Eine Erweiterung der Coherent Potential Approximation mittels der Lace-Entwicklung

Dissertation

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

vorgelegt von
Robert Nöker

März 2006

Tag der mündlichen Prüfung:	24. März 2006
Vorsitzender und Dekan:	Prof. Dr. M. Tolan
1. Gutachter:	Prof. Dr. H. Keiter
2. Gutachter:	Prof. Dr. W. Weber
Vertreter der promovierten wissenschaftlichen Mitarbeiter:	Dr. B. Siegmann

*„Unser Leben gleicht der Reise
eines Wandrers in der Nacht."*

Aus dem Beresinalied

Für Anna-Maria

Inhaltsverzeichnis

Vorwort

Eine Vielzahl realer Festkörper zeichnet sich durch einen gewissen Grad von Unordnung aus. Zur Lösung von Problemen, die sich für geordnete Systeme exakt lösen lassen, ist man hier auf Näherungen angewiesen.
Seit ihrer Entdeckung Ende der sechziger Jahre hat sich die Coherent Potential Approximation als sehr erfolgreiche Methode zur Behandlung ungeordneter Systeme etabliert. Im Prinzip stellt die CPA eine approximative Behandlung des Streuproblems dar. Die verschiedenen Gruppen, die die CPA ungefähr gleichzeitig um 1968 fanden (Soven [Sov67], Taylor [Tay67] sowie Onodera und Toyozawa [OT68]), benutzten ein seit Anfang der 50er Jahre bekanntes Prinzip aus der Streutheorie [Lax51], um die Greenfunktionen verschiedener ungeordneter Systeme zu untersuchen.
Die sogenannte Lace-Entwicklung, ein vergleichsweise neues mathematisches Verfahren das von Brydges und Spencer gefunden wurde [BS85],ermöglicht eine approximative Beschreibung des Self-Avoiding Walk, also eines Weges ohne Selbstüberschneidung. Auf den ersten Blick scheint dieses Verfahren nicht bei der Untersuchung des Streuproblems anwendbar zu sein, welches im Grunde eine Analogie zum Random Walk darstellt.
Dennoch eröffnet die Lace-Entwicklung bei genauerer Betrachtung eine neue Möglichkeit zur Analyse des Streuproblems. Die in dieser Arbeit vorgestellte (modifizierte) Lace-Entwicklung der Streubeiträge hat die wichtige Eigenschaft, daß sie (bei Berücksichtigung beliebig hoher Ordnung) sämtliche Terme beinhaltet. Der Entwicklungsparameter ist hierbei $D^{-\frac{1}{2}}$, also die Wurzel aus der inversen Raumdimension, somit ist also eine Verbesserung durch Berücksichtigung endlich vieler Ordnungen in *niedrigdimensionalen* Systemen keineswegs garantiert. Hoffnung gibt in diesem Zusammenhang die Tatsache, daß eben die CPA, die in unendlichen Dimensionen exakt ist, dreidimensionale Systeme recht gut approximiert.
Der inhaltliche Aufbau der Arbeit ist wie folgt:

In Kapitel 1 wird das den Betrachtungen dieser Arbeit zugrunde liegende Modell sowie die fundamentalen Größen der Streutheorie der Greenfunktionen dargelegt. Des Weiteren wird das Konzept der Konfigurationsmittlung erläutert, hierbei insbesondere die Probleme, die bei der praktischen Umsetzung desselben auftreten.

Kapitel 2 behandelt die Coherent Potential Approximation, wobei diese in den Zusammenhang der Single-Site-Näherungen gestellt wird, deren beste sie darstellt. Die klassische Herleitung der CPA nach Soven wird einer diagrammatischen Herleitung gegenübergestellt, wobei letztere die Verbindung zum Problem des Self-Avoiding-Walk, der im folgenden Kapitel behandelt wird, deutlich macht. Außerdem werden wichtige Eigenschaften der CPA erläutert und numerische Vorhersagen der CPA mit exakten Berechnungen verglichen.

In Kapitel 3 wird das Problem des Self-Avoiding-Walk vorgestellt sowie das Verfahren der Lace-Entwicklung. In diesem Zusammenhang wird die allgemeine Struktur der Laces erläutert und begründet. Besonderes Augenmerk liegt im Weiteren auf dem dimensionalen Verhalten der Laces, das für die Erweiterung der in $D = \infty$ exakten CPA von Bedeutung ist.

In Kapitel 4, das gewissermaßen den Kern der vorliegenden Arbeit darstellt, wird das Verfahren der Lace-Abbildung vom SAW abstrahiert und auf die Diagramme des Streuproblems angewandt. Hierbei zeigt sich, daß sich die Topologie der auftretenden Diagramme nicht von denen beim SAW unterscheidet. Eine alternative Herleitung der CPA auf der Basis der Lace-Entwicklung wird vorgestellt, sowie CPA-Erweiterungen, die im Sinne einer von $D = \infty$ ausgehenden dimensionalen Entwicklung auf der Grundlage der Laces konsequent sind. Hierbei werden einige Vorteile dieser Erweiterung, die auf analytischer Ebene erkennbar sind, aufgezeigt.

Kapitel 5 widmet sich den numerischen Ergebnissen, die im Rahmen dieser Arbeit an einem dreidimensionalen System gewonnen werden konnten. Hierbei werden Vorhersagen der CPA-Erweiterungen mit denen der CPA sowie mit exakten Ergebnissen verglichen. Es schließt sich eine kurze Bewertung an.

Den Abschluß der Arbeit bilden in Kapitel 6 eine Zusammenfassung der gewonnenen Erkenntnisse sowie Vorschläge für ein mögliches weiteres Vorgehen in der Zukunft.

Kapitel 1

Einleitung

Die Behandlung vieler festkörpertheoretischer Probleme wird durch die Periodizität des Systems erleichtert. Hier lassen sich auf der Basis des Blochtheorems Gitterprobleme im Wesentlichen auf Probleme innerhalb der Elementarzelle abbilden. Im Bereich der ungeordneten Systeme fehlt diese Periodizität. Man kann hierbei verschiedene Typen von Unordnung unterscheiden. Weisen die Gitterplätze eines Kristalls eine nichtperiodische Struktur auf oder ist das System gar völlig amorph, so spricht man von *struktureller Unordnung*. Sofern noch eine feste Koordinationszahl existiert, spricht man mitunter auch von *topologischer Unordnung*. Bilden die Gitterplätze ein periodisches Gitter, bei dem aber die einzelnen Elementarzellen unterschiedlich sind, liegt *Substitutionsunordnung* vor. Die beiden Typen von Unordnung können natürlich auch gemeinsam auftreten.

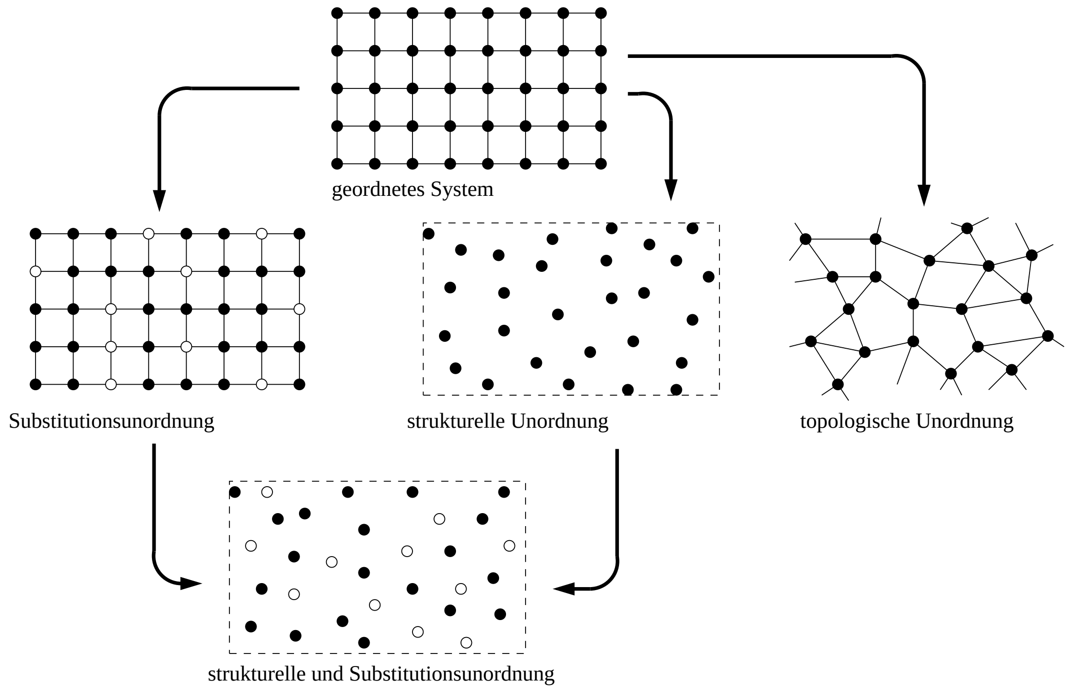


Abbildung 1.1 Typen von Unordnung

1.1 Diagonale Substitutionsunordnung

Im der vorliegenden Arbeit werden Systeme mit Substitutionsunordnung untersucht. Das zugrundeliegende Modellsystem ist ein Elektron in einem ungeordneten Kristall. Das Kristallgitter ist also ein Bravaisgitter (genauer: ein einfach kubisches Gitter), die Atomsorte an einem bestimmten Gitterplatz und damit das vom Elektron verspürte On-Site-Potential (und im Allgemeinen auch die Transferelemente zwischen Gitterplätzen) ist *zufällig variabel*. Die Dynamik des Elektrons lässt sich unter Vernachlässigung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung durch folgenden Modell-Hamiltonoperator beschreiben:

$$\hat{H} = \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} t_{ij} \hat{a}_i^+ \hat{a}_j + \sum_i V_i \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \tag{1.1}$$

An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, daß sich äquivalente Operatoren für Frenkel-Exzitonen, Phononen und Magnonen aufstellen lassen (siehe [Yon82]). Auf diese Systeme soll hier nicht weiter eingegangen werden, die Ergebnisse für das elektronische System lassen sich allerdings übertragen. Es soll nun im Folgenden noch die Einschränkung gemacht werden, daß das Hoppingelement t_{ij} die volle Translationsinvarianz des Gitters besitzt. Dies ist näherungsweise erfüllt, wenn sich die Bandstrukturen der beteiligten Komponenten nur wenig unterscheiden. In diesem Fall ist in Wannierdarstellung nur der Diagonalteil des Hamiltonoperators ungeordnet, man spricht daher von **diagonaler Substitutionsunordnung**.

