $\Gamma \in \mathcal{G}_n$ heiße *zusammenhängend*, wenn $\forall k \in \{1,\ldots,n-1\}\ \exists (i,j) \in \Gamma : i < k < j$. Es bezeichne $\mathcal{G}_n^c \subset \mathcal{G}_n$ die Menge der zusammenhängenden Graphen. Entsprechend sei (in Analogie zu $K(\omega)$ und $G(\omega)$) definiert

$$J(\omega) = \sum_{\Gamma\in\mathcal{G}_n^c} \prod_{(i,j)\in\Gamma} (-\delta_{i,j}(\omega)) \tag{A.4}$$

$$\Sigma(\omega) = g_{\omega(0)\omega(1)} \cdot \ldots \cdot g_{\omega(n-1)\omega(n)} \cdot J_n(\omega) \tag{A.5}$$

Um das Funktional $K$ nach seinen Zusammenhangskomponenten zu zerlegen, muß eine Multiplikation erklärt werden, d.h. die $K_n$ müssen in eine umfassende (graduierte) Algebra $\mathcal{A}$ eingebettet werden. Wenn $\mathcal{A}_n$ den Vektorraum der linearen Funktionale auf $\Omega_n^0$ bezeichnet (z.B. $K_n \in \mathcal{A}_n$, $g \in \mathcal{A}_1, \mathcal{A}_0 \equiv \mathbb{R}$), so ist $\mathcal{A}$ eine direkte Summe $\mathcal{A} = \bigoplus_{n=0}^\infty \mathcal{A}_n$, was insbesondere bedeutet, daß ein Funktional aus $\mathcal{A}$ immer nur mit seiner $n-$Komponente auf ein $\omega \in \Omega_n^0$ wirkt. Das *Produkt* zweier Funktionale wird nun über die Verkettung ($\circ$) von Wegen definiert:

$$(A\cdot B)(\omega) = A(\omega_1)B(\omega_2) \quad \text{für } A \in \mathcal{A}_m,\ B \in \mathcal{A}_k,\ |\omega_1| = m, |\omega_2| = k,\ \omega = \omega_1 \circ \omega_2$$

Mit diesen Definitionen läßt sich jedes $K_n$ in zusammenhängende $J$ und jedes $G$ in zusammenhängende $\Sigma$ zerlegen:

$$K = 1 + \sum_{n=1}^\infty (1_1 + J)^n \quad (1_1 \text{ ist das neutrale Elemenent in } \mathcal{A}_1)$$

$$G = 1 + \sum_{n=1}^\infty (g+\Sigma)^n = \frac{1}{1-(g+\Sigma)} \tag{A.6}$$

Nachdem für die Selbstenergieentwicklung der Gittersumme die Funktionale $J$ und $\Sigma$ bereitgestellt sind, kann für diese ganz analog wie für $K$ und $G$ eine Lace-Entwicklung formuliert werden. Dabei wird die Summe über alle zusammenhängenden Diagramme ($\mathcal{G}_n^c$) durch eine Summe über *zusammenhängende Laces* $\mathcal{L}_n^c$ ausgedrückt:

$$\begin{aligned} J(\omega) &= \sum_{L\in\mathcal{L}^c} (-1)^{|L|}\, \chi_L(\omega) \\ \Sigma(\omega) &= \sum_{L\in\mathcal{L}^c} (-1)^{|L|}\, G(\omega)\chi_L(\omega) \end{aligned}$$

Eine Teilsummation über alle Laces gleicher Ordnung $|L|$ und die Summation über alle Wege $\omega \in \Omega^0(x,y)$ ergibt schließlich

$$\boxed{\Sigma(x,y) = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n\, \Sigma_n(x,y)} \tag{A.7}$$

$$\text{mit}\quad \Sigma_n(x,y) = \sum_{\{L\in\mathcal{L}^c \,\big|\, |L|=n\}} \left( \sum_{\omega\in\Omega_n^0(x,y)} G(\omega)\chi_L(\omega) \right)$$

Die mittlere Spalte der Abbildung (3.1) auf S.58 stellt die Struktur der einfachsten Laces $\Sigma_n$ dar. Als vereinfachend für die Zusammenfassung der Laces in Klassen mit gleichem $|L|$ stellt sich dabei heraus, daß jedem $n \in \mathbb{N}$ eine *eindeutige Kantenstruktur* aller $L \in \mathcal{L}^c$ mit $|L| = n$ entspricht, die als *Skelettdiagramm* der Laceklasse $L$ bezeichnet sei. Jede Kante aus $L$ bedeutet eine Platzgleichheit und wird durch einen runden Bogen oberhalb des Weges dargestellt. (Dieser repräsentiert somit die $\delta_{st}$-Faktoren von $\chi_L$.)

Das Skelettdiagramm einer Laceklasse muß nun noch durch alle Prozesse, die mit den Ausschlußbedingungen in $C(L)$ verträglich sind, renormiert werden. Dies läßt sich in zwei Forderungen untergliedern:

1. Alle Prozesse, die jeweils zwischen zwei benachbarten Punkten des Skelettdiagramms eines Laces stattfinden, müssen Self-avoiding Walks sein. Die benachbarten Endpunkte von Lace-Kanten können in bestimmten Fällen zusammenfallen. Daß die dort eingeschobenen Prozesse dann auch die Länge 0 haben können, wird durch die fetten (anstelle der doppelten) Linien gekennzeichnet.

2. Zudem müssen je zwei Teilwege, die durch eine mit $L$ kompatible Kante aus $C(L)$ verbunden werden können, paarweise diskunkt sein. Dies wird durch die gestrichelten Linien unterhalb des Diagrammes dargestellt. (Diese repräsentieren somit die $(1-\delta_{st})$-Anteile von $\chi_L$.) An den Diagrammen (3.1) kann man so zu jedem Lace $L$ die Menge aller kompatiblen Linien $C(L)$ ablesen.

Die durch die Definition der Lace-Abbildung $\ell$ erzeugten zusammenhängenden Laces erweisen sich als völlig *identisch* mit den Ausdrücken, wie sie in Abschnitt (3.2) durch iterative Korrektur der Dysongleichung erzeugt wurden. Damit sind die beiden unterschiedlich abgeleiteten Lace-Entwicklungen äquivalent.

Abschließend sei noch angemerkt, daß die zusammenhängenden Laces genau die *minimal zusammenhängenden* Diagramme darstellen, d.h. solche, die durch Löschen irgendeiner Linie unzusammenhängend werden. Durch diese Eigenschaft ist die Lace-Entwicklung jedoch noch nicht eindeutig charakterisiert, vielmehr ist sie erst durch Festlegung einer Lace-Abbildung $\ell$ wohldefiniert. Diese legt nämlich fest, *welche* Diagramme jeweils zu einem bestimmten Lace $L \in \mathcal{L}^c$ reduziert werden.

# Anhang B

# Kombinatorische Berechnung des Random Loops in hohen Dimensionen

In Abschnitt 4.2.2 wurde das asymptotische Verhalten des Random Loops in hohen Dimensionen mit analytischen Mitteln berechnet. An dieser Stelle wird nun alternativ eine rein kombinatorische Herleitung angegeben. Diese gibt Einblicke in das geometrische Verhalten der Random Loops und führt zusätzlich zu einem exakten Ausdruck für die Zahl der Random Loops für jede Länge und Raumdimension.

Um die Zahl $a_{2n}$ aller Random Loops der Länge $2n$ zu bestimmen, werden zunächst $k$ aus $d$ Dimensionen ausgewählt und alle zurückkehrenden Wege der Länge $2n$ und Dimensionalität $k$ betrachtet. Es bezeichne $\mu_{2n}^k$ die Zahl der Loops der Länge $2n$ und Dimensionalität $k$. Dabei ist die *Dimensionalität* eines Loops die minimale Dimension eines kartesischen Unterraums, in den der Loop eingebettet ist. Hat man einmal $k$ Dimensionen aus $d$ ausgewählt, so muß der Weg in jeder dieser Dimensionen gleichviel Schritte vorwärts wie rückwärts machen. Unter allen $(2n)!$ möglichen Permutationen dieser Einzelschritte sind jeweils $(\alpha_k!)^2$ identisch, wenn $\alpha_k$ die Zahl der Schritte in die $k$-te Dimension bezeichnet. Es ist daher

$$a_{2n} = \sum_{k=0}^{n} \binom{d}{k} \mu_{2n}^k, \qquad \mu_{2n}^k = \sum_{\alpha \in P(n,k)} \frac{(2n)!}{(\alpha!)^2} \tag{B.1}$$

Dabei ist $\alpha$ ein Multivektor aus der Menge aller *Partitionen* der Zahl $n$ in $k$ positive Summanden $\alpha_k \in \mathbb{N}$

$$P(n,k) = \{\alpha \in \mathbb{N}^k \mid |\alpha| = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i = n\}$$

und $\alpha!$ steht abkürzend für $\alpha_1!\alpha_2!\dots\alpha_k!$. Formal kann man dabei in der obigen Summe mit $k=0$ beginnen, wenn man $P(n,0)=\{\}$ setzt.

Um nun eine systematische Entwicklung dieses Ausdrucks nach Potenzen von $d$ zu erhalten, entwickelt man den Binomialfaktor

$$\binom{d}{k} = \frac{1}{k!}\sum_{m=0}^{k} S_k^{(m)} d^m$$

mit den hierdurch definierten Stirlingzahlen 1.Art $S_k^{(m)}$ und erhält

$$a_{2n} = \sum_{m=0}^{n}\left(\sum_{k=m}^{n}\frac{S_k^{(m)}}{k!}\mu_{2n}^k\right)d^m \tag{B.2}$$

Zur Bestimmung der beiden führenden Ordnungen von $a_{2n}$ müssen nun $\mu_n^n$ und $\mu_n^{n-1}$ berechnet werden. Nun gilt:

$$P(n,n)=\{(1,1,\dots,1)\} \Rightarrow \mu_n^n=(2n)! \qquad \text{und}$$

$$P(n,n-1)=\{(2,1,\dots,1),(1,2,1,\dots,1),\dots,(1,\dots,1,2)\} \Rightarrow \mu_n^{n-1}=\frac{(n-1)(2n)!}{(2!)^2}$$

und damit ergibt sich

$$a_{2n} = d^n\frac{(2n)!}{n!} + d^{n-1}\left(\frac{S_{n-1}^{(n-1)}(n-1)(2n)!}{(n-1)!(2!)^2} + \frac{S_n^{(n-1)}(2n)!}{n!}\right) + \mathcal{O}(d^{n-2})$$

Nach Einsetzen der Stirlingzahlen ($S_n^{(n-1)} = -\binom{n}{2}$ ) erhält man für $a_{2n}^{(1)}$, die Zahl der Random Loops bis zur zweithöchsten Ordnung:

$$a_{2n} = \underbrace{\frac{(2n)!}{n!}d^n - \frac{(2n)!}{4(n-2)!}d^{n-1}}_{a_{2n}^{(1)}} + \mathcal{O}(d^{n-2}) \tag{B.3}$$

Nun soll noch ein geschlossener Ausdruck für $a_{2n}$, der für alle Dimensionen $d$ gilt, angegeben werden. Die Menge der Partitionen, die durch $P(n,k)$ beschrieben wird, sei dazu folgendermaßen umgedeutet. Man zählt, wie oft in einem $\alpha \in P(n,k)$ jede Zahl $i$ vorkommt, und definiert $a_i := |\{j \mid \alpha_j = i\}|$ für $i=1,\dots,n$. Dann ist der Vektor $a=(a_1,\dots,a_n)$ aus der Menge

$$p(n,k) := \{a \in \mathbb{N}_0^n \mid \sum_{i=1}^{n} a_i = k\}$$

So z.B. wird $(1,4,2,1)$, aber auch jede Permutation davon, durch $(2,1,0,1,0,0,0,0)$ dargestellt. Damit kann man eine Summe über $\alpha \in P(n,k)$ der folgenden Form auf eine Summe über $a \in p(n,k)$ umschreiben:

$$\sum_{\alpha\in P(n,k)}\prod_{j=1}^{k} f(\alpha_j) = k! \sum_{a\in p(n,k)}\prod_{i=1}^{n}\frac{f(i)^{a_i}}{a_i!}$$

Dies ist offensichtlich möglich bei

$$\begin{aligned} \mu_{2n}^k &= (2n)! \sum_{\alpha\in P(n,k)} \frac{1}{(\alpha_1!)^2 \dots (\alpha_k!)^2} \\ &= (2n)!\, k! \sum_{a\in p(n,k)} \frac{1}{(1!)^{2a_1} a_1! \dots (n!)^{2a_n} a_n!} \\ &= \frac{(2n)!}{n!} k! \sum_{a\in p(n,k)} (n;a)' \frac{1}{(1!)^{a_1} \dots (n!)^{a_n}} \end{aligned} \tag{B.4}$$

In der letzten Zeile hat man dabei den Multinomialkoeffizienten 3.Art abfaktorisiert

$$(n;a)' := (n; a_1, \dots, a_n)' = \frac{n!}{(1!)^{a_1} a_1! \dots (n!)^{a_n} a_n!}$$

der die Anzahl der Partitionen einer $n$-elementigen Menge in $a_i$ Teilmengen der jeweiligen Größe $i$ beschreibt.

Setzt man den Ausdruck (B.4) in (B.1) ein, so kann man die nach Faà di Bruno benannte Ableitungsformel anwenden (vgl. Abramowicz und Stegun (1972) [24.1.2.C])

$$\frac{d^n}{dx^n} f\circ g(x) = \sum_{k=0}^{n} \sum_{a\in p(n,k)} (n;a)' f^{(k)} \circ g(x) \cdot g'(x)^{a_1} g''(x)^{a_2} \dots g^{(n)}(x)^{a_n}$$

wenn man $f(x)=x^d$ setzt und

$$\tilde{J}(x) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{(n!)^2}$$

Dann ist $\tilde{J}^{(n)}|_{x=0} = \frac{1}{n!}$ und $f^{(k)}(x) = d(d-1)\dots(d-k+1) = \binom{d}{k} k!$ und man findet:

$$a_{2n} = \frac{(2n)!}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (\tilde{J}(x)^d)\Big|_{x=0} \tag{B.5}$$

$\tilde{J}(x)$ ist mit der Familie der Besselfunktionen über $\tilde{J}(x) = J_0(2i\sqrt{x})$ verwandt.

In dieser Form wurden algebraisch einige exakte Werte bestimmt, um die Qualität der $\mathcal{O}(\frac{1}{d})$-Näherung zu bewerten. Die $a_{2n}^{(1)}$ sind nur angegeben, solange sie als sinnvolle Approximation angesehen werden können.

| d | 1 | | 2 | | 3 | | 4 | | 5 | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $2n$ | $a_{2n}$ | $a_{2n}^{(1)}$ | $a_{2n}$ | $a_{2n}^{(1)}$ | $a_{2n}$ | $a_{2n}^{(1)}$ | $a_{2n}$ | $a_{2n}^{(1)}$ | $a_{2n}$ | $a_{2n}^{(1)}$ |
| 2 | 2 | 2 | 4 | 4 | 6 | 6 | 8 | 8 | 10 | 10 |
| 4 | 6 | 6 | 36 | 36 | 90 | 90 | 168 | 168 | 270 | 270 |
| 6 | 20 | | 400 | 240 | 1860 | 1620 | 5120 | 4800 | 10900 | 10500 |
| 8 | 70 | | 4900 | | 44730 | | 190120 | 107520 | 551950 | 420000 |
| 10 | 252 | | 63504 | | 1172556 | | 7939008 | | 32232060 | |

Man sieht deutlich, daß sogar schon beim *unrestringierten* Random Loop eine Entwicklung nach der inversen Raumdimension nur für kurze Weglängen zu einer sinnvollen Approximation für endliche Dimensionen führt.

# Anhang C

# Der Self-avoiding Walk in $d = \infty$

Als zentrales Ergebnis des Abschnitts 4.2.3 steht die Tatsache, daß der *Self-avoiding Loop in genuin unendlichen Dimensionen nicht zum Random Loop trivialisiert.* Im Gegensatz zu dem in Abschnitt 4.1 erläuterten Fall endlicher, aber hoher Dimensionen findet also kein Übergang zu Mean-Field-Verhalten statt. Dies wird am deutlichsten aus dem in dieser Arbeit bewiesenen asymptotischen Verhalten der Koeffizienten (4.6) und (4.5)

$$a_{2n} \sim \frac{(2n)!}{n!} d^n (1 + \mathcal{O}(\tfrac{1}{d})) \qquad u_{2n} \sim \frac{1}{e} \frac{(2n)!}{n!} d^n (1 + \mathcal{O}(\tfrac{1}{d}))$$

und führt letztlich zu unterschiedlichen erzeugenden Funktionen:

$$G(z) \neq C(z) + \mathcal{O}(\tfrac{1}{d}) \tag{C.1}$$

Daß dieses besondere Verhalten in unendlichen Dimensionen spezifisch für den *geschlossenen* Typ des Self-avoiding Walk (SAL) ist, soll im folgenden gezeigt werden.

Dazu seien an dieser Stelle entsprechend der Definition 3.1 die erzeugenden Funktionen $C^\times(z)$ für den <u>offenen</u> Random Walk (RW) bzw. $G^\times(z)$ für den <u>offenen</u> Self-avoiding Walk (SAW) in unendlichen Dimensionen eingeführt. (Das Zeichen $^\times$ soll andeuten, daß in diesem Anhang auftauchenden Größen sich auf <u>offene</u> Walks beziehen.)

| Anzahl der Walks der Länge $n$ | $b_n$ | $c_n$ |
|---|---|---|
| erzeugende Funktion | $C^\times(z) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \frac{z^n}{(2d)^n}$ | $G^\times(z) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \frac{z^n}{(2d)^n}$ |

Ein entscheidender Unterschied zu Definition (3.2) besteht in der stärkeren Skalierung der $n$-Schrittprozesse mit $\frac{1}{d}$ statt mit $\frac{1}{\sqrt{d}}$. Diese ist dem asymptotischen Verhalten des Random Walks und des Self-avoiding Walks angemessen (es gilt $c_n \sim b_n \sim d^n$) und garantiert sinnvolle erzeugende Funktionen im Limes $d\!\to\!\infty$. Der zusätzliche Faktor 2 im Nenner ist lediglich eine willkürliche Konvention und führt zu einer besonders einfachen Darstellung der erzeugenden Funktion des Random Walks. Dieser ist nicht wesentlich von seinem endlichdimensionalen Pendant verschieden und läßt sich sofort berechnen:

$$b_n = (2d)^n \quad \Rightarrow \quad C^\times(z) = \frac{z}{1-z}$$

Im Falle des Self-avoiding Walks führen die Selbstvermeidungen zu Korrekturen in der erzeugenden Funktion, so daß $c_n \leq b_n$ gilt. Diese Korrekturen werden im folgenden durch kombinatorische Überlegungen ermittelt, und es wird sich herausstellen, daß im Grenzfall $d\!\to\!\infty$ im Gegensatz zu (C.1) die erzeugenden Funktionen identisch werden:

$$G^\times(z) = C^\times(z) + \mathcal{O}(\tfrac{1}{d}) \tag{C.2}$$

Damit ist dann gezeigt, daß *auch im Fall genuin unendlicher Dimensionen der Self-avoiding Walk zum Random Walk trivialisiert.*

Zu einer systematischeren Entwicklung nach Potenzen von $\frac{1}{d}$ seien die Random Walks (und später auch die Self-avoiding Walks) in Klassen von Wegen gleicher *Dimensionalität* eingeteilt. Als *Dimensionalität* eines Weges ist die minimale Dimension eines kartesischen Unterraums, in den er eingebettet werden kann, zu verstehen. Hat man einmal $k$ Dimensionen aus $d$ ausgewählt, so sind unter allen $2^n n!$ möglichen Kombinationen der Einzelschritte je $\alpha! \coloneqq \alpha_1!\alpha_2!\ldots\alpha_k!$ identisch, wenn $\alpha_k$ die Zahl der in die $k$-te ausgewählte Dimension gehenden Schritte ist. Mit

$$P(n,k) \coloneqq \{\alpha | \alpha \in \mathbb{N}^k, |\alpha| = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i = n\}$$

wird folglich die Menge aller *Partitionen* von $n$ in $k$ positive Zahlen beschrieben.

Diese Einteilung entspricht dann der folgenden Umschreibung der Koeffizienten $b_n$ des Random Walks:

$$b_n = \sum_{k=0}^{n} \binom{d}{k} \gamma_n^k, \qquad \gamma_n^k = \sum_{\alpha \in P(n,k)} \frac{2^n n!}{\alpha!} \tag{C.3}$$

Dabei ist $\gamma_n^k$ die Zahl der Wege der Länge $n$ und Dimensionalität $k$. Offensichtlich hängt $\gamma_n^k$ mit der Zahl der *Mengenpartitionen* ohne Beachtung der Reihenfolge zusammen und ist daher aus den Stirlingzahlen 2.Art berechenbar:

$$\gamma_n^k = 2^n k! s_n^k \tag{C.4}$$

Formal kann man in der obigen Summe mit $k=0$ beginnen, wenn man $P(n,0)=\{\}$ bzw. $S_0^{(0)}=0$ vereinbart.

Um nun eine systematische Entwicklung nach Potenzen von $d$ zu erhalten, wird der Binomialfaktor in (C.3) mit den Stirlingzahlen 1.Art $S_k^{(m)}$ entwickelt:

$$b_n = \sum_{m=0}^{n} d^m \frac{1}{k!} \sum_{k=m}^{n} S_k^{(m)} \gamma_n^k \tag{C.5}$$

Aufgrund der Orthogonalitätsrelation der Stirlingzahlen

$$\sum_{k=m}^{n} S_k^{(m)} s_n^{(k)} = \delta_{mn}$$

erhält man für den Random Walk natürlich das triviale Ergebnis $b_n = (2d)^n$ zurück.