1.2 Grundlagen der Streutheorie

Zur Bestimmung der Zustandsdichte eines durch (1.1) beschriebenen Systems hat sich der *Greensche Formalismus* als sehr erfolgreich erwiesen. Die Dynamik des Elektrons lässt sich mittels der **retardierten Ein-Elektron-Greenfunktion** beschreiben. Diese ist definiert als

$$G^{(ret)}_{\hat{a}_i \hat{a}_j^+}(t) = -i\Theta(t) \,\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}[\hat{a}_i(t), \hat{a}_j^+(0)]_+\right); \quad \hat{\rho} = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{\mathrm{Tr}\, e^{-\beta \hat{H}}} \tag{1.2}$$

Ihre Laplacetransformierte

$$G_{\hat{a}_i \hat{a}_j^+}(z) = \int_0^\infty dt\; e^{izt} G_{\hat{a}_i \hat{a}_j^+}(t) \tag{1.3}$$

gehorcht folgender Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned} zG_{\hat{a}_i\hat{a}_j^+}(z) &= \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}[\hat{a}_i,\hat{a}_j^+]_+\right) + G_{[\hat{a}_i,\hat{H}]_-\hat{a}_j^+}(z) \\ &= \delta_{ij} + V_i G_{\hat{a}_i\hat{a}_j^+}(z) + \sum_{l\neq i} t_{il} G_{\hat{a}_l\hat{a}_j^+}(z) \end{aligned} \tag{1.4}$$

Die Funktion $G(z)$, der sog. **Propagator** in (komplexer) Energiedarstellung, hat aufgrund der Tatsache, daß sie durch Laplacetransformation aus einer *kausalen* Funktion ($G(t) = 0$ für $t < 0$) hervorgeht, die Eigenschaft, daß sie in der oberen komplexen Halbebene ($\mathfrak{Im}\,(z) > 0$) analytisch ist, d.h. es treten insbesondere keine Verzweigungspunkte auf. Ein Auftreten solcher Nichtanalytizitäten bedeutet mithin eine unphysikalische **Verletzung des Kausalitätsprinzips**.
In Matrixschreibweise hat (1.4) die folgende, einfache Form

$$z\hat{G} = 1 + \hat{H}\hat{G}(z) \tag{1.5}$$

Die Lösung von (1.5) ist formal durch die sogenannte *Resolvente* gegeben:

$$\hat{R}(z) = (z - \hat{H})^{-1} \tag{1.6}$$

Aus der Resolvente lässt sich die Zustandsdichte $\rho(E)$ direkt berechnen. Es gilt, wie man funktionentheoretisch nachprüfen kann:

$$\rho(E) = \mathrm{Tr}(\delta(E - \hat{H})) = -\frac{1}{\pi}\,\mathfrak{Im}\,\left(\mathrm{Tr}\,\hat{R}(E + i\epsilon)\right); \quad \epsilon \downarrow 0 \tag{1.7}$$

Ist der Hamiltonoperator translationsinvariant, so kann die Resolvente in der Basis der Blochzustände $\{|\vec{k}\rangle\}$ exakt berechnet werden :

$$R(z,\vec{k}) = \frac{1}{z - \epsilon(\vec{k})} \tag{1.8}$$

mit

$$\epsilon(\vec{k}) = \langle\vec{k}|\hat{H}|\vec{k}\rangle \tag{1.9}$$

Für ein System mit diagonaler Substitutionsunordnung, wo V_i eine zufällige Funktion des Gitterplatzes ist, kann die Resolvente nicht exakt bestimmt werden. Dies liegt zum einen an der Zufälligkeit der Konfiguration, zum anderen an der praktischen Unmöglichkeit, die Resolvente für ein System ohne langreichweitige Ordnung zu bestimmen. Prinzipiell kann man dies mittels der Streutheorie der Greenfunktionen. Die zentralen Gleichungen sind hier die **Dyson-Gleichung**

$$\boldsymbol{G}(z) = \boldsymbol{g}(z) + \boldsymbol{g}(z)\boldsymbol{\Sigma}(z)\boldsymbol{G}(z) \tag{1.10}$$

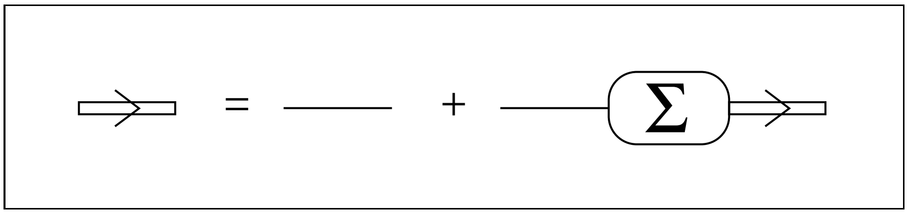


Abbildung 1.2 Diagrammatische Darstellung der Dyson-Gleichung

und die **T-Matrix-Gleichung**

$$\boldsymbol{G}(z) = \boldsymbol{g}(z) + \boldsymbol{g}(z)\boldsymbol{T}(z)\boldsymbol{g}(z) \tag{1.11}$$

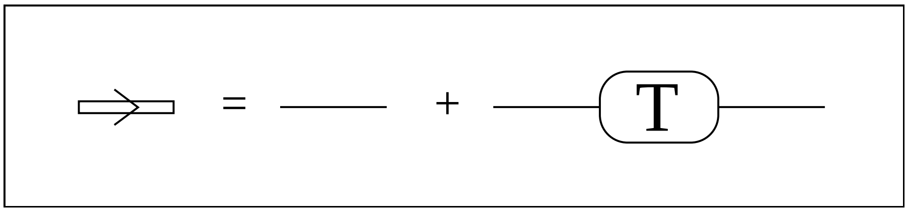


Abbildung 1.3 Diagrammatische Darstellung der T-Matrix-Gleichung

Aus (1.10) folgt unmittelbar:

$$\boldsymbol{G}(z) = \boldsymbol{g}(z) + \boldsymbol{g}(z)\boldsymbol{\Sigma}(z)\boldsymbol{g}(z) + \boldsymbol{g}(z)\boldsymbol{\Sigma}(z)\boldsymbol{g}(z)\boldsymbol{\Sigma}(z)\boldsymbol{g}(z) + \cdots \tag{1.12}$$

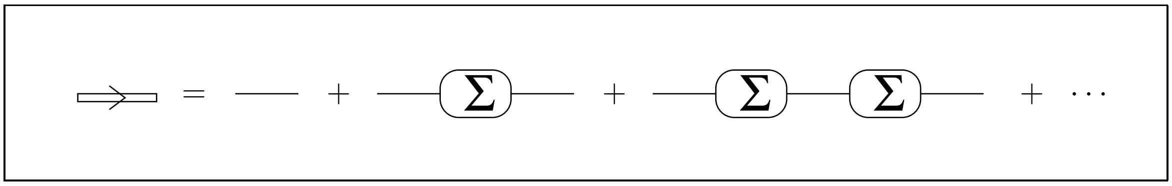


Abbildung 1.4

Hierbei ist g der sogenannte **freie Propagator**. Dies ist die Greenfunktion, die dem translationsinvarianten Anteil des Hamiltonoperators zugeordnet ist, wobei dieser Anteil unterschiedlich gewählt werden kann.

$$g(z) = \frac{1}{z - \hat{H}_0}, \quad \hat{H}_0 = \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} t(\vec{R}_i - \vec{R}_j)\hat{a}_i^+ \hat{a}_j + \sum_i V \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \tag{1.13}$$

Die Größe Σ wird als **Selbstenergie** bezeichnet. Sie ist zunächst eine "künstliche" Größe, die über die Dyson-Gleichung definiert ist. Ihr Vorteil liegt darin, daß sie unter Umständen (z.B. für konfigurationsgemittelte Systeme, die im nächsten Abschnitt besprochen werden) diagonal in der Basis der $|\vec{k}\rangle$ ist, womit dann (1.12) insgesamt diagonal in k-Darstellung ist und die Greenfunktion sich schreiben lässt als

$$G_k(z) = \frac{1}{z - \epsilon_k - \Sigma_k(z)} \quad \text{also} \quad G_k(z) = g_k(z - \Sigma_k(z)) \tag{1.14}$$

Dies vereinfacht sich für die sogenannten Single-Site-Näherungen, die in Abschnitt 2.1 besprochen werden, noch weiter, da dort die Selbstenergie gar konstant in k-Darstellung ist:

$$G_k(z) = \frac{1}{z - \epsilon_k - \Sigma(z)} \quad \text{also} \quad \boldsymbol{G}(z) = \boldsymbol{g}(z - \Sigma(z)) \tag{1.15}$$

Die Größe T wird als **T-Matrix** bezeichnet. Sie stellt die Resummation *aller* denkbaren Streuprozesse dar. Zwischen ihr und der Selbstenergie besteht folgender Zusammenhang:

$$\boldsymbol{T}(z) = \boldsymbol{\Sigma}(z) + \boldsymbol{\Sigma}(z)\boldsymbol{g}(z)\boldsymbol{\Sigma}(z) + \boldsymbol{\Sigma}(z)\boldsymbol{g}(z)\boldsymbol{\Sigma}(z)\boldsymbol{g}(z)\boldsymbol{\Sigma}(z) + \cdots \tag{1.16}$$

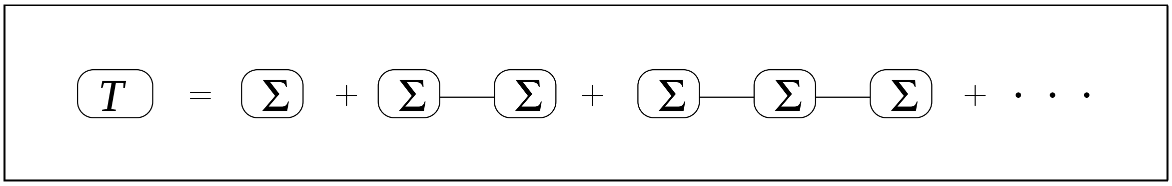


Abbildung 1.5

1.3 Die Konfigurationsmittlung

In einem makroskopischen System, in dem die mikroskopische Konfiguration unbekannt ist, ergäbe sich für jede Konfiguration eine andere Lösung dieser Gleichungen. Numerische Simulationen zeigen jedoch, daß sich bereits für relativ kleine Systeme ($\sim 10^3$ Gitterplätze) die Greenfunktionen verschiedener Konfigurationen nur noch geringfügig unterscheiden. Luttinger und Kohn haben gezeigt, daß die Unterschiede im makroskopischen Limes verschwinden [KL57]. Diese Aussage ist allerdings so zu verstehen, daß es sehr wohl gewisse Konfigurationen gibt, deren Greenfunktionen sich von denen der meisten anderen stark unterscheiden (insbesondere gilt dies für diejenigen, bei denen langreichweitige Ordnung existiert!), daß der Anteil dieser Konfigurationen für große Systeme jedoch beliebig klein wird. Man kann daher die tatsächliche Konfiguration außer Acht lassen und ein *konfigurationsgemitteltes* System betrachten. Dieses System hat nun auch wiederum die volle Translationsinvarianz des geordneten Kristalls, und die relevanten Größen sind daher diagonal im k-Raum. Das Konfigurationsmittel bezeichnet hierbei das Mittel über alle makroskopisch ununterscheidbaren Konfigurationen. Dies sind im im vorliegenden Fall alle Konfigurationen, in denen die Komponenten in bestimmten Konzentrationen auftreten. Man definiert als Konfigurationsmittlung für eine Funktion des Potentials an einem Gitterplatz:

$$\overline{F} = \sum_{\alpha=1}^{K} c_\alpha F(V_\alpha) \tag{1.17}$$

Hierin bedeuten die c_α die Konzentrationen der K auftretenden Komponenten. In der Regel beschränkt man sich auf $K = 2$, im Prinzip kann man aber auch ternäre Verbindungen usw. behandeln.
Die konfigurationsgemittelte Greenfunktion ist eine Funktion der Potentiale an sämtlichen Gitterplätzen und lässt sich in guter Näherung schreiben als:

$$\overline{G} = \sum_{\{\alpha_k\}=1}^{K} \left(\prod_k c_{\alpha_k} \right) G(\{V_{\alpha_k}\}) \tag{1.18}$$

wobei nun k über alle Gitterplätze läuft. Daß dies nur eine Näherung darstellt, wird einsichtig, wenn man sich vor Augen führt, daß hier z.B. auch der reine Kristall als mögliche Konfiguration vorkommt. Diese ist allerdings mit einer Wahrscheinlichkeit von $c_i^{10^{23}}$ gewichtet, kommt also praktisch nicht vor. Man vernachlässigt bei obiger Näherung die Tatsache, daß die Existenz eines Atoms der Sorte A an einem Gitterplatz die Wahrscheinlichkeit für Sorte A an den verbleibenden Gitterplätzen herabsetzt. Dieser Effekt ist jedoch bei makroskopischen Systemen absolut zu vernachlässigen. Da im vorliegenden Modell keinerlei langreichweitige Ordnung existieren soll, sind die Besetzungen zweier Gitterplätze abgesehen von oben erwähntem, vernachlässigbarem Effekt, völlig unkorreliert.
Für die explizite Berechnung der Konfigurationsmittlung entwickelt man G in eine Reihe:

$$\boldsymbol{G} = \boldsymbol{g} + \boldsymbol{gVg} + \boldsymbol{gVgVg} + \boldsymbol{gVgVgVg} + \cdots \tag{1.19}$$

Hierbei wurde - wie auch im Folgenden - das Argument z weggelassen, um die Gleichungen überschaubarer zu gestalten.
In Indexschreibweise lautet die Gleichung

$$G_{if} = g_{if} + g_{ij}V_j g_{jf} + g_{ij}V_j g_{jk}V_k g_{kf} + g_{ij}V_j g_{jk}V_k g_{kl}V_l g_{lf} + \cdots \tag{1.20}$$

Führt man nun die Konfigurationsmittlung durch, so sind die freien Propagatoren davon nicht betroffen, da sie translationsinvariant sind. Die ersten beiden Terme sind unproblematisch, beim dritten muß jedoch bereits unterschieden werden. Sein Konfigurationsmittel lautet:

$$\overline{g_{ij}V_j g_{jk}V_k g_{kf}} = g_{ij}V_j g_{jk}V_k g_{kf} \otimes \begin{cases} \sum\limits_{\alpha_j,\alpha_k} c_{\alpha_j}c_{\alpha_k} & ; \quad j \neq k \\ \sum\limits_{\alpha_j} c_{\alpha_j} & ; \quad j = k \end{cases}$$

Die unterschiedlichen Mittelwerte tragen der einfachen Tatsache Rechnung, daß sich zwischen zwei Streuprozessen die Konfiguration nicht ändert. Hieraus wird bereits eine Tatsache klar, die für die Behandlung des Streuproblems von herausragender Bedeutung ist: Nämlich daß **zwei Streuprozesse niemals unkorreliert sind**.
Entweder
finden sie am gleichen Gitterplatz statt, so daß die zwischen ihnen liegende Propagation einen Rückkehrprozess beschreibt und beide gemeinsam gemittelt werden müssen,
oder

sie finden an verschiedenen Plätzen statt, dann muß explizit ein Rückkehrprozess ausgeschlossen werden.
Mit dieser Erkenntnis sieht man leicht ein, welches Problem sich bei der Bestimmung der Selbstenergie ergibt. Die Struktur der Dyson-Gleichung bedingt, daß Streuprozesse im vollen Propagator einerseits und in der Selbstenergie andererseits formal unkorreliert sind. Da sie aber physikalisch gesehen stets korreliert sind, muß jede physikalisch sinnvolle Selbstenergie Korrekturen beinhalten. Jede Ordnung in V bedingt Korrekturen in höheren Ordnungen, die Korrekturen bedingen wiederum zusätzliche Korrekturen usw. Dies Problem scheint auf den ersten Blick nahezu unlösbar (was es in Exaktheit auch ist), es gibt aber methodische Zugänge, die kontrollierte Näherungen gestatten. Das Auffinden eines neuen derartigen Zugangs ist nicht zuletzt das Anliegen der vorliegenden Arbeit. Er soll in den folgenden Kapiteln erarbeitet werden. Zunächst werden jedoch einige der bislang existierenden Näherungen, insbesondere die CPA, vorgestellt.

Kapitel 2

Die Coherent Potential Approximation

Die sogenannte Coherent Potential Approximation wurde in den sechziger Jahren unabhängig voneinander von mehreren Gruppen gefunden. Zu nennen sind hier sicherlich SOVEN [Sov67], TAYLOR [Tay67] sowie ONODERA und TOYOZAWA [OT68]. Diese entwickelten im Wesentlichen die gleiche Methode, basierend auf der EWALD-LAX-Theorie für Mehrfachstreuung [Lax51], für die unterschiedlichen (aber äquivalenten) Hamiltonoperatoren von Elektronen bzw. Phononen bzw. Frenkel-Exzitonen.
Die bestechende Einfachheit der CPA-Gleichung geht Hand in Hand mit der zumindest qualitativ richtigen Beschreibung einer Vielzahl von Systemen, deren Darstellung den Rahmen dieser Arbeit sprengen würde. Eine ausführliche Darstellung der CPA findet sich bei [Yon82], ebenso empfehlenswert ist eine Abhandlung von EHRENREICH und SCHWARZ über elektronische Strukturen von Legierungen [ES76], die auch der CPA besonderes Augenmerk widmet.

2.1 Näherungen vor der CPA

Um sich in einen Zugang zur Lösung des Streuproblems zu verschaffen und um verstehen zu können, in wieweit die CPA die beste Näherung mit gitterplatzdiagonaler Selbstenergie darstellt (siehe hierzu auch [VKE68]), ist eine Betrachtung der Näherungen instruktiv, die vor der CPA gebräuchlich waren. Diese stellen in ihrer Abfolge eine zunehmend adäquatere Berücksichtigung der Korrelationen einzelner Streuprozesse dar.
Wenn man die Konfigurationsmittlung von (1.20) durchführt, so besteht die einfachste mögliche Näherung darin, *überhaupt keine* Korrelationen zu berücksichtigen. Diese Näherung ist als **Virtual-Crystal-Approximation** (VCA) bekannt und geht auf NORDHEIM zurück [Nor31]. Offenbar zerfallen hier alle Streubeiträge bis zur Einfachstreuung

$$\overline{G_{ij}} \overset{\text{VCA}}{=} g_{ij} + \sum_k g_{ik}\overline{V_k}g_{kj} + \sum_{k,l} g_{ik}\overline{V_k}g_{kl}\overline{V_l}g_{lj} + \cdots \tag{2.1}$$

und man sieht durch Vergleich mit der Gleichung (1.11), daß hier

$$\Sigma_{\text{VCA}} = \overline{V} \tag{2.2}$$

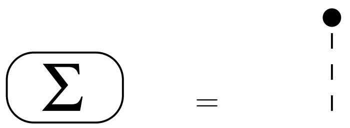


Abbildung 2.1 Die Selbstenergie in der VCA

gilt. Diese Näherung ist offensichtlich im Allgemeinen inadäquat, liefert jedoch für den Fall, daß sich die Potentiale der einzelnen Komponenten nur wenig voneinander unterscheiden, qualitativ richtige Ergebnisse. Dies kann man ohne Weiteres verstehen, wenn man z.B. das Potential einer Komponente (oder ein Potential, das sich von den vorkommenden Potentialen nur wenig unterscheidet) als Bezugspotential für den freien Propagator benutzt. Dann sind die in den Streutermen auftetenden Potentiale für den erwähnten Sonderfall klein und man kann in guter Näherung

$$\overline{V_i G_{ij} V_j} \ll \overline{V_i} \tag{2.3}$$

annehmen. Somit wird in diesem Limes die VCA exakt. Die nächste Stufe der Berücksichtigung von Korrelationen besteht darin, alle Streuprozesse korrekt zu erfassen, die an einem Gitterplatz ohne zwischenzeitliche Streuung an anderen Gitterplätzen stattfinden. Diese Streuprozesse werden oft als (nicht renormierte) lokale Streumatrix bezeichnet:

$$t_{\text{lokal}} = \frac{V_i}{1 - \langle \boldsymbol{g} \rangle V_i} \tag{2.4}$$

Nun werden diese Prozesse in der Selbstenergie zusammengefasst. Diese Näherung wird als **Single Site Approximation** (SSA) bezeichnet.

$$\Sigma_{\text{SSA}} = \overline{\frac{V_i}{1 - \langle \boldsymbol{g} \rangle V_i}} \tag{2.5}$$

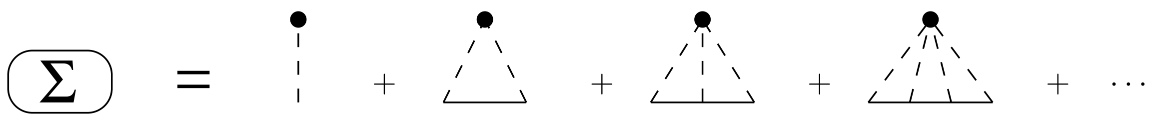


Abbildung 2.2 Die Selbstenergie in der SSA

Hier, wie auch im Folgenden, zeichnet der Operator $\langle \cdots \rangle$ stets das Diagonalelement in Wannierdarstellung. Die SSA ist exakt im Limes kleiner Konzentration einer Komponente, wenn als Bezugpotential für den freien Propagator das Potential der anderen Komponente benutzt wird, da sie alle Prozesse von $\mathcal{O}(c)$ korrekt erfasst.
Die offensichtliche Schwäche dieser Näherung liegt in der Vernachlässigung der Korrelation zwischen den lokalen Streumatrizen. Diese dürfen nicht durch eine lokale Propagation verbunden sein, da über sie ja separat gemittelt wird. Eine Erweiterung der SSA, bei der das erwähnte Problem noch verschlimmert wird, ist die von Davies und Langer entwickelte sogenannte **Modified Propagator Method** (s.[DL63]), bei der in (2.5) der freie Propagator durch den vollen Propagator ersetzt wird.

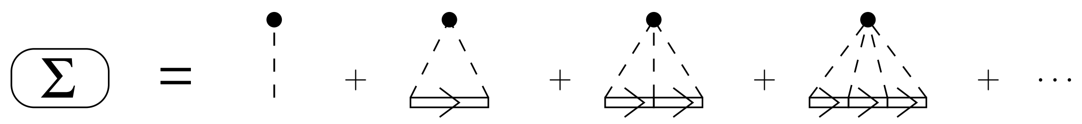


Abbildung 2.3 Die Selbstenergie in der MPM

In der sogenannten **Average T-Matrix Approximation** (ATA), die von Korringa und Beeby (s. [Kor58] bzw. [Bee64]) entwickelt wurde, wird der geschilderte Fehler der SSA teilweise korrigiert. Man schließt lokale Propagationen zwischen *direkt aufeinanderfolgenden* Streumatrizen aus, wodurch die volle T-Matrix folgende Form annimmt:

$$\boldsymbol{T}_{\mathrm{ATA}} = \bar{t}(1 - (\boldsymbol{g} - \langle \boldsymbol{g} \rangle)\bar{t})^{-1} \tag{2.6}$$

Somit ergibt sich hier als Selbstenergie

$$\Sigma_{\mathrm{ATA}} = \frac{\bar{t}}{1 + \langle \boldsymbol{g} \rangle \, \bar{t}} \tag{2.7}$$

Eine wichtige Eigenschaft der ATA, die sie von der SSA (und der MPM) abhebt, ist die exakte Reproduktion des Grenzfalles $c \to 1$, was sich durch Einsetzen ergibt. *Qualitativ* erklärt sich diese Eigenschaft aus der Berücksichtigung von Ein- sowie Ausschlüssen topologisch äquivalenter Diagramme, wie der folgenden Tabelle zu entnehmen ist:

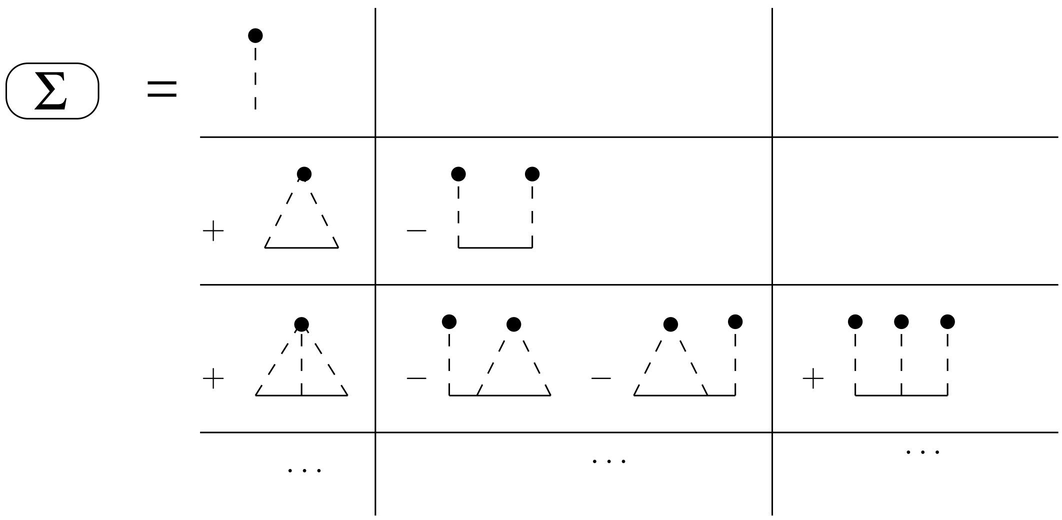


Abbildung 2.4 Beiträge gleicher Topologie in der ATA

Allerdings zeigt die ATA in numerischen Simulationen wesentliche Schwächen. Es werden z.B. fälschlicherweise Bandlücken vorhergesagt (siehe z.B.[VKE68],[Yon82]).
Die Schwächen von SSA,MPM und ATA lassen sich darauf zurückführen, daß nicht alle Beiträge mit gleicher Topologie erfasst werden. So berücksichtigt *keine* der genannten Näherungen das erste der folgenden Diagramme, alle drei beinhalten aber das zweite.

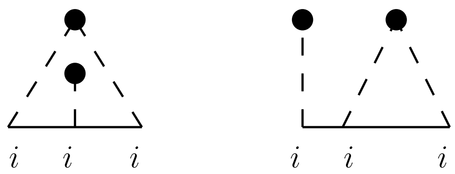


Abbildung 2.5

Im Falle von SSA und ATA muß allerdings die Aussage insofern eingeschränkt werden, als dort das erste Diagramm eine **Überkorrektur** bedeuten würde. Es ist seiner Art nach nämlich eine Korrektur von Prozessen im vollen Propagator, der in der MPM zwischen zwei lokalen Streuungen auftritt, nicht jedoch in SSA und ATA. Dennoch handelt es sich um einen Teil der exakten Selbstenergie, der sich von den berücksichtigten Anteilen in der Topologie nicht unterscheidet.

2.2 Herleitung der CPA

Die klassische Herleitung der CPA ergibt sich aus einer Mean-Field-Näherung. Hierbei betrachtet man einen einzelnen Gitterplatz mit zufälligem Potential. Allen anderen Gitterplätzen wird ein *komplexwertiges* Potential, das mit der Selbstenergie identifiziert wird, zugewiesen. Der (hypothetische) Kristall, dessen lokales Potential der Selbstenergie entspricht, wird auch **effektives Medium** genannt.

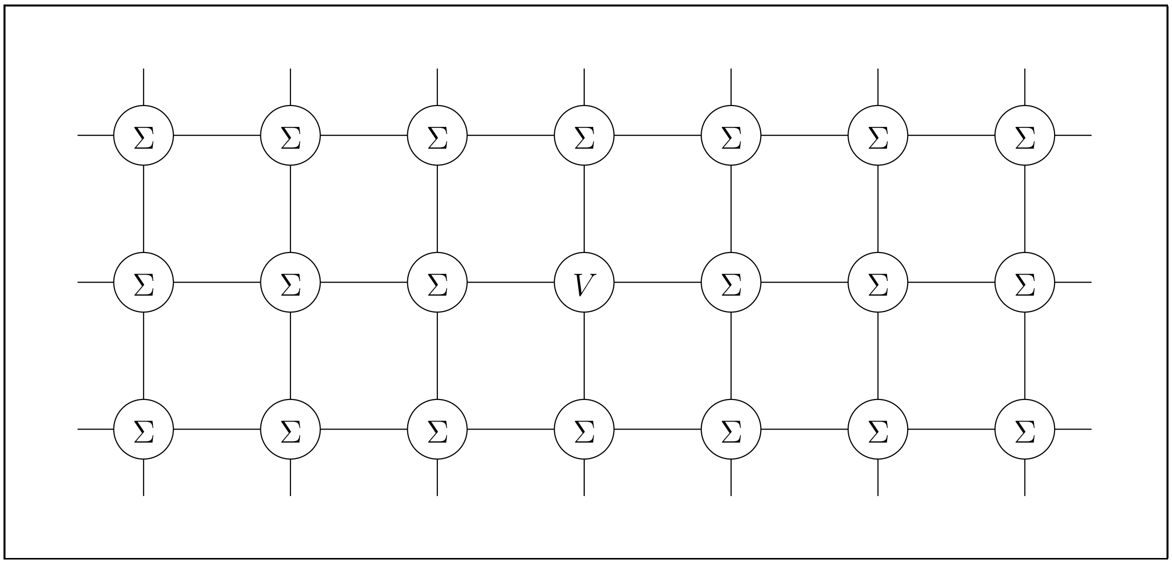


Abbildung 2.6 Das effektive Medium

Man passt nun die Selbstenergie Σ, in diesem Zusammenhang auch *coherent potential* ("stimmiges Potential") genannt, so an, daß die lokale Streumatrix des Elektrons verschwindet. Hieraus ergibt sich die CPA-Gleichung:

$$\overline{\frac{V-\Sigma}{1-(V-\Sigma)\langle \boldsymbol{G}\rangle}} \stackrel{!}{=} 0 \tag{2.8}$$

Diese Herleitung der CPA, in der der Einfluss des Gitters lediglich über ein skalares, allerdings komplexwertiges, Potential berücksichtigt wird, ist die von Soven benutzte. Andere Gruppen haben ungefähr gleichzeitig unäbhangig die CPA auf mathematisch-diagrammatische Art hergeleitet (siehe hierzu beispielsweise [Lea68]). Eine solche Herleitung (die sich in dieser Form allerdings meines Wissens nicht in der Literatur findet) soll hier auch vorgeführt werden, da dies plausibel macht, inwieweit die CPA den in 2.1 vorgestellten Näherungen überlegen ist.

Man geht zunächst von der Dyson-Gleichung aus und setzt als Selbstenergie diejenige aus der Modified Propagator Method an. Man betrachtet also alle Vielfachstreuungen an einem Gitterplatz und lässt zwischen zwei Streuungen jeweils eine volle Propagation zu. Damit gilt

$$\boldsymbol{\Sigma G} \stackrel{\text{MPM}}{=} \overline{\frac{V}{1 - \langle \boldsymbol{G} \rangle V}} \boldsymbol{G} \tag{2.9}$$

Der Fehler liegt hier darin, daß in allen Propagatoren die Rückkehr zum Ausgangspunkt möglich ist. Über die dort stattfindenden Streuprozesse wird allerdings getrennt gemittelt.
Um diesen Fehler zu korrigieren, führe man einen Propagator $\tilde{\boldsymbol{G}}$ ein, der sich vom vollen Propagator dadurch unterscheidet, daß innerhalb seiner Streuzentren der Ausgangspunkt nicht mehr auftaucht.
Hierzu sei angemerkt, daß $\tilde{\boldsymbol{G}}$ kein physikalischer Propagator im eigentlichen Sinne ist. Es lässt sich für ihn z.B. keine Dyson-Gleichung aufstellen.
Wenn man mit $\tilde{\Sigma}$ die Menge aller lokalen Streuprozesse bezeichnet (siehe auch (2.20)) und fordert, daß im vollen Propagator ein Streuzentrum höchstens einmal auftauchen soll, so ergibt sich folgende Relation:

$$\boldsymbol{G} = \tilde{\boldsymbol{G}} + \langle \tilde{\boldsymbol{G}} \rangle \tilde{\Sigma} \tilde{\boldsymbol{G}} \tag{2.10}$$

Mit der Hilfsgröße $\tilde{\boldsymbol{G}}$ gilt ändert sich (2.9) zu:

$$\Sigma \boldsymbol{G} \stackrel{\text{CPA}}{=} \overline{\frac{V}{1 - \langle \tilde{\boldsymbol{G}} \rangle V}} \tilde{\boldsymbol{G}} \tag{2.11}$$

Mit der Identität $\tilde{\Sigma} \tilde{\boldsymbol{G}} = \Sigma \boldsymbol{G}$ erhält man aus (2.10)

$$\tilde{\boldsymbol{G}} = \frac{\boldsymbol{G}}{1 + \langle \boldsymbol{G} \rangle \Sigma} \tag{2.12}$$

Setzt man dies ein in (2.11), so ergibt sich

$$\Sigma \boldsymbol{G} = \overline{\frac{V}{1 - \left\langle \frac{\boldsymbol{G}}{1 + \langle \boldsymbol{G} \rangle \Sigma} \right\rangle V}} \frac{\boldsymbol{G}}{1 + \langle \boldsymbol{G} \rangle \Sigma} \tag{2.13}$$

Hieraus folgt sofort

$$\Sigma = \overline{\frac{V}{1 + \langle \boldsymbol{G} \rangle \Sigma - \langle \boldsymbol{G} \rangle V}} \tag{2.14}$$

was eine Form der CPA-Gleichung ist. In der CPA wird also gegenüber der MPM in sämtlichen Propagatoren die Rückkehr zum Ausgangspunkt ausgeschlossen. Hierdurch ergeben sich lokale Korrekturen (d.h. Korrekturen, die den Diagonalteil des Propagators beinhalten), wodurch u.a. die Exaktheit der CPA im Limes $c \rightarrow 1$ erreicht wird.
An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, daß die CPA ebenso wie die MPM zwar als Single-Site-Näherungen bezeichnet werden, insofern als die Selbstenergie gitterplatzdiagonal ist und explizit auch keine nichtlokalen Prozesse vorkommen, implizit aber sehr wohl Streuprozesse an anderen Gitterplätzen in der Selbstenergie enthalten sind. Dies liegt daran, daß die in der Selbstenergie auftretenden lokalen Propagationen mit der Selbstenergie renormiert sind (im Falle der CPA kommen noch Korrekturen hinzu), und im vollen (d.h. renormierten) Propagator *immer* nichtlokale Prozesse enthalten sind.