Für den Self-avoding Walk sind nun die $\gamma_n$ in (C.5) durch neue Koeffizienten zu ersetzen:

$$\gamma_n^k \;\rightarrow\; \gamma_n^k - \delta_n^k$$

Die $\delta_n^k$ enthalten alle Information über die Überkreuzungsausschlüsse und beschreiben somit die Excluded-Volume-Korrelationen. Man kann diese $\delta_n^k$ deuten als die Zahl der Wege der Länge $n$ und Dimensionalität $k$, die Selbstüberschneidungen aufweisen. Die $c_n$ lassen sich damit in folgender Form schreiben:

$$c_n = (2d)^n - \sum_{m=0}^{n} (2d)^m \sum_{k=m}^{n} \frac{2^{-m}}{k!} S_k^{(m)} \delta_n^k \tag{C.6}$$

Offensichtlich benötigt man zur Bestimmung der Anteile der Potenz $d^m$ nur die $\delta_n^k$ mit $m \leq k \leq n$. Damit erhält man für die ersten Glieder der $\frac{1}{d}$-Entwicklung die folgenden Aussagen:

**1. $\mathcal{O}(\frac{1}{d^0})$:**

Da ein Weg der Länge *und* Dimensionalität $n$ sich nicht selbst überkreuzen kann, ist $\delta_n^n = 0$, und daher ist in nullter Ordnung $c_n = (2d)^n + \mathcal{O}(d^{n-1})$. Man kann also hier bereits feststellen, daß $C^\times(z) = G^\times(z) + \mathcal{O}(\frac{1}{d})$.

**2. $\mathcal{O}(\frac{1}{d^1})$:**

Wählt man für einen Weg der Länge $n$ nur $n-1$ Dimensionen, so erhält man genau dann eine Selbstüberschneidung, wenn (a) die beiden Schritte in diese Dimension direkt aufeinander folgen ($n\!-\!1$ Positionen innerhalb des Weges und $n\!-\!1$ mögliche Raumrichtungen) und (b) sie in entgegengesetzte Richtungen erfolgen (2 von $4 = 2^2$ Paritätskombinationen). Also ist

$$\delta_n^{n-1} = 2(n\!-\!1)^2 \cdot 2^{n-2}(n\!-\!2)! = 2^{n-1}(n\!-\!1)!(n\!-\!1)$$

Mit $S_{n-1}^{(n-1)} = 1$ ergibt sich die Korrektur

$$c_n = \underbrace{(2d)^n - (2d)^{n-1}(n\!-\!1)}_{=:c_n^{(1)}} + \mathcal{O}(d^{n-2}) \tag{C.7}$$

und damit

$$\begin{aligned} G^\times(z) &= C^\times(z) - \frac{1}{2d}\sum_{n=1}^{\infty}(n\!-\!1)z^n + \mathcal{O}(\tfrac{1}{d^2}) \\ &= \frac{z}{1-z} - \frac{1}{2d}\frac{z^2}{(1-z)^2} + \mathcal{O}(\tfrac{1}{d^2}) \end{aligned} \tag{C.8}$$

Man erkennt insbesondere, daß diese Korrektur nur für $d \gg n$ sinnvoll ist. Schon bei $n = 2d+1$ resultiert offenbar der unsinnige Wert $c_n^{(1)} = 0$.

Auf der Grundlage dieser Methode ist nun eine allgemeine Entwicklung auch in höheren Potenzen von $\frac{1}{2d}$ denkbar, da man aufgrund von (C.6) nur selbstüberschneidende Wege hoher Dimensionalität betrachten muß. Eine Systematisierung der Betrachtungen müßte noch die kombinatorischen Faktoren $\frac{2^{-m}}{k!}\delta_n^k$ weiter ausreduzieren und nach einfachsten Typen von Selbstüberschneidungen klassifizieren. Diese finden bei Betrachtung der Korrektur $(2d)^{-m}$ ja unabhängig von der Weglänge $n$ nur in kleinen Teilabschnitten der Größenordnung $m$ statt.

Ein Vergleich der für hohe Dimensionen in erster Odnung berechneten $c_n^{(1)}$ mit exakten Werten für $c_n$ in endlichen Dimensionen (entnommen aus Fisher und Gaunt (1964)) soll die typische Qualität solcher Korrekturrechnungen illustrieren. Für jede Dimension $d$ befindet sich in der ersten Spalte jeweils die $c_n$, in der zweiten die $c_n^{(1)}$ aus (C.7), soweit sie noch als sinnvolle Approximation angesehen werden können.

| n | $d$=2 | | $d$=3 | | $d$=4 | | $d$=5 | | $d$=6 | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | $c_n$ | $c_n^{(1)}$ | $c_n$ | $c_n^{(1)}$ | $c_n$ | $c_n^{(1)}$ | $c_n$ | $c_n^{(1)}$ | $c_n$ | $c_n^{(1)}$ |
| 1 | 4 | 4 | 6 | 6 | 8 | 8 | 10 | 10 | 12 | 12 |
| 2 | 12 | 12 | 30 | 30 | 56 | 56 | 90 | 90 | 132 | 132 |
| 3 | 36 | 32 | 150 | 144 | 392 | 384 | 810 | 800 | 1452 | 1440 |
| 4 | 100 | 64 | 726 | 648 | 2696 | 2560 | 7210 | 7000 | 15852 | 15552 |
| 5 | 284 | | 3534 | 2592 | 18584 | 16384 | 64250 | 60000 | 173172 | 165888 |
| 6 | 780 | | 16926 | | 127160 | 98304 | 570330 | 500000 | 1887492 | 1741824 |
| 7 | 2172 | | 81390 | | 871256 | | 5065530 | 4000000 | 20578452 | 17915904 |
| 8 | 5916 | | 387966 | | 5946200 | | 44906970 | | 224138292 | 179159040 |

Eine Entwicklung bis zur $m$-ten Ordnung in $\frac{1}{2d}$ ist (wie man schon aus (C.6) ersehen kann) für alle Wege bis zur Länge $n=m+1$ exakt. Man kann aber feststellen, daß jede nach endlichen Ordnungen abbrechende Entwicklung nach $\frac{1}{d}$ nur bis zu einer Weglänge $n \sim d$ gültig sein kann.

Abschließend soll noch dargestellt werden, wie die soeben abgeleitete Trivialisierung des genuin unendlichdimensionalen Self-avoiding Walks sich leicht durch Rückgriff auf die Ergebnisse der Lace-Entwicklung in Kapitel 3 ableiten läßt.

Die erzeugende Funktion läßt sich analog zu (3.1) über eine Gittersumme darstellen

$$G^{\times}_{xy} \;=\; \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{x_1,\ldots,x_n}^{\neq} g_{xx_1} \cdot g_{x_1x_2} \cdot \ldots \cdot g_{x_{n-1}x_n} \cdot g_{x_ny}$$

Die im Vergleich zu $G$ unterschiedliche dimensionale Skalierung wird durch die Wahl eines entsprechend skalierten Einschrittpropagators gewährleistet:

$$g_{xy} = \frac{z}{2d}\,\delta_{<x,y>} \quad \text{mit} \quad \delta_{<x,y>} = \begin{cases} 1 \text{ für } \delta(x,y)=1 \\ 0 \text{ sonst} \end{cases} \tag{C.9}$$

Aufgrund dieser stärkeren Skalierung kann man zeigen, daß alle Laces (s. Abbildung 3.1) im Limes $d \to \infty$ verschwinden. Da mit den Laces auch die gesamte Selbstenergie (3.13) verschwindet, folgt aus (3.11) die Äquivalenz von Self-avoiding Walk und Random Walk:

$$\breve{\boldsymbol{G}}^{\times} = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{1}-\boldsymbol{g}} \;\Rightarrow\; \breve{\boldsymbol{G}}^{\times} = \breve{\boldsymbol{C}}^{\times}$$

Das Verschwinden aller Laces läßt sich wie folgt einsehen: Da die für die Berechnungen des Self-avoiding Loops in $d=\infty$ angenommene Skalierungsbedingung (3.5) den hier auftretenden Fall (C.9) einschließt, braucht man nur noch $\Sigma_1$ zu betrachten. Daß dieses verschwindet, kann man anhand von Abzählargumenten analog zu den Betrachtungen in Abschnitt 3.3.1 zeigen. Ebenso einfach läßt sich dies erkennen, wenn man feststellt, daß alle Mittelungen $\langle\ldots\rangle$ gemäß 3.8 im Grenzfall $d=\infty$ aufgrund der Überskalierung verschwinden müssen (vgl. Anhang D). Nach (3.10) und (3.14) gilt daher

$$\Sigma_1 = \langle \boldsymbol{g}\breve{\boldsymbol{G}}^{\times} \rangle = 0$$

Wegen der auch hier gültigen Relation $G^{\times} = \langle \boldsymbol{g}\breve{\boldsymbol{G}}^{\times} \rangle$ (3.14) bedeutet dies, daß die Wahrscheinlichkeit einer Rückkehr des Self-avoiding Walks gleich null ist.

Mit der in $d=\infty$ gültigen Relation (3.20) findet man

$$\boldsymbol{G}^{\times} = \frac{\boldsymbol{g}}{\mathbf{1}-\boldsymbol{g}}$$

und damit wegen $G^\times = \sum_x G^\times_{0x} = G^\times_{k=0}$ noch einmal

$$G^\times(z) = \frac{g_{k=0}}{1-g_{k=0}} = \frac{z}{1-z}$$

Man erkennt aus den obigen Ausführungen, daß die Besonderheit des *geschlossenen* Self-avoidings Loops, die ihn vor dem Self-avoiding Walk auszeichnet und die für sein außergewöhnliches Verhalten in genuin unendlichen Dimensionen verantwortlich ist, letztlich darauf zurückzuführen ist, daß ein Loop der Länge $2n$ nur mit $d^n$ und nicht mit $d^{2n}$ skaliert.

# Anhang D

# Der Elektronenpropagator des Tight-Binding-Bandes in hohen Raumdimensionen

Um elektronische Gittersysteme in hohen Dimensionen untersuchen zu können, ist es unerläßlich, zu klären, wie Systeme unterschiedlicher Dimensionalität $d \in \mathbb{N} \cup \{\infty\}$ miteinander in Beziehung stehen und wie der Grenzübergang $d \to \infty$ durchzuführen ist. Hierzu dienen die in diesem Anhang durchgeführten Berechnungen zum Propagator des *Tight-Binding-Bandes* (vgl. z.B. ASHCROFT und MERMIN (1976) [Kap.10]).