2.3 Eigenschaften der CPA

Die CPA hat sich als eine der wichtigsten und meistgebrauchten Näherungen zur Behandlung ungeordeneter Systeme etabliert, weil sie trotz ihrer Einfachheit eine Reihe wichtiger Kriterien erfüllt, an denen sich auch jegliche Erweiterung messen lassen muß. Es sind dies:

1) Die Näherung lässt sich auf alle Konzentrationen im Intervall $[0, 1]$ anwenden und liefert überall zumindest qualitativ richtige Ergebnisse. D.h. im Falle der CPA, daß die Lage von Bändern richtig vorhergesagt wird, die Breite derselben wenigstens ungefähr. (Eine bekannte Eigenschaft der CPA ist allerdings, Bandbreiten zu unterschätzen.)

2) Für die exakt lösbaren Grenzfälle ($c = 0, c = 1$) liefert die CPA die richtigen Ergebnisse.

3) Die aus der CPA erhaltene Greenfunktion ist in der oberen komplexen Halbebene analytisch.

4) Im Fall getrennter Bänder ist das Integral über die Zustandsdichte in den Teilbändern c bzw $1 - c$, im Falle eines einzelnen Bandes ist das Integral 1.

Zu Punkt 1) wäre noch zu bemerken, daß gemäß dem Saxon-Hutner-Theorem die Zustandsdichte des ungeordeten Systems nur dort von Null verschieden sein kann, wo dies auch für die Zustandsdichte (mindestens) einer der Komponenten gilt. Der Umkehrschluß gilt nicht.
Die exakte Reproduktion der Grenzfälle lässt sich durch Einsetzen in die CPA-Gleichung leicht nachprüfen:

$$c = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{-\Sigma}{1 + \Sigma \langle \boldsymbol{G} \rangle} \stackrel{!}{=} 0 \quad \Rightarrow \quad \Sigma = 0$$

$$c = 1 \quad \Rightarrow \quad \frac{V - \Sigma}{1 - (V - \Sigma)\langle \boldsymbol{G} \rangle} \stackrel{!}{=} 0 \quad \Rightarrow \quad \Sigma = V$$

Im ersten Fall ergibt sich $\boldsymbol{G}(z) = g(z)$, man erhält also den freien Propagator. Im zweiten Fall ergibt sich $\boldsymbol{G}(z) = g(z - V)$, also ein freier Propagator, der allerdings um V verschoben ist.
Die Eindeutigkeit und Analytizität der CPA-Lösung wurde von MÜLLER-HARTMANN bewiesen ([MH74]).
Ein Beweis der Summenregel 4) findet sich z.B. bei [YON82].

2.4 Formen der CPA-Gleichung

Die CPA-Gleichung lässt sich in verschiedene Formen bringen. Die Konfigurationsmittlung erschwert eine solche Umformung. Daher ist es zweckmäßig, diese Mittlung zunächst rückgängig zu machen und nach Beendigung der Umformungen wieder auszuführen. Man geht von der CPA-Gleichung nach SOVEN aus

$$\overline{\frac{V - \Sigma}{1 - (V - \Sigma)\langle \boldsymbol{G} \rangle}} \stackrel{!}{=} 0 \tag{2.15}$$

und formt diese folgendermaßen um:

$$\begin{aligned}
& \overline{\frac{V - \Sigma}{1 - (V - \Sigma)\langle \boldsymbol{G} \rangle}} &=& \; 0 \\
\Longleftrightarrow \quad & \overline{\frac{V}{1 - (V - \Sigma)\langle \boldsymbol{G} \rangle}} &=& \; \overline{\frac{\Sigma}{1 - (V - \Sigma)\langle \boldsymbol{G} \rangle}} \\
& &=& \; \Sigma + \Sigma \langle \boldsymbol{G} \rangle \underbrace{\overline{\frac{V - \Sigma}{1 - (V - \Sigma)\langle \boldsymbol{G} \rangle}}}_{=0}
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \quad \Sigma = \overline{\frac{V}{1 - (V - \Sigma)\langle \boldsymbol{G} \rangle}} \tag{2.16}$$

Man kann jetzt durch die Einführung der Größe Σ_α, die eine Funktion der Atomsorte α ist, die Konfigurationsmittlung aufheben:

$$\Sigma_\alpha = \frac{V_\alpha}{1 - (V_\alpha - \Sigma)\langle \boldsymbol{G} \rangle} \tag{2.17}$$

An dieser Gleichung kann man nun algebraische Umformungen vornehmen. Eine für die vorliegende Arbeit wichtige Umformung ist die folgende:

$$\begin{aligned} && V_\alpha &= \Sigma_\alpha \left(1 - (V_\alpha - \Sigma)\langle \boldsymbol{G} \rangle\right) \\ \Longleftrightarrow && \Sigma_\alpha &= V_\alpha + V_\alpha \langle \boldsymbol{G} \rangle \Sigma_\alpha - \Sigma_\alpha \langle \boldsymbol{G} \rangle \Sigma \end{aligned}$$

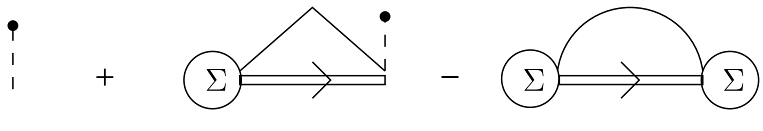
Anwenden der Konfigurationsmittlung auf diese Gleichung liefert

$$\Sigma = \overline{V_\alpha} + \overline{\Sigma_\alpha \langle \boldsymbol{G} \rangle V_\alpha} - \Sigma \langle \boldsymbol{G} \rangle \Sigma \tag{2.18}$$

Für ein zweikomponentiges System, in dem ein Potential Null gesetzt werden kann und das sich durch *eine* Konzentration beschreiben lässt, nimmt (2.18) folgende Form an:

$$\Sigma = cV + \Sigma \langle \boldsymbol{G} \rangle V - \Sigma \langle \boldsymbol{G} \rangle \Sigma \tag{2.19}$$

Dies lässt sich direkt in diagrammatischer Form schreiben:



Hier wie auch im Weiteren bedeutet ein “Bogen” ($\frown$) bzw. ein “Dach”($\wedge$) stets ein Diagonalelement in Wannierdarstellung, wobei im ersteren Fall die Konfigurationsmittlung für die verbundenen Elemente getrennt erfolgt, im letzteren gemeinsam.
Die Form (2.19) der CPA-Gleichung wurde in den Simulationen für die vorliegende Arbeit verwendet; auf ihr bauen auch die noch vorzustellenden Erweiterungen auf.

Äquivalent zu (2.19) ist auch das folgende Gleichungssystem:

$$\tilde{\Sigma} = \frac{cV}{1 - \langle \tilde{\boldsymbol{G}} \rangle V} \tag{2.20}$$

$$\tilde{\boldsymbol{G}} = \boldsymbol{G} - \langle \tilde{\boldsymbol{G}} \rangle \Sigma \boldsymbol{G} = \boldsymbol{G} - \langle \tilde{\boldsymbol{G}} \rangle \tilde{\Sigma} \tilde{\boldsymbol{G}} \tag{2.21}$$

$$\tilde{\Sigma} \tilde{\boldsymbol{G}} = \Sigma \boldsymbol{G} \tag{2.22}$$

Diesem System von Gleichungen sieht man in besonderem Maße die Ähnlichkeit zur Selbstkonsistenzgleichung für den Self-Avoiding Walk an, die im folgenden Kapitel besprochen wird. $\tilde{\boldsymbol{G}}$ gehorcht der Gleichung (3.12), die in erster Stufe der Lace-Entwicklung gewonnen wird. Dies erkennt man, wenn man die Dyson-Gleichung sowie (2.22) in (2.21) einsetzt, wobei letztere übergeht in

$$\tilde{\boldsymbol{G}} = \boldsymbol{g} + \boldsymbol{g} \tilde{\Sigma} \tilde{\boldsymbol{G}} - \langle \tilde{\boldsymbol{G}} \rangle \tilde{\Sigma} \tilde{\boldsymbol{G}} \tag{2.23}$$

Setzt man hier $\tilde{\Sigma} = 1$, was die mathematische Grundstruktur nicht ändert, erhält man (nach Umbenennung der $\tilde{\boldsymbol{G}} \to \tilde{\boldsymbol{G}}$) Gleichung (3.12).
$\tilde{\Sigma}$ ist die lokale Streumatrix, vielfach auch als echte Selbstenergie (*proper self-energy*) bezeichnet. Ihre internen Propagationen folgen alle dem Self-Avoiding Walk, was in erster Stufe Lace-Entwicklung im Wesentlichen eine Rückkehr zum Anfangspunkt ausschließt.
Ein weiteres Gleichungssystem, das von BAUMGARTNER und OTTO (s.[OTT03]) gefunden wurde, besteht aus (2.19) sowie

$$\tilde{\boldsymbol{G}} = \frac{\boldsymbol{g}\left(z - \frac{\tilde{\Sigma}}{1+\langle \tilde{\boldsymbol{G}} \rangle \tilde{\Sigma}}\right)}{1 + \frac{\tilde{\Sigma}}{1+\langle \tilde{\boldsymbol{G}} \rangle \tilde{\Sigma}} \left\langle \boldsymbol{g}\left(z - \frac{\tilde{\Sigma}}{1+\langle \tilde{\boldsymbol{G}} \rangle \tilde{\Sigma}}\right)\right\rangle} \tag{2.24}$$

Hierbei wurde benutzt, daß für skalare Selbstenergien $\boldsymbol{G}(z) = g(z - \Sigma)$ gilt.