Das umfangreiche Interesse der letzten Jahre an unendlichdimensionalen Systemen geht auf METZNER und VOLLHARDT (1989) zurück, die erstmals aufzeigten, welche mathematischen Vereinfachungen sich in $d = \infty$ ergeben. Dabei gaben sie insbesondere an, wie das Hopping in Abhängigkeit von der Raumdimension skaliert werden muß, um im Grenzübergang $d \to \infty$ eine endliche Banddichte und damit ein nichttriviales Leitungsband zu erhalten. Zur mathematischen Begründung wird gewöhnlich der *zentrale Grenzwertsatz* aus der Stochastik angeführt (s. z.B. SPITZER (1976), S.64), dessen Bedeutung man an dieser Stelle folgendermaßen verstehen kann: Wenn jede Raumdimension mit derselben Dispersion und damit auch derselben Breite, die im wesentlichen durch die Hoppingamplitude $t$ gegeben ist, zur Banddichte beiträgt, so ergibt sich in der Summe von $d$ identischen Einzelbeiträgen im Grenzfall $d \to \infty$ eine Gaußverteilung mit der Breite $t\sqrt{d}$. Diese bleibt endlich, wenn $t$ mit $\frac{1}{\sqrt{d}}$ skaliert wird.

Der zentrale Grenzwertsatz muß aber keineswegs herangezogen werden. Im folgenden wird dargestellt, wie mit elementaren Mitteln das Elektronenband anhand seines Propagators in unendlichen Dimensionen berechnet werden kann. In einem weiteren Abschnitt werden dann in demselben Rahmen Korrekturterme in einer dimensionalen Entwicklung ermittelt. Der resultierende $\mathcal{O}(\frac{1}{d})$-Propagator wird für eine selbstkonsistente, numerische Behandlung des Andersongitters in Abschnitt 5.1.3 benötigt.

## D.1 Darstellungen

Beim einfachsten *Tight-Binding*-Ansatz wird für die Hoppingstärke angenommen

$$t_{xy} = \tilde{t}\delta_{<x,y>} = \begin{cases} \tilde{t} & \text{für nächste Nachbarn} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Für den Grenzübergang $d \to \infty$ wird die Hoppingstärke dabei gemäß $\tilde{t} := \frac{t}{\sqrt{d}}$ skaliert. Der (ungestörte) Elektronpropagator hat im Energie-Impulsbild die denkbar einfache Darstellung[1]:

$$g_k(z) = \frac{1}{z - \epsilon_k} \qquad \text{mit} \qquad \epsilon_k = 2\tilde{t}\sum_{i=1}^{d} \cos(k_i) \tag{D.1}$$

Hieraus wird nun der Propagator im Ortsraum bestimmt. Die verwendeten Konventionen und Bezeichnungen für Ortsraum und reziproken Raum sind den Ausführungen ab Seite 51 zu entnehmen.

$$\begin{aligned} g_{0x}(z) &= \int_{[0,2\pi]^d} \frac{d^dk}{(2\pi)^d} \frac{e^{ikx}}{z - \epsilon_k} \\ &= \int_{[0,2\pi]^d} \frac{d^dk}{(2\pi)^d} (-i) \int_0^\infty ds\; e^{is(z - 2\tilde{t}\sum_i \cos k_i) + \sum_i k_i x_i} \qquad \text{für } \mathfrak{Im}\, z > 0 \\ &= (-i) \int_0^\infty ds\; e^{isz} \prod_{i=1}^{d} \left( \int_0^{2\pi} \frac{dk}{2\pi} e^{i2s\tilde{t}\cos k} e^{ikx_i} \right) \end{aligned}$$

Die Faktoren des Integranden identifiziert man im wesentlichen als Besselfunktionen von ganzzahliger Ordnung $J_n(2s\tilde{t})$ (siehe Abramowitz und Stegun (1972)

[1] Bis auf triviale Umnormierungen ist $g_{xy}$ mit der *Greenfunktion des freien Random Walks* identisch (vgl. Hughes (1995), [3.3]). Diese beschreibt die Übergangsamplitude von $x$ nach $y$ und entsteht aus einer unrestringierten Gittersumme mit den Einzelübergangswahrscheinlichkeiten $t_{xy}$:

$$g_{xy}(z) = z^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} z^{-n} \sum_{x_1,\dots,x_n}^{\neq} t_{xx_1} \cdot t_{x_1x_2} \cdot \dots \cdot t_{x_{n-1}x_n} \cdot t_{x_ny}$$

[9.1.21]). Bezeichnet man nun die Anzahl der Komponenten $x_i$, für die $|x_i| = l$ gilt mit $m_l$, so erhält man die Darstellung $\|x\|_1 = \sum_{l=0}^{\infty} l \cdot m_l$. Die Besselfunktion $J_l$ taucht gerade $m_l$-mal im Produkt auf, daher gilt:

$$\boxed{g_{xy}(z) = (-i) \int_0^\infty ds\, e^{isz} \prod_{l=0}^{\infty} \left( i^l J_l(2s\tilde{t}) \right)^{m_l}} \tag{D.2}$$

Im Spezialfall $x = y$ ergibt sich

$$\boxed{g_{00}(z) = (-i) \int_0^\infty ds\, e^{isz} \left( J_0(\tfrac{2st}{\sqrt{d}}) \right)^d} \tag{D.3}$$

woraus sich die Spektraldichte in jeder Dimension $d$ über $\rho(\omega) = -\frac{1}{\pi} \mathfrak{Im}\, g_{00}(\omega + i\delta)$ zu

$$\rho(\omega) = \int_0^\infty \frac{ds}{\pi} \cos(sx) \left( J_0(\tfrac{2st}{\sqrt{d}}) \right)^d \tag{D.4}$$

berechnen läßt. Das Ergebnis kann man für $d=1$ und $d=2$ noch explizit angeben (vgl. Economou (1983), [5.30, 5.39]), für $d = 3$ läßt sich das Integral numerisch auswerten. Für niedrige Dimensionen erhält man die charakteristischen Van-Hove-Singularitäten, während für höhere $d$ die Spektralfunktion bereits gut durch eine Gaußkurve approximiert wird.

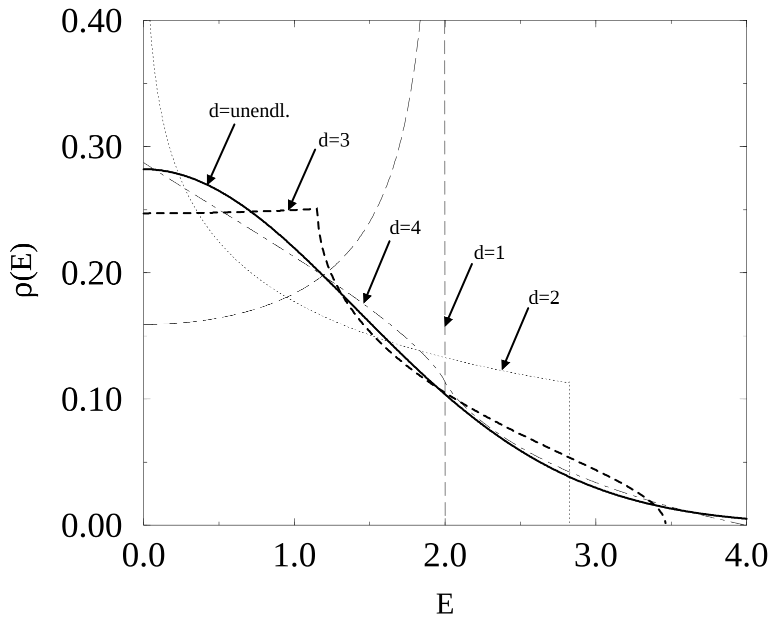



**Abbildung D.1** Zustandsdichten $\rho(E)$ des Tight-binding Bandes, normiert auf $t=1$ für $d=1, 2, 3, 4, \infty$

## D.2 Unendliche Raumdimensionen

Im Grenzfall unendlicher Dimension gilt

$$\Big(J_0(\tfrac{2st}{\sqrt{d}})\Big)^d \longrightarrow e^{-(st)^2} \qquad \text{für } d\to\infty$$

und somit erhält man für $g_{00}^{(0)}$, den lokalen Propagator in $d=\infty$,

$$g_{00}^{(0)}(z) = (-i)\int_0^\infty ds\, e^{isz} e^{-(st)^2} = \frac{1}{2t\sqrt{\pi}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega\, \frac{e^{-(\frac{\omega}{2t})^2}}{z-\omega} = \frac{1}{2t}\frac{\sqrt{\pi}}{i} w(\tfrac{z}{2t}) \tag{D.5}$$

Dabei bezeichnet $w(z)$ die komplexe Errorfunktion (Abramowitz und Stegun (1972) [7.1.4]). Da $g_{00}(z)$ so bereits in Spektraldarstellung vorliegt, liest man sofort die Spektraldichte ab:

$$\rho^{(0)}(\omega) = -\frac{1}{\pi}\mathfrak{Im}\, g_{00}^{(0)}(\omega) = \frac{1}{2t\sqrt{\pi}}\, e^{-\left(\frac{\omega}{2t}\right)^2} \tag{D.6}$$

Abschließend sei noch eine Relation zwischen den Ableitungen der Errorfunktion angegeben, die die Zurückführung höherer Ableitungen $g^{[n]} := \frac{\partial^n}{\partial z^n} g(n)$ des Propagators $g := g_{00}^{(0)}$ auf niedrigere erlaubt. Diese Relationen folgen aus den entsprechenden Gleichungen für die komplexe Errorfunktion (nach Abramowitz und Stegun (1972) [7.1.20]) und ergeben sich durch partielle Integration.

$$\begin{aligned} g'(z) &= -\frac{2}{(2t)^2}(zg(z)-1) \\ g^{[n+1]}(z) &= -\frac{2}{(2t)^2}(zg^{[n]}(z)+ng^{[n-1]}(z)) \end{aligned} \tag{D.7}$$

Wegen $\frac{\partial}{\partial z} g_k(z) = -g_k^2(z)$ überträgt sich dies auch auf

$$\langle g_k^{n+1}\rangle = (-1)^{n+1}(n+1)!\frac{\partial^{n+1}}{\partial z^{n+1}} g(z) = \frac{2}{n}\frac{1}{(2t)^2}(z\langle g_k^n\rangle - \langle g_k^{n-1}\rangle) \tag{D.8}$$

## D.3 Reihenentwicklung in der Raumdimension

Nimmt man den Grenzfall $d=\infty$ als Startpunkt einer Reihenentwicklung in $\frac{1}{d}$, so hat man in (D.3) höhere Glieder des Integranden in der systematischen Potenzreihenentwicklung zu berücksichtigen. Mit der Abkürzung $x := st$ gilt

$$\Big(J_0(\tfrac{2x}{\sqrt{d}})\Big)^d = e^{\,d\ln J_0(2x/\sqrt{d})} = e^{-x^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{d^n}\,p_n(x)$$