Für diese Gleichung wurde für das Lorentzband sowie das quadrierte Lorentzband

$$\langle \boldsymbol{g} \rangle = \frac{1}{z+i} \quad \text{bzw.} \quad \langle \boldsymbol{g} \rangle = \frac{z+2i}{(z+i)^2}$$

gefunden, daß sie als Abbildungsvorschrift für $\tilde{\boldsymbol{G}}$ *immer* eine Kontraktion darstellt. Diese Eigenschaft liegt jedoch i.Allg. nicht vor, wie z.B. Simulationen für das Nearest-Neighbour-Hopping-Band in drei Dimensionen gezeigt haben. Dort zeigt die Gleichung zwar über weitere Parameterbereiche Kontraktionseigenschaft als z.B. Gl.(2.16) oder (2.19), aber auch nicht in allen Bereichen. Somit ist man i.Allg. bei der CPA-Gleichung wie auch den noch zu besprechenden CPA-Erweiterungen auf aktive Verfahren zum Auffinden der Lösung angewiesen. Dieses Problem wird im Anhang B noch näher besprochen.

2.5 Numerische Ergebnisse mit der CPA

Zum Abschluss der Betrachtung der CPA sollen noch die Ergebnisse numerischer Simulationen mit der CPA diskutiert werden. Das betrachtete System ist hierbei stets ein dreidimensionaler Kristall mit Nearest-Neighbour-Hopping, bestehend aus zwei Komponenten. Die dimensionslose Hoppingstärke beträgt $t = 1$, woraus sich eine ungestörte Bandbreite von 12 ergibt. Es kann hier ein Potential auf Null gesetzt werden (die Ersetzung $V_a \rightarrow 0, V_b \rightarrow V_b - V_a$ bedeutet lediglich eine Verschiebung des gesamten Bandes). Es ist jedoch zu beachten, daß diese Überlegung für das exakte Band sowie das CPA-Band richtig ist; für die in Kapitel 4 vorgestellte Erweiterung hat sich gezeigt, daß die Ergebnisse sehr wohl von den absoluten Werten der Potentiale abhängen. Dort ist also auf jeden Fall explizit mit zwei Potentialen zu rechnen. Dieser Umstand wird in Kapitel 6 noch diskutiert.

Ist, wie im Falle der CPA, eine Verschiebung der Potentiale zulässig, tauchen in allen Rechnungen nur noch ein Potential und eine Konzentration auf. Somit vereinfacht sich auch die Konfigurationsmittlung, derart, daß z.B. (1.17) sich ändert zu

$$\overline{F} = cF(V) \tag{2.25}$$

Die CPA-Ergebnisse werden verglichen mit Simulationen eines Modellkristalls, dessen Konfiguration explizit festgelegt ist. In letzterem Fall wurde die Bewegungsgleichung der Greenfunktion numerisch iteriert, woraus sich durch eine Laplace-Transformation

die Energiedarstellung der Greenfunktion ergibt. Dieses Verfahren ist einer Veröffentlichung von Alben et al.[ABKS75] entnommen. Die Größe des Modellkristalls beträgt jedoch bei den in dieser Arbeit gezeigten Simulationen 30x30x30 Gitterplätze im Unterschied zu 20x20x20 bei Alben et al., wodurch Finite-Size-Effekte bereits merklich gemildert werden. Die Simulationen bestätigten übrigens die in Kapitel 1.3 gemachte Feststellung, daß bei großen Systemen die Greenfunktionen im Großen und Ganzen konfigurationsunabhängig sind.
Die Ergebnisse aus diesen Simulationen werden im Folgenden stets als "exakt" bezeichnet, wobei dieser Ausdruck relativ ist. Die Exaktheit wird durch die endliche Größe des Modellkristalls eingeschränkt. Des Weiteren wurde bei diesen Rechnungen ein größerer Imaginärteil für die Energie verwendet, was einerseits bewirkt, daß die Kurven geglättet werden und hierdurch überhaupt mit den CPA-Ergebnissen vergleichbar sind, andererseits allerdings auch zu einer Verbreiterung des Bandes führt, die auch in allen gezeigten Plots zutage tritt.

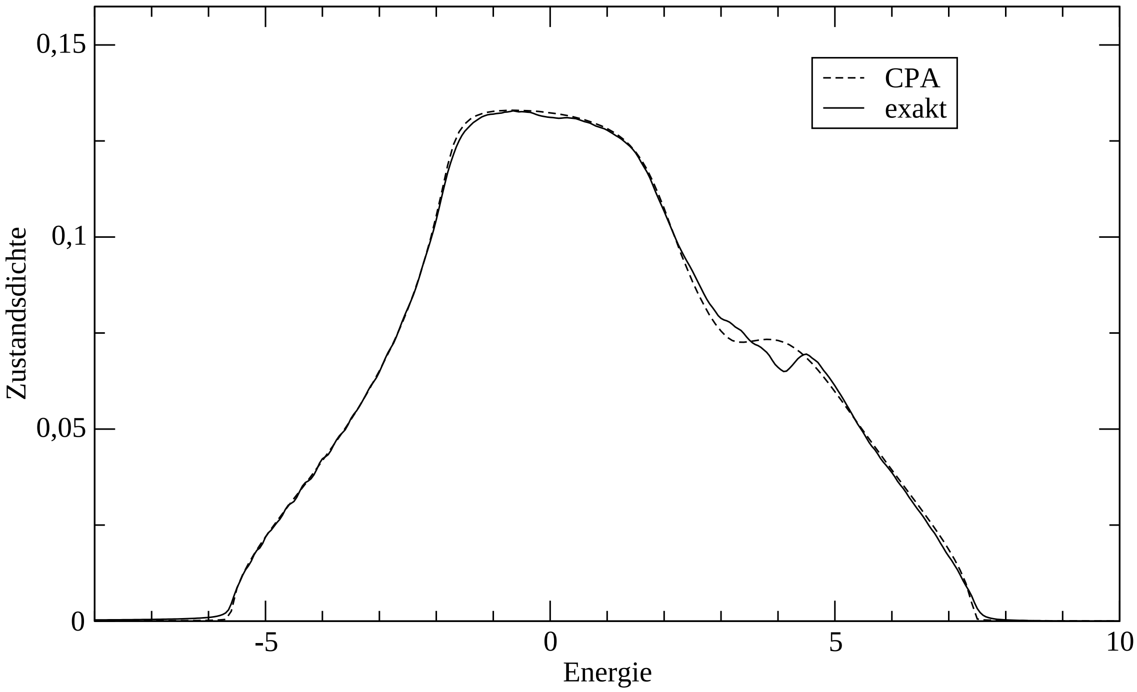


Abbildung 2.7 Vergleich von CPA und exakten Ergebnissen für $c = 0.8, V_1 = 0, V_2 = 3.5$

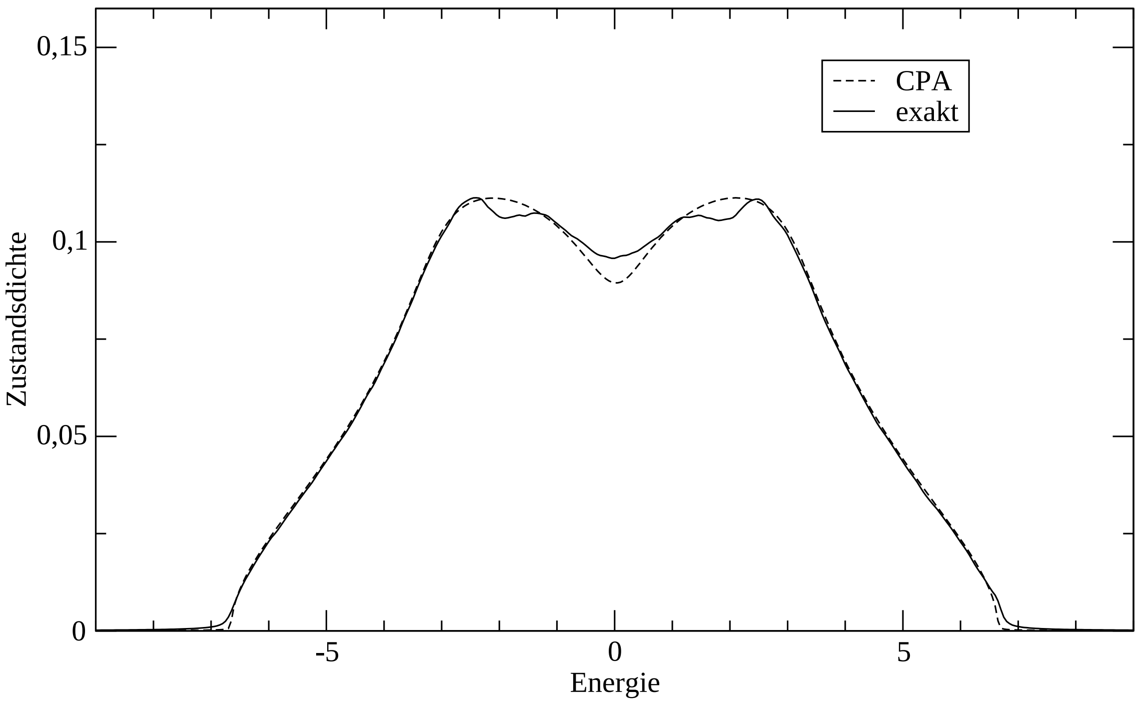


Abbildung 2.8 Vergleich von CPA und exakten Ergebnissen für $c = 0.5, V_1 = -1.75, V_2 = 1.75$

Abbildung 2.7 zeigt, daß die CPA die Bandstruktur im Großen und Ganzen richtig wiedergibt. Insbesondere wird hier die Lage der Bandkanten richtig vorhergesagt (Die Nichtübereinstimmung mit den exakten Daten beruht auf dem größeren Imaginärteil, was Simulationen im Rahmen dieser Arbeit bestätigt haben). Auch Abbildung 2.8 zeigt die weitgehenden Übereinstimmungen zwischen CPA und exakten Ergebnissen. Beide Diagramme zeigen allerdings deutliche Diskrepanzen im Grenzbereich zwischen den beiden Teilbändern. In diesem Bereich tragen offenbar nichtlokale Prozesse, die von der CPA nicht erfasst werden, maßgeblich zur Selbstenergie bei.
Die Schwächen der CPA werden in Abbildung 2.9 besonders deutlich, das ein Beispiel getrennter Bänder darstellt. Beim Minoritätsband um $E = 9$ gibt die CPA zwar die Lage des Bandes richtig wieder, versagt jedoch völlig bei der Vorhersage der Feinstruktur. Ebenso wird in diesem Fall die Bandbreite nicht richtig vorhergesagt.