Dabei erweisen sich die $p_n(x)$ als Polynome vom Grad $4n$. Für die niedrigsten Ordnungen hat die $\frac{1}{d}$-Reihe die Form

$$1 - \frac{1}{d}\frac{x^4}{4} + \frac{1}{d^2}\left(\frac{-x^6}{9} + \frac{x^8}{32}\right) + \frac{1}{d^3}\left(\frac{-11\,x^8}{192} + \frac{x^{10}}{36} - \frac{x^{12}}{384}\right) + \ldots$$

Setzt man dies für den Integranden in (D.3) ein, so ergeben sich Integrale, die man auf Ableitungen von $g := g_{00}^{(0)}$ umschreibt gemäß

$$(-i)\int_0^\infty e^{isz} e^{(-st)^2} (st)^m = (-it)^m \frac{\partial^m}{\partial z^m} g(z) \tag{D.9}$$

Für die $\mathcal{O}(\frac{1}{d})$-Korrektur zu $g_{00}$ ergibt sich so der Ausdruck

$$\boxed{g_{00} = \left[\sum_{n=0}^{\infty} p_n((-it)\frac{\partial}{\partial z})\right] g_{00}^{(0)} = g_{00}^{(0)} - \frac{t^4}{4d}\frac{\partial^4}{\partial z^4} g_{00}^{(0)} + \mathcal{O}(d^{-2})} \tag{D.10}$$

Einen vollständigen Ausdruck für die $\mathcal{O}(\frac{1}{d})$-Entwicklung des ungestörten Propagators $g$ erhält man, wenn man die Ableitungen von $g_{00}^{(0)}$ im obigen Ausdruck mit Hilfe der Rekursionsformel (D.7) eliminiert. In jeder Ordnung kann man dann die Terme proportional zu $g_{00}^{(0)}$ und die rein polynomialen Terme sammeln und erhält einen Ausdruck der folgenden Form:

$$g_{00}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{d^n} g_{00}^{(n)}(z) \quad \text{mit} \quad g_{00}^{(n)}(z) = r_1^{(n)}(\tfrac{z}{2t}) g_{00}^{(0)}(z) + \tfrac{1}{2t} r_2^{(n)}(\tfrac{z}{2t}) \tag{D.11}$$

Die $r_i^{(n)}(x)$ sind dabei Polynome mit *rationalen* Koeffizienten. Durch Imaginärteilbildung erhält man die entsprechende Gleichung für die Zustandsdichte

$$\rho(\omega) = -\frac{1}{\pi}\mathfrak{Im}\, g(\omega + i\delta)$$

Da die Polynome reell sind, bleibt lediglich

$$\rho(\omega) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{d^n} \rho^{(n)}(\omega) \quad \text{mit} \quad \rho^{(n)}(\omega) = r_1^{(n)}(\tfrac{\omega}{2t}) \rho^{(0)}(\omega) \tag{D.12}$$

Die $r_i^{(n)}(x)$ wurden mittels symbolischer Arithmetik mit dem Programmpaket Mathematica (Wolfram (1992)) ermittelt

```
rho0=Exp[-x^2/4]/(2 Sqrt[Pi])
JD=Exp[-s^2]*
  Normal[Series[Exp[Log[BesselJ[0,2 s D]]/D^2+s^2],{D,0,Ordnung}]]
rhoD=Integrate[JD*Cos[s x],{s,0,Infinity}]/Pi
rho=rho0*(Collect[rhoD/rho0,D] /. D->1/d^(1/2))
```

Die ersten Korrekturpolynome $r_i^{(n)}$ haben die folgende Form:

$$\begin{aligned}
r_1^{(0)}(z) &= 1 \\
r_2^{(0)}(z) &= 0 \\
r_1^{(1)}(z) &= -\frac{3}{16} + \frac{3}{4}z^2 - \frac{1}{4}z^4 \\
r_2^{(1)}(z) &= -\frac{5}{8}z + \frac{1}{4}z^3 \\
r_1^{(2)}(z) &= -\frac{5}{1536} - \frac{25}{64}z^2 + \frac{155}{192}z^4 - \frac{47}{144}z^6 + \frac{1}{32}z^8 \\
r_2^{(2)}(z) &= \frac{133}{768}z - \frac{769}{1152}z^3 + \frac{179}{576}z^5 - \frac{1}{32}z^7
\end{aligned}$$

Abschließend sei noch angemerkt, daß man wegen (D.9) auch das Produkt von Besselfunktionen in der Darstellung des nichtdiagonalen Propagators $g_{xy}$ (D.2) ganz analog zu $g_{00}$ in eine Potenzreihe entwickeln und jeden Summanden durch Ableitungen von $g_{00}^{(0)}$ darstellen kann. In höchster Ordnung ergibt das:

$$g_{xy} = d^{-\frac{\delta}{2}} \left[ \frac{1}{t^\delta} \frac{\partial}{\partial z} g_{00}^{(0)}(z) + \mathcal{O}(d^{-\frac{1}{2}}) \right] \qquad \text{mit } \delta = \delta(x,y) \tag{D.13}$$

Damit ist das Skalierungsverhalten $g_{xy} \sim d^{-\frac{1}{2}\delta(x,y)}$, das für die in Kapitel 5.1 durchgeführte Berechnung der Gittersumme in hohen Dimensionen gefordert wurde, auf analytischem Wege nachgewiesen.

# Anhang E

# Exakte Lösungen der Andersonmodelle für $U=0$

In diesem Anhang wird die *exakte* Lösung des Single-Impurity- und des periodischen Andersonmodells für verschwindende Wechselwirkung $U=0$ (*Anderson-Fano-Modell*) in Form der lokalen Greenfunktionen angegeben. Diese werden für die Diskussion der effektiven Single-Site-Näherung im Grenzfall $U \to 0$ in Abschnitt 5.2 benötigt.

## E.1 Das periodische Anderson-Fano-Modell

Setzt man im periodischen Andersonmodell die Wechselwirkung $U = 0$, so erhält man in $k$-Darstellung den folgenden Hamiltonoperator:

$$H_{\mathrm{PAM,U=0}} = \sum_k \epsilon_k c_k^+ c_k + \epsilon_f \sum_k f_k^+ f_k + V(\sum_k c_k^+ f_k + f_k^+ c_k)$$

Wegen der Translationsinvarianz reduziert sich die Lösung auf das Aufsuchen einer 2-Matrix

$$\begin{pmatrix} c_k \\ f_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_k & \beta_k \\ \gamma_k & \delta_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{c}_k \\ \bar{f}_k \end{pmatrix}$$

mit den neuen Einteilchenoperatoren $\bar{c}_k$ und $\bar{f}_k$, in denen $H$ Diagonalgestalt hat. Die Lösungen erhält man dann aus dem Gleichungssystem[1]

$$\{a_i, a_j\} = 0 \quad , \quad \{a_i^+, a_j\} = \delta_{ij} \quad , \quad [H, a_i] = a_i \qquad \text{mit } \vec{a} = \binom{\bar{c}_k}{\bar{f}_k}$$

[1] [ , ] steht für den Kommutator und { , } für den Antikommutator.

Die neuen Einteilchenenergien $\bar{\epsilon}_k$ und $\bar{\epsilon}_{f,k}$ (die f-Elektronen erhalten einen Dispersion) der hybridisierten Elektronen erhält man dann nach einiger Rechnung als

$$\begin{aligned} \bar{\epsilon}_k &= \epsilon_k + \tfrac{\epsilon_f - \epsilon_k}{2}\left(1 - \sqrt{1 + \tfrac{4V^2}{(\epsilon_f-\epsilon_k)^2}}\right) \\ \bar{\epsilon}_{f,k} &= \epsilon_f + \tfrac{\epsilon_k - \epsilon_f}{2}\left(1 - \sqrt{1 + \tfrac{4V^2}{(\epsilon_k-\epsilon_f)^2}}\right) \end{aligned} \tag{E.1}$$

(Man beachte die vollständige Symmetrie zwischen den $f$ und den $c$-Teilchen.)

Zur Vergleichbarkeit mit der Gitterselbstkonsistenzlösung wird noch die Greenfunktion des Modells benögt. Diese erhält man am einfachsten nach der Methode der Bewegungsgleichungen (z.B. Fetter und Walecka (1971)). Ausgehend von der Matsubara-Greenfunktion[2] $G_{A;B}(\tau) = -\langle T_\tau A(\tau) B\rangle$ bildet man die Matsubara-Transformierte und deren eindeutige analytische Fortsetzung in die obere und untere imaginäre Halbebene $G_{A;B}(z)$. Die Bewegungsgleichung wird dann zu

$$z\, G_{A;B}(z) = \langle \{A, B\}_+ \rangle + G_{[A,H];B}(z)$$

Die Bewegungsgleichungen für die verschiedenen Greenfunktionen $G_{c_k;c_k^+}$, $G_{c_k;f_k^+}$, $G_{f_k;c_k^+}$ und $G_{f_k;f_k^+}$ läßt sich dann auflösen, und man erhält

$$\begin{aligned} G_{c,k} := G_{c_k;c_k^+}(z) &= \frac{1}{z - \epsilon_k - \frac{V^2}{z-\epsilon_f}} \\ G_{f,k} := G_{f_k;f_k^+}(z) &= \frac{1}{z - \epsilon_f - \frac{V^2}{z-\epsilon_k}} \end{aligned} \tag{E.2}$$

Für die lokale Greenfunktion $G_c(z) := \frac{1}{N}\sum_k G_{c,k}(z)$ und das entsprechende $G_f(z)$ ergibt sich schließlich die Lösung

$$\begin{aligned} G_c(z) &= G_c^{(0)}(z - \tfrac{V^2}{z-\epsilon_f}) \\ G_f(z) &= \tfrac{1}{z-\epsilon_f} + \tfrac{V^2}{(z-\epsilon_f)^2} \cdot G_c^{(0)}(z - \tfrac{V^2}{z-\epsilon_f}) \end{aligned} \tag{E.3}$$

mit $G_c^{(0)} = \frac{1}{N}\sum_k \frac{1}{z-\epsilon_k}$ als der ungestörten ($V=0$) lokalen Bandgreenfunktion. Des weiteren gelten die $T$-Matrixgleichungen

$$G_f = G_f^{(0)} + G_f^{(0)} V^2 G_c G_f^{(0)} \qquad \text{und} \qquad G_c = G_c^{(0)} + G_c^{(0)} V^2 G_f G_c^{(0)} \tag{E.4}$$

mit $G_f^{(0)} = \frac{1}{z-\epsilon_f}$. Die Energien des hybridisierten Systems (E.1) findet man in den Polen der Greenfunktion wieder, also z.B. die $\bar{\epsilon}_k$ als Nullstellen von $(z-\epsilon_k)(z-\epsilon_f) - V^2 = 0$.

[2] $A$ und $B$ seien hier Fermioperatoren.