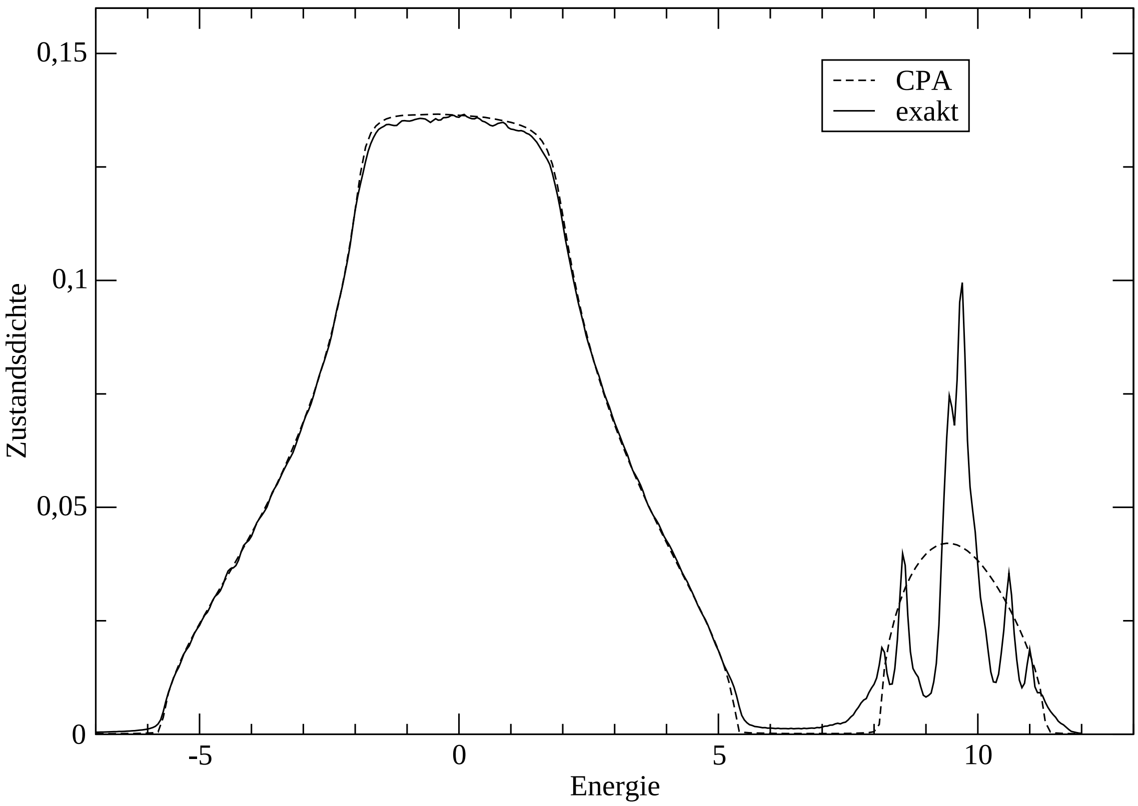


Abbildung 2.9 Vergleich von CPA und exakten Ergebnissen für $c = 0.9, V_1 = 0, V_2 = 9$

Das Versagen der CPA bei der Vorhersage bestimmter Strukturen motiviert die Suche nach einer CPA-Erweiterung. Die solide Vorhersagekraft der CPA in vielen Bereichen lässt eine solche Erweiterung auf der Basis einer Entwicklung, deren niedrigste Ordnung die CPA darstellt, sinnvoll erscheinen.

Kapitel 3

Die Lace-Abbildung für den Self-Avoiding Walk

Die CPA-Gleichung weist einige Ähnlichkeit auf mit der Selbstkonsistenzgleichung, die sich für den Self-Avoiding Walk (SAW) in erster Näherung aus der sogenannten **Lace-Abbildung** ergibt. Die Lace-Entwicklung, die in diesem Kapitel besprochen werden soll, wurde 1985 von Brydges und Spencer eingeführt [BS85], um das Verhalten eines schwach-selbstvermeidenden Walks in fünf und mehr Dimensionen zu untersuchen. Neben dem dort gewählten Zugang (im Weiteren als *algebraische* Lace-Entwicklung bezeichnet), der sich auf den Self-Avoiding Walk übertragen lässt, existiert eine alternative Methode (im Weiteren *iterative* Lace-Entwicklung genannt), die in gewisser Hinsicht intuitiver ist. Die beiden Methoden liefern identische Ergebnisse. Die letztere Methode lässt sich meiner Meinung nach *nicht* auf das allgemeine Streuproblem übertragen und ist somit für die vorliegende Arbeit von untergeordneter Bedeutung. Trotzdem soll sie hier vorgestellt werden, da sie zunächst einfacher nachzuvollziehen ist. Die Inhalte dieses Kapitels finden sich teilweise auch bei [Leu98] und [Ott03].

3.1 Der Self-Avoiding Walk

Die explizite mathematische Behandlung des Self-Avoiding Walk ist ein so komplexes Thema, daß dieses ganze Bücher füllt (siehe z.B.[MS96]). Eine allgemeine Formulierung des Problems fällt jedoch nicht sonderlich schwer. Es handelt sich um einen Weg, bei dem alle besuchten Plätze paarweise verschieden sind, evtl. mit Ausnahme des Anfangs- und Endpunktes. Der Propagator eines solchen Weges ist im Unterschied zu dem des Random Walk

$$\boldsymbol{G}^{RW} = \boldsymbol{g} + \boldsymbol{gVg} + \boldsymbol{gVgVg} + \cdots$$

$$\text{bzw.} \tag{3.1}$$

$$G^{RW}_{x_0 x_n} = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{\{x_i\}} g_{x_0 x_1} V_{x_1} g_{x_1 x_2} V_{x_2} \cdots V_{x_{n-2}} g_{x_{n-2} x_{n-1}} V_{x_{n-1}} g_{x_{n-1} x_n}$$

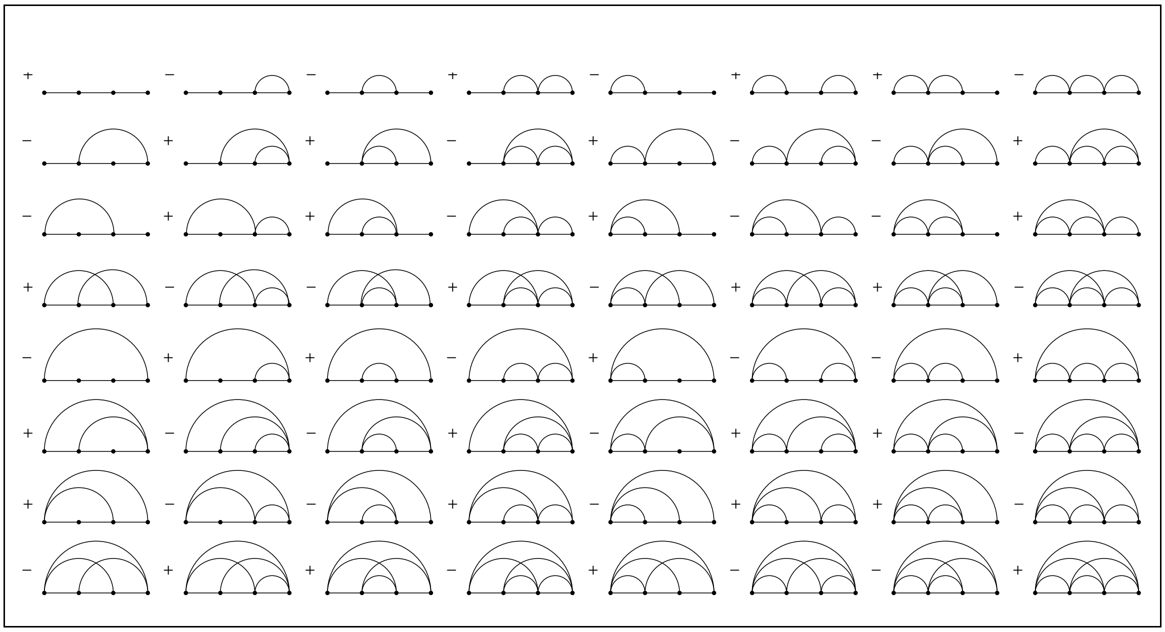
zu modifizieren, was formal durch einen Vorfaktor geschehen kann:

$$G^{SAW}_{x_0 x_n} = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{\{x_i\}} \prod_{\substack{i,j=0 \\ i<j}}^{n} (1 - \delta_{x_i x_j}) g_{x_0 x_1} V_{x_1} g_{x_1 x_2} V_{x_2} \cdots V_{x_{n-2}} g_{x_{n-2} x_{n-1}} V_{x_{n-1}} g_{x_{n-1} x_n} \tag{3.2}$$

Interessant ist hier insbesondere der Vorfaktor. Dieser kann (im Prinzip) ausmultipliziert werden und liefert dann alle möglichen Kombinationen von Übereinstimmungen, jeweils mit einem Vorfaktor ± 1 versehen:

$$\prod_{\substack{i,j=0 \\ i<j}}^{n} (1 - \delta_{x_i x_j}) = 1 - \sum_{\substack{i,j=0 \\ i<j}}^{n} \delta_{x_i x_j} + \sum_{\substack{i,j=0 \\ i<j}}^{n} \sum_{\substack{k,l=0 \\ k<l}}^{n} \delta_{x_i x_j} \delta_{x_k x_l} - \cdots \tag{3.3}$$

Hierbei dürfen in der Vierfach-Summe sowie in den höheren Summen niemals beide Indizes zweier Einzelsummationen übereinstimmen. (Dies mathematisch zu formulieren ist zwar möglich, trägt aber wohl kaum zur Überschaubarkeit des Ausdrucks bei).
Man sieht hier - was in Kapitel 4 noch bedeutsam sein wird - , daß der Ausschluß von Positionsübereinstimmungen Terme generiert, die gerade solche Übereinstimmungen beinhalten.
Die Tatsache, daß - abgesehen vom Vorzeichen - Ein- und Ausschluß von Übereinstimmungen die gleichen Terme generieren, ist auch als Grundlage für das sogenannte **Kumulantenschema** zu sehen. Dieses soll hier nicht erläutert werden, für eine gute Darstellung des Themas sei aber auf [Yon68] verwiesen.
Insgesamt wird klar, daß in (3.3) eine verwirrende Vielfalt von Termen entsteht, wie die folgende Abbildung für $n = 4$ verdeutlicht:



Auf den ersten Blick scheint das Problem einer Resummation von Diagrammen und die Ermittlung einer Selbstenergie kaum lösbar. Das Verfahren der Lace-Entwicklung bietet aber einen systematischen Zugang zu dem Problem.

3.2 Die iterative Lace-Entwicklung

Bei dem nun als nächstes vorgestellten Verfahren wird das Problem des Self-Avoiding Walk gewissermaßen auf sich selbst zurückgeführt, derart daß ein SAW auf Teilwege zurückgeführt wird, die wiederum SAWs darstellen, zwischen denen allerdings Korrelationen bestehen. Insgesamt wird in Form einer Art Dyson-Gleichung versucht, iterativ eine Selbstenergie vom Restweg zu separieren.
Sei $\Omega(x, y)$ die Menge aller Self-Avoiding Walks, die von Gitterplatz x nach y laufen, wobei $x = y$ (Self-Avoiding Loop) erlaubt ist. Man definiert nun folgenden Propagator.

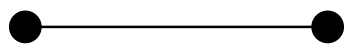
$$G_{xy} = \sum_{\omega \in \Omega(x,y)} g_{\omega(0)\omega(1)} g_{\omega(1)\omega(2)} \cdots g_{\omega(n-1)\omega(n)} \tag{3.4}$$

Dieser trägt also Informationen über alle SAWs und SALs.
Die Propagatoren sind innerhalb der Abschnitte 3.2-3.4 als *dimensionslose* Größen aufzufassen. Dies ist für die hier angestellten Überlegungen auch unerheblich, da das mathematische Verfahren der Lace-Entwicklung vom physikalischen Kontext losgelöst betrachtet werden kann. Außerdem korrespondiert zum SAW-Propagator in (3.4) in Kapitel 4, wo der Übergang zum physikalischen System vollzogen wird, nicht der Propagator, sondern das Produkt ΣG, welches auch eine dimensionslose Größe darstellt.

Nützlich ist nun noch die Einführung der folgenden Propagatoren, die sich von $\boldsymbol{G}$ ableiten:

$$\begin{aligned} \bar{\boldsymbol{G}} &:= \boldsymbol{G} - \langle \boldsymbol{G} \rangle \cdot \mathbf{1} \\ \breve{\boldsymbol{G}} &:= \mathbf{1} + \bar{\boldsymbol{G}} \end{aligned} \tag{3.5}$$

$\bar{G}$ beinhaltet also (ausschließlich) die Nichtdiagonal-Elemente von G, erlaubt also keine Gleichheit von Anfangs- und Endpunkt, während $\breve{G}$ in diesem Fall sozusagen zur Länge Null zusammenfällt.
Der (freie) Einschrittpropagator wird mit $\boldsymbol{g}$ bezeichnet. Im Weiteren werden die folgenden Symbole benutzt.

Matrixform	Komponentenform	Symbol
$\mathbf{1}$	δ_{xy}	$\bullet$
$\boldsymbol{g}$	g_{xy}	
$\boldsymbol{G}$	G_{xy}	
$\bar{\boldsymbol{G}}$	$\bar{G}_{xy} = \begin{cases} G_{xy} & (x \neq y) \\ 0 & (x = y) \end{cases}$	
$\breve{\boldsymbol{G}}$	$\breve{G}_{xy} = \begin{cases} G_{xy} & (x \neq y) \\ 1 & (x = y) \end{cases}$	

Man erhält, wie man sich anhand der diagrammatischen Darstellung klarmachen kann, die Diagonalelemente von $\boldsymbol{G}$ aus $\breve{\boldsymbol{G}}$ bzw. $\bar{\boldsymbol{G}}$ mittels folgender Beziehung:

$$\langle \boldsymbol{G} \rangle = \langle \boldsymbol{g} + \boldsymbol{g}\bar{\boldsymbol{G}} \rangle = \langle \boldsymbol{g}\breve{\boldsymbol{G}} \rangle \tag{3.6}$$

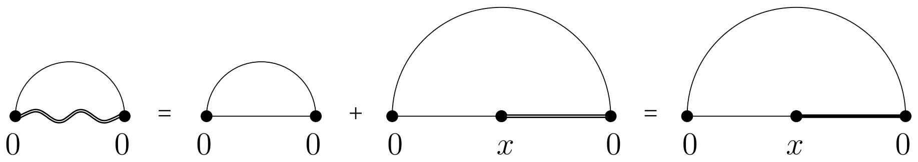


Abbildung 3.1

Definiert man für den Propagator des (uneingeschränkten) Random Walk $\boldsymbol{C}$ in analoger Weise ein $\breve{\boldsymbol{C}}$, so gilt für dieses

$$\breve{\boldsymbol{C}} = \mathbf{1} + \boldsymbol{g} + \boldsymbol{g}^2 + ... = \sum_{n=0}^{\infty} \boldsymbol{g}^n = (\mathbf{1} - \boldsymbol{g})^{-1} \tag{3.7}$$

Man kann für $\breve{\boldsymbol{G}}$ eine ähnliche Gleichung formulieren, wobei die Beschränkungen des SAW - zunächst formal - durch Renormierung mittels einer Selbstenergie $\boldsymbol{\Sigma}$ berücksichtigt werden.

$$\breve{\boldsymbol{G}} = (\mathbf{1} - \boldsymbol{g} - \boldsymbol{\Sigma})^{-1} \tag{3.8}$$

Dies ist äquivalent zu folgender Dyson-Gleichung:

$$\breve{\boldsymbol{G}} = \mathbf{1} + \boldsymbol{g}\breve{\boldsymbol{G}} + \boldsymbol{\Sigma}\breve{\boldsymbol{G}} \tag{3.9}$$

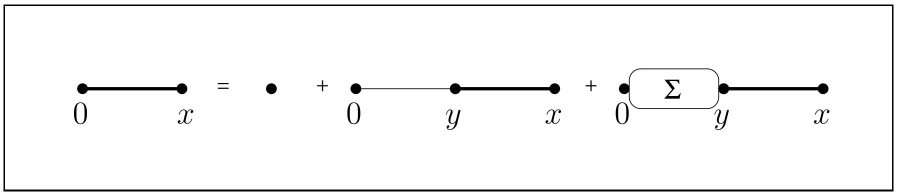


Abbildung 3.2

Im Rahmen der Lace-Entwicklung berücksichtigt man nun gewissermaßen rekursiv die Korrelationen innerhalb des SAW und gewinnt so einen näherungsweisen Ausdruck für die Selbstenergie. Der erste Schritt sieht so aus:

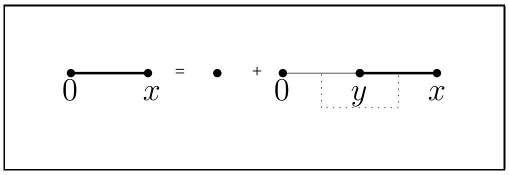


Abbildung 3.3

Die gestrichelte Linie bedeutet, daß die beiden Teilstücke außer dem Punkt, an dem sie aneinanderstoßen, keine Punkte gemeinsam haben dürfen. Das heißt also: im Teilstück $[y \to x]$ darf 0 nicht mehr auftauchen. Man kann dies leicht in folgender Weise berücksichtigen.

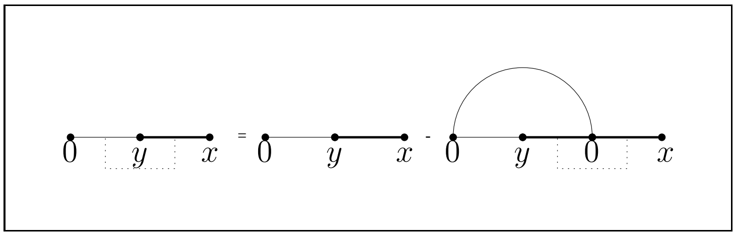


Abbildung 3.4

Es ist nun wiederum die Korrelation zwischen den beiden Teilwegen durch einen geeigneten Abzug zu berücksichtigen. Hierbei ergeben sich aber neue Korrelationen. Sei w der erste Platz in $[0 \to x]$, der bereits in $[y \to 0]$ vorkommt. Dann sind bei einem entsprechenden Abzug einerseits Korrelationen zwischen den Teilwegen, die bei w enden bzw. anfangen, zu berücksichtigen, andererseits verbleiben auch noch Korrelationen zwischen den Wegen $[0 \to x]$ und $[y \to 0]$

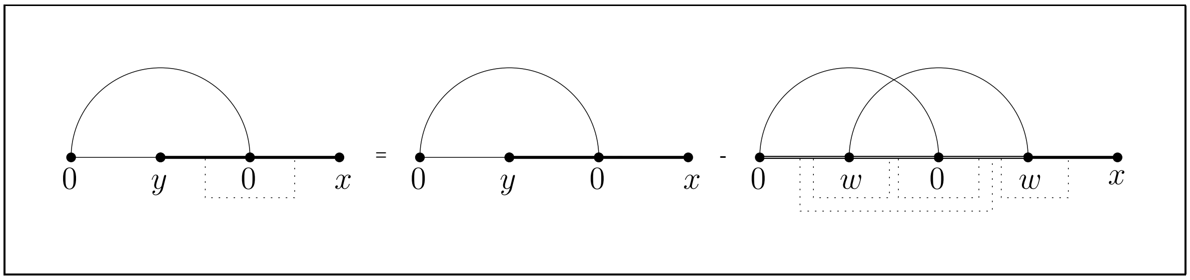


Abbildung 3.5

Man beginnt zu erkennen, daß man nicht nur Korrelationen mit dem Ende des Weges von Schritt zu Schritt mitnehmen muß; außerdem verbleiben Korrelationen zwischen vorhergehenden Teilwegen, wie hier z.B. zwischen $[0 \to x]$ und $[y \to 0]$. Die Korrelationen lassen sich nicht beseitigen und machen eine Auswertung der - in ihrer Grundstruktur einfachen - Lace-Diagramme schwierig bzw. unmöglich. Die weiteren Schritte der Lace-Entwicklung verlaufen nun analog. Die nächsten drei sollen hier noch in diagrammatischer Form aufgeführt werden.

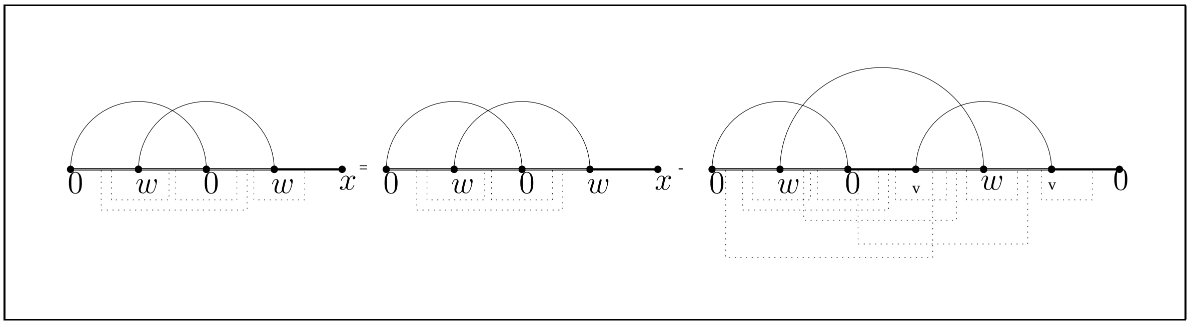
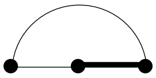
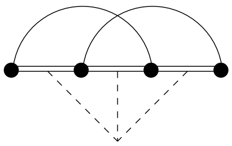
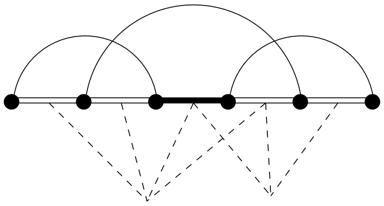
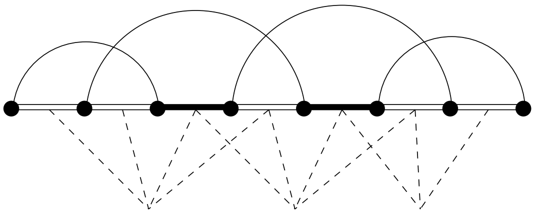


Abbildung 3.6

Die Selbstenergie nimmt insgesamt folgende Form an:

$$\mathbf{\Sigma} = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \mathbf{\Sigma}_n \tag{3.10}$$

In der folgenden Tabelle sind nochmals die ersten vier Laces angegeben, wobei