## E.2 Das Single-Impurity Anderson-Fano-Modell

Das Einstörstellensystem bei $U=0$ besitzt den Hamiltonoperator

$$H_{\mathrm{SIAM,U=0}} = \sum_k \epsilon_k c_k^+ c_k + \epsilon_f f^+ f + \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_k (c_k^+ f + f^+ c_k)$$

Der Faktor $\sqrt{N}$ ergibt sich notwendig zwischen dem $f$ in der Ortsdarstellung und den $c_k$ in der Quasiimpulsdarstellung. Der Hamiltonoperator, wie auch die resultierenden Greenfunktionen des Problems, besitzen keine Translationsinvarianz mehr, die lokalen Propagatoren am Platz der Störstelle lassen sich aber dennoch leicht berechnen:

$$\begin{aligned} G_c(z) := \tfrac{1}{N} \textstyle\sum_k G_{c_k;c_k^+}(z) &= \frac{G_c^{(0)}}{1 - V^2 G_c^{(0)} G_f^{(0)}} = \frac{1}{\left(G_c^{(0)}\right)^{-1} - \dfrac{V^2}{z - \epsilon_f}} \\ G_f(z) := G_{f;f^+}(z) &= \frac{G_f^{(0)}}{1 - V^2 G_c^{(0)} G_f^{(0)}} = \frac{1}{z - \epsilon_f - V^2 G_c^{(0)}} \end{aligned} \tag{E.5}$$

Hier gelten wieder dieselben $T$-Matrixgleichungen wie im analogen periodischen Problem.

# Anhang F

# Die Numerik der Gitter-NCA

Die in Abschnitt 2.3.2 abgeleiteten NCA-Gleichungen sind in ihrer dortigen Form noch nicht für die numerische Lösung geeignet. In diesem Anhang soll daher eine Variation der NCA-Gleichungen, die der numerischen Behandlung zugänglich ist, kurz erläutert werden.

Auf der Grundlage dieser Gleichungen wurde ein Programm erstellt, das der numerischen Auswertung der in dieser Arbeit vorgestellten verschiedenen Behandlungen des Andersongitters zugrunde lag. Da es sehr flexibel einsetzbar ist und seiner Struktur nach leicht Erweiterungen zuläßt, kann es auch für Analysen eventueller zukünftiger effektiver Single-Site-Theorien verwendet werden. Daher sollen in einem zweiten Abschnitt die Möglichkeiten des Programms in Grundzügen erläutert werden.

## F.1 Numerik der NCA-Gleichungen

Um die Gleichungen (2.5) und (2.6), die die Non-crossing Approximation konstituieren, in eine numerisch auswertbare Form zu bringen, ist es zunächst angeraten, die komplexe Konturintegration auf Integrale längs der reellen Achse umzuschreiben. Dabei wird an dieser Stelle keine $N$-fache Entartung der Störstelle vorausgesetzt, so daß z.B. auch der Fall einer magnetischen Aufspaltung eingeschlossen ist.

Die benötigten Größen sind

- die Propagatoren $R_0(\omega), R_m(\omega)$ und ihre Selbstenergien $\Sigma_0(\omega), \Sigma_m(\omega)$ ,
- die Spektraldichten der Propagatoren

$$\rho_m(\omega) = -\frac{1}{\pi}\mathfrak{Im}\, R_m(\omega) \quad \text{für } m=0\ldots N$$

- die Spektraldichten der $f$-Greenfunktionen

$$\rho_{fm}(\omega) = -\frac{1}{\pi}\mathfrak{Im}\, G_{fm}(\omega) \quad \text{für } m=1\ldots N$$

Die Variable $\omega$ variiert in allen Gleichungen ausschließlich knapp oberhalb der reellen Achse ($\omega = x+i\delta$). Die $k$-Summe über die Brillouinzone läßt sich zudem als einfache Energieintegration über eine (effektive) Banddichte $\rho(\epsilon)$ ausführen.

Damit ergibt sich das folgende NCA-Integralgleichungssystem ($m = 1\ldots N$):

$$\Sigma_0(\omega) = V^2 \sum_{m=1}^{N} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon\, \rho(\epsilon) f(\epsilon) R_m(\omega-\epsilon) \quad [1]$$

$$R_0(\omega) = \frac{1}{\omega - \Sigma_0(\omega)} \quad [2]$$

$$\Sigma_m(\omega) = V^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon\, \rho(\epsilon)(1-f(\epsilon)) R_m(\omega+\epsilon) \quad [3]$$

$$R_1(\omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_{fm} - \Sigma_m(\omega)} \quad [4]$$

$$\mathcal{Z}_f = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon\, e^{-\beta\epsilon}\Big[\rho_0(\epsilon) + \sum_{m=1}^{N} \rho_m(\epsilon)\Big] \quad [5]$$

$$\rho_{fm}(\epsilon) = \frac{1}{\mathcal{Z}_f}(1+e^{-\beta\omega}) \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon\, e^{-\beta\epsilon} \rho_m(\epsilon+\omega)\rho_0(\epsilon) \quad [6]$$

Die reellen Integrale erhält man (unter gewissen Bedingungen an die Resolventenfunktionen) durch Deformation der Integrationskontur.

In dieser Form läßt sich der Satz von Bestimmungsgleichungen für die $R_m(\omega)$ im Prinzip mittels reeller Integrationsroutinen selbstkonsistent lösen, sofern die besondere singuläre Struktur der beteiligten Propagatoren berücksichtigt wird. Bei der abschließenden Integration zur Bestimmung von $\mathcal{Z}_f$ und $\rho_f$ (4), (5) ergibt sich allerdings eine Schwierigkeit für die numerische Behandlung: Der Exponentialfaktor $e^{-\beta\epsilon}$ divergiert für $\epsilon \to -\infty$, und die Spektraldichten $\rho_m(\omega)$ verschwinden nicht unterhalb der Grundzustandsenergie des Systems, sondern fallen exponentiell ab, was zu numerisch schwierig zu behandelnden Ausläufern des Integranden führt. Diesem Problem kann man begegnen, indem man entweder das exponentielle Flankenverhalten der Spektraldichten mitmodelliert und die Integrale in diesem Bereich getrennt berechnet, oder aber durch Einführung neuer *Hilfsdichten*, die eine günstigere Asymptotik besitzen (Bickers (1987)). Die Hilfsdichten $\bar{\rho}_m$ werden folgendermaßen definiert:

$$\bar{\rho}_m(\epsilon) := \mathcal{Z}^{-1} e^{-\beta\epsilon} \rho_m(\epsilon) \quad \text{für } m = 0 \ldots N$$

Diese zunächst rein formale Umschreibung[1] ist insofern hilfreich, als man die Hilfsdichten auf *numerisch stabile* Weise aus einem weiteren selbstkonsistenten Integralgleichungssystem gewinnen kann, das aus den obigen NCA-Gleichungen ableitbar ist:

$$\bar{\rho}_0(\omega) = V^2 \left|R_0(\omega)\right|^2 \sum_{m=1}^{N} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon\, \rho(\epsilon) f(\omega - \epsilon) \bar{\rho}_m(\epsilon) \qquad [7]$$

$$\bar{\rho}_m(\omega) = V^2 \left|R_m(\omega)\right|^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon\, \rho(\epsilon) f(\omega - \epsilon) \bar{\rho}_0(\epsilon) \qquad [8]$$

Sind die $R_m$ erst über [1]–[4] bestimmt, lassen sich mit diesen *effektiven NCA-Gleichungen* die $\bar{\rho}_m$ gewinnen, aus denen man wiederum die physikalisch relevante $f$-Greenfunktion ohne numerische Konvergenzprobleme mit der folgenden Formel erhält:

$$G_{fm}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \left[\bar{\rho}_0(\epsilon) R_m(\epsilon + \omega) - \bar{\rho}_0(\epsilon) R_m(\epsilon - \omega)\right] \qquad [9]$$

Bei der Lösung der effektiven NCA-Gleichungen ist noch zu beachten, daß diese – im Gegensatz zu den ursprünglichen NCA-Gleichungen – instabil gegenüber einer Umnormierung der $\bar{\rho}_m$ sind. Eine entsprechende exakte Normierungsbedingung für die $\bar{\rho}_m$ liefert die Bestimmungsgleichung für $\mathcal{Z}_f$ (5). Diese führt auf

$$\sum_{m=0\ldots N} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon\, \bar{\rho}_m(\epsilon) = 1 \qquad [10]$$

Mit ihrer Hilfe sollte die Normierung der $\bar{\rho}_i$ nach jedem Iterationsschritt wiederhergestellt werden.

[1] Für eine physikalische Interpretation der $\bar{\rho}_m$ vgl. Bickers (1983) [Abschnitt II.B].

## F.2 Bemerkungen zum NCA-Programm

Für die umfangreichen Rechnungen, die für die verschiedenen Variationen der Gitter-NCA ausgeführt wurden, wurde ein Programmpaket in der Programmiersprache $C^{++}$ entwickelt. In diesem Abschnitt werden die herausstechenden Leistungsmerkmale des Programms kurz beschrieben.

- Der Grundbaustein des Programms ist die numerische Lösung der *NCA-Gleichungen für das Single-Impurity-Andersonmodell.* Hierbei kann eine Wahl getroffen werden zwischen
  - beliebigen Leitungsbändern (Das Kastenband, das Gaußband und seine $\mathcal{O}(\frac{1}{d})$-Korrektur sind bereits implementiert.)
  - entarteten oder nicht-entarteten $f$-Niveaus in beliebiger Anzahl
  - einer Rechnung mit und ohne Magnetfeld.

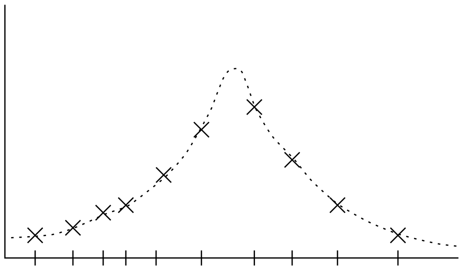
  Für letztere wird das Magnetfeld über einen Zeeman-Term in allen Einteilchenenergien an das System angekoppelt.

- Das Programm erlaubt Berechnungen für verschiedene *effektive Single-Site-Ansätze* für das Andersongitter, wie z.B.
  - Näherungen für hohe Raumdimension: XNCA und XNCA mit $\frac{1}{d}$-Korrekturen XNCA-d
  - nicht-kontrollierte Näherungen: LNCA und XNCA-1
  - weitere Mischformen

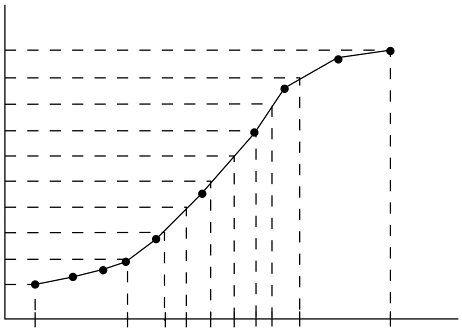
Die besonderen Anforderungen an eine numerische Lösung der Gitter-NCA-Gleichungen bedingen einige programmiertechnische Besonderheiten, von denen hier die wichtigsten genannt werden sollen:

- Bei der Lösung der NCA-Gleichungen entstehen extrem scharf gepeakte Strukturen in den beteiligten Funktionen, die zudem noch im Verlauf der Iteration wandern, so daß ein festes äquidistantes oder logarithmisches Stützstellennetz nicht praktikabel ist. Daher wurde eigens ein adaptives Verfahren entwickelt, das ohne vorherige Kenntnis der entstehenden Strukturen diese immer passend abstützt. Je nach Wahl verschiedener Gewichtungsfaktoren werden dort Stützstellen akkumuliert, wo das spektrale Gewicht einer Funktion oder ihrer

Ableitungen besonders groß ist. Die folgende Skizze illustriert das Funktionsprinzip.



Eine Funktion (⋯) entwickelt an einer bisher schlecht abgestützen Stelle einen Peak und wird so auf einem inadäquaten Stützstellennetz ausgewertet ($\times$).



Die Prozedur `readjustnet` bestimmt nun eine diskrete Summationsfunktion ($\bullet$), die linear interpoliert wird (—). Ein neues Stützstellennetz wird derart bestimmt, daß die Werte der Summationsfunktion äquidistant sind.

Hinzu kommen unterstützende Prozeduren, die Netze verschmelzen, ausdünnen, verfeinern oder glätten. Zur Optimierung kann ein Satz von Parametern gewählt werden, z.B. um starke Veränderungen in der Ableitung, wie sie z.B. die Fermifunktion zeigt, angemessen abzustützen.

- Eine verallgemeinerte Faltungsprozedur `convolute` verknüpft über eine wählbare Funktion $F$ eine beliebige Anzahl von komplexwertigen Funktionen $f_i(x)$ mit jeweils eigenem Stützstellennetz, verschobenem Argument $w_i$ und vorzeichenbehafteter Integrationsvariable $\sigma_i = \pm 1$ und integriert mit einem Trapezverfahren darüber.

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} F(f_1(\sigma_1 x_1 + w_1), \ldots, f_k(\sigma_k x_k + w_k))$$

Außerhalb ihres Abstützungsbereichs werden die Funktionen als null angenommen. Diese Prozedur kann zur Faltung benutzt werden, aber auch z.B. um die integrale Änderung oder Absolutnorm einer Funktion zu bestimmen.

- Die verschiedenen auftretenden NCA-Gleichungen ([1],[3],[7] und [8]) besitzen eine gemeinsame Struktur und lassen sich daher alle mit derselben Integrationsprozedur `integrate_nca` auswerten. Diese allgemeine Struktur lautet:

$$\left.\begin{array}{c}\Sigma_{m_0}(\omega)\\ \bar{\rho}_{m_0}(\omega)|G_{m_0}(\omega)|^{-2}\end{array}\right\} = V^2 \sum_{m=m_1}^{m_2} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon f(\sigma_f \cdot (\epsilon-\omega))\rho_{c,m_c}(\sigma_c \cdot (\epsilon-\omega)) \left\{\begin{array}{c} G_m(\epsilon)\\ \bar{\rho}_m(\epsilon)\end{array}\right.$$

  Für die verschieden NCA-Gleichungen sind dann die folgenden Parameter zu wählen

| Gleichung | $m_0$ | $m_c$ | $m_1 \dots m_2$ | $\sigma_c$ | $\sigma_f$ |
|---|---|---|---|---|---|
| NCA [1] | 0 | $1 \dots N$ | $1 \dots N$ | 1 | 1 |
| NCA [3] | $m$ | $m$ | 0 | $-1$ | 1 |
| effektive NCA [7] | 0 | $1 \dots N$ | $1 \dots N$ | 1 | $-1$ |
| effektive NCA [8] | $m$ | $m$ | 0 | $-1$ | $-1$ |

Abschließend soll die Struktur des Programms durch ein Flußdiagramm, das die wesentlichen Elemente enthält, veranschaulicht werden.

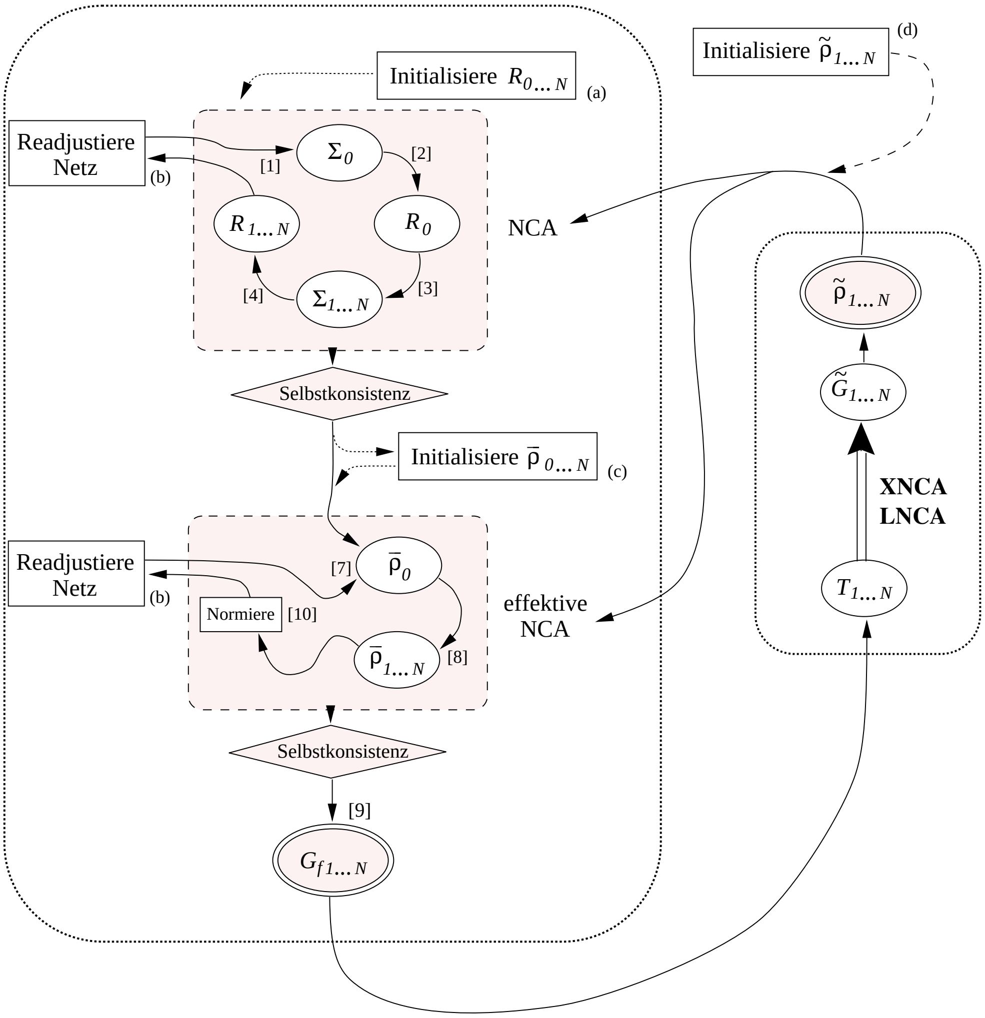



**Abbildung F.1** Struktur des NCA-Programms

(a) Die Propagatoren $R_m$ werden mit einem konstanten negativ-imaginären Wert initialisiert.

(b) Das Prinzip der Netzreadjustierung ist im vorangehenden Text erläutert.

(c) Es hat sich aufgrund der Form der effektiven Dichten $\bar{\rho}_m$ als günstig herausgestellt, diese mit den an der Vertikalen durch das Maximum gespiegelten Dichten $\rho_m$ zu initialisieren (persönliche Mitteilung von F. Stephan).

(d) Zu Beginn wird das Band mit der freien Banddichte initialisiert.

# Bibliographie

[1] M. Abramowitz, I. Stegun (1972). Handbook of Mathematical Functions Dover Publications

[2] A.A. Abrikosow, L.P. Gorkow, I.E. Dschjaloschinsky (1963).Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics. Prentice Hall

[3] F.B. Anders, N.Grewe (1994). Perturbational Approach to the Anderson Model: New Results form a Post-NCA Treatment. *Europhysics Letters* **26**: 551

[4] P.W. Anderson (1961). Localized Magnetic States in Metals. *Physics Reports* **124**: 41

[5] F.B. Anders (1995). Beyond the NCA: New Results for the Spectral Properties of the Anderson Model. *Physica B* **206 & 207**: 177

[6] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin (1976). Solid State Physics. Holt, Rinehart & Winston

[7] M.N. Barber, B.W. Ninham (1970). Random and Restricted Walks. Theory and Applications. Gordon & Breach

[8] H. Behnke, F. Sommer (1965). Theorie der analytischen Funktionen einer komplexen Veränderlichen. Springer

[9] N.E. Bickers (1987). Review of Techniques in the Large-N Expansion for Dilute Magnetic Alloys. *Review of Modern Physics*, **59**: 845

[10] U. Brandt, C. Mielsch (1989) Thermodynamics and Correlation Functions of the Falicov-Kimball Model in Large Dimensions. *Zeitschrift fur Physik – Condensed Matter*, **B 75,3**: 365-370

[11] K. Brout (1960). Statistical Mechanics of Ferromagnetism; (a) High-Density Behavior. *Physical Review* **118**: 1008

[12] K. Brout (1961). Statistical Mechanics of Ferromagnetism; (b) Spherical Model as High-Density Limit. *Physical Review* **122**: 469

[13] D.C. Brydges, T. Spencer (1985). Self-Avoiding Walk in 5 or More Dimensions. *Communications in Mathematical Physics*, **97**: 125-148

[14] J.P. Cotton (1980). Polymer Excluded Volume Exponent $\nu$: An Experimental Verification of the $n$-Vector Model for $n = 0$. *Journal de Physique Lettres*: **41**: L231-L234

[15] G. Czycholl (1977). Transporttheorie für substitutionell ungeordnete elektronische Systeme: Eine allgemeine Clusternäherung und exakte Rechnungen für endliche Kristalle. Dissertation, Universität zu Köln

[16] G. Czycholl (1986). Approximate Treatments of Intermediate Valence and Heavy Fermion Model Systems. *Physics Reports*, **143**: 277-345

[17] P.-G. de Gennes (1972). Exponents for the Excluded Volume Problem as Derived by the Wilson Method. *Physics Letters A* **38**: 339-340

[18] R.B. Dingle (1973). Asymptotic Expansions: Their Derivation and Interpretation. Academic Press

[19] C. Domb (1969). Self-Avoiding Walks on Lattices. in: Stochastic Processes in Chemical Physics, K. Schuler (ed.). *Advances in Chemical Physics* **XV**: 229

[20] E.N. Economou (1983). Green's Functions in Quantum Physics. Springer

[21] A.L. Fetter, J.D. Walecka (1971). Quantum Theory of Many-Particle Systems. McGraw-Hill

[22] M. Fisher, D. Gaunt (1964). Ising Model and Self-Avoiding Walks on Hypercubical Lattices and "High-Density"-Expansions. *Physical Review* **113, 1A**: A224

[23] P.J. Flory (1949). The Configuration of Real Polymer Chains. *Journal of Chemical Physics* **17**: 303-310

[24] P. Fulde (1993). Electron Correlations in Molecules and Solids. Springer

[25] P. Fulde, J. Keller, G. Zwicknagl (1988). Theory of Heavy Fermion Systems. in: *Solid State Physics*. eds. F. Turnbull, H. Ehrenreich. Academic Press, New York

[26] M. Gaudin (1960). Une démonstration simplifiée du théorème de Wick en méchanique statistique. *Nuclear Physics*, **15**: 89-91

[27] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M. J. Rozenberg (1996). Dynamical Mean-Field Theory of Strongly Correlated Fermion Systems and the Limit of Infinite Dimensions. *Reviews of Modern Physics*, **68,1**: 13-25

[28] N. Grewe (1983a). Perturbation Expansion for Systems with Strong Local Correlation. *Zeitschrift für Physik – Condensed Matter* **B 52**: 193

[29] N. Grewe (1983b). Spectral Properties of the Anderson Model. *Zeitschrift für Physik – Condensed Matter* **B 53**: 2711

[30] N. Grewe (1987). A Theory for the Anderson Lattice. *Zeitschrift für Physik – Condensed Matter* **B 67**: 323

[31] N. Grewe, H. Keiter (1981). Diagrammatic Approach to the Intermediate-Valence Compounds. *Physical Review* **B 24,8**: 4421

[32] N. Grewe, T. Pruschke, H. Keiter (1988). Investigation of the Low-Temperature Behaviour of the Anderson-Lattice. *Zeitschrift für Physik – Condensed Matter* **B 71**: 75

[33] N. Grewe, F. Steglich (1991). Heavy Fermions. in: Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths, Elsevier, **14**: 343

[34] A. Gruißem (1995). Erste dimensionale Korrekturen zur XNCA des periodischen Andersonmodells. Diplomarbeit, Universität Dortmund.

[35] A.J. Guttman (1987). On the Critical Behaviour of Self-Avoiding Walks. *Journal of Physics A* **20**: 1839-1854

[36] A.J. Guttman (1989). Asymptotic Analysis of Power-Series Expansions. in: C. Domb, J.L. Lebowitz (eds). Phase Transitions and Critical Phenomena Vol.13. Academic Press

[37] T. Hara, G.Slade (1992). The Lace Expansion for the Self-Avoiding Walk in Five or More Dimensions. *Reviews in Mathematical Physics*, **4**: 235-327

[38] T. Hara, G.Slade (1992a). Self-Avoiding Walk in Five or More Dimensions I. The Critical Behaviour. *Communications in Mathematical Physics*, **147**: 101-136

[39] T. Hara, G. Slade (1993). The Self-Avoiding Walk and Percolation Critical Points in High Dimensions. *Combinatorics, Probability and Computing* **4,3**: 197-215

[40] T. Hara, G. Slade (1994). Mean-Field Behaviour and the Lace Expansion. in: Probability an Phase Transition, G. Grimmet (ed.) *Nato ASI Series*, Kluwer, **C 420**: 87, Academic Publishers

[41] A.C. Hewson (1993). The Kondo Problem to Heavy Fermions. Cambridge University Press

[42] J. Hubbard (1964). Electron Correlations in Narrow Energy Bands. *Proceedings of the Royal Society London* **A 277**: 237

[43] G. Hülsenbeck (1994). Störungstheoretische Methoden zur Behandlung korrelierter Elektronensysteme im Limes hoher Raumdimensionen. Dissertation, Universität Dortmund

[44] G. Hülsenbeck, Q. Qin (1994). Anderson Model: Lattice Effects in High Dimensions. *Solid State Communications* **90**: 195-199

[45] B.D. Hughes (1995). Random Walks and Random Environments. Vol.1: Random walks. Clarendon Press

[46] H. Keiter, S. Kilić (1998). Unusual Perturbation Methods for Strongly Correlated Electron Systems. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **177-181**: 323-324

[47] H. Keiter, J.C. Kimball (1971). Diagrammatic Perturbation Technique for the Anderson Hamiltonian and Relation to the s-d-Exchange Hamiltonian. *International Journal of Magnetism* **1**: 233

[48] H. Keiter, G. Morandi (1984). Thermodynamic Perturbation Theory for Systems with Strong Local Correlations. *Physics Reports* **109,5**: 227

[49] H. Keiter, T. Leuders, Ch. Melsheimer, P. Schönenberg (1995). Comparison of various approaches to the Anderson lattice. *Physica B* **206 & 207**: 168

[50] H. Keiter, T. Leuders, P. Schönenberg (1995). New Approaches to the Anderson Lattice System. *Journal of low temperature physics* **99**: 607-609

[51] H. Keiter, U. Kleineidam, T. Leuders (1997). Magnetotransport for the Anderson impurity and lattice. *Physica B* **230-232**: 431-433

[52] C. Kim, Y. Kuramoto, T. Kasuya (1987a). Cooperative Enhancement of the Kondo Effect in Heavy-Fermion Systems. *Solid State Communications* **62**: 627

[53] C. Kim, Y. Kuramoto, T. Kasuya (1987b). *Japanese Journal of applied physics*, Suppl. **26-3**: 459

[54] C. Kim, Y. Kuramoto, T. Kasuya (1990). Self-Consistent Dynamical Theory for the Anderson Lattice. *Journal of the Physical Society of Japan* **59**: 2414

[55] H. Kojima, Y. Kuramoto (1984). Self-consistent Perturbation Theory for Dynamics of Valence Fluctuations, III. Zero-Temperature Limit. *Zeitschrift für Physik – Condensed Matter* **B 57**: 95

[56] H. Kojima, Y. Kuramoto, M. Tachiki (1984). Self-consistent Perturbation Theory for Dynamics of Valence Fluctuations. *Zeitschrift für Physik – Condensed Matter* **B 54**: 293

[57] R. Kubo (1962). Generalized Cumulant Expansion Method. *Journal of the Physical Society of Japan* **17,7**: 1100

[58] Y. Kuramoto (1983). Self-consistent Perturbation Theory for Dynamics of Valence Fluctuations, I. Single-Site Theory. *Zeitschrift für Physik – Condensed Matter* **B 53**: 37

[59] Y. Kuramoto (1985). Self-consistent Perturbation Theory for Valence-fluctuating Lattice Systems. in: Theory of Heavy Fermions and Valence Fluctuations, Proceedings of the $8^{\mathrm{th}}$ Taniguchi Symposium 1985, eds.: T. Kasuya, T. Saso. S.152

[60] P.A. Lee, T.M. Rice, J.W. Serene, L.J. Sham, J. W. Wilkins (1986). Theories of Heavy-Electron Systems. *Condensed Matter Physics* **12,3**: 99

[61] T. Leuders (1994). Das Andersongitter in unendlichen Raumdimensionen. Diplomarbeit, Universität Dortmund

[62] N. Madras, G. Slade (1993). The Self-Avoiding Walk. Birkhäuser

[63] C. Melsheimer (1994). Die XNCA im Limes unendlicher Raumdimension. Diplomarbeit, Universität Dortmund

[64] W. Metzner (1991). Linked-Cluster Expansion Around the Atomic Limit of the Hubbard model. *Physical Review* **B 43,7**: 8549

[65] W. Metzner, D. Vollhardt (1989). Correlated Lattice Fermions in $d=\infty$ Dimensions. *Physical Review Letters* **62,3**: 324

[66] C. Mielsch (1990). Exakte Ergebnisse zum Falicov-Kimball-Modell in hohen Dimensionen. Dissertation, Universität Dortmund.

[67] E. Müller-Hartmann (1989). Fermions on a Lattice in High Dimensions. *Zeitschrift für Physik – Condensed Matter* **B 74**: 507

[68] J.W. Negele, H. Orland (1988). Quantum Many-Particle Systems. Addison-Wesley

[69] B. Nienhuis (1982). Exact Critical Point and Critical Exponents of $O(n)$ Models in Two Dimensions. *Physical Review Letters*: **49**: 1062-1065

[70] W. Nolting (1992). Vielteilchentheorie. Zimmermann-Neufang

[71] P. Nozières, D. Pines (1966). Theory of Quantum Liquids. W.A.Benjamin

[72] P. Révész (1990). Random Walk in Random and Non-Random Environment. World Scientific

[73] P. Schönenberg (1989). Einfluß von Gittereffekten auf die Zustandsdichte lokalisierter Elektronen in einer metallischen Legierung. Diplomarbeit, Universität Dortmund

[74] P. Schönenberg, H. Keiter (1991). Calculations of Transport Properties of the Anderson Lattice. *Europhysics Letters* **17 (7)**: 613

[75] G. Slade (1987). The Diffusion of Self-Avoiding Random Walk in High Dimensions. *Communications in Mathematical Physics* **110**: 661

[76] G. Slade (1994). Self-Avoiding Walks. *The Mathematical Intelligencer*. **16**: 29-35

[77] F. Spitzer (1976). Principles of Random Walk. Springer

[78] D. Stark, N.C. Wormald (1997). Asymptotic Enumeration of Convex Polygons. *Journal of Combinatorial Theory* **A80**: 196-217

[79] H.S. Wilf (1990). generatingfunctionology. Academic Press

[80] S. Wolfram (1992) MATHEMATICA. Addison-Wesley

[81] D. Zeilberger (1997). The Abstract Lace Expansion. *Advances in Applied Mathematics* **19**: 355-359

An dieser Stelle möchte ich mich herzlich bei all jenen bedanken, die zum Zustandekommen dieser Arbeit beigetragen haben.
Vor allem gilt mein Dank Herrn Professor Dr. Keiter, der immer ein offenes Ohr für meine Ideen hatte und der es mir ermöglichte, trotz meiner zwischenzeitlichen Lehrerausbildung, kontinuierlich an den Fragestellungen meiner Dissertation zu arbeiten.
Weiterhin bedanke ich mich bei allen Angehörigen des Lehrstuhls T1 für ihre unausgesetzte Diskussionsfreude, die sich nicht allein auf die direkt mit meiner Arbeit verbundenen Probleme erstreckte. Der freundlichen und anregenden Atmosphäre am Lehrstuhl verdanke ich ein Gutteil meiner Motivation. In der Benutzung der Computer habe ich immer Unterstützung bei Dr. Frank Stephan und bei Magnus Rosenberg gefunden. Für die ständige Bereitschaft zur Diskussion meiner spontanen Ideen möchte ich Dirk Otto danken. Er und meine Frau Juliane haben mich zudem dabei unterstützt, die Dissertation in einer verständlichen Form abzufassen.
Nicht zuletzt gilt mein Dank meinen Eltern, die mir in meinen Werdegang immer unterstützt haben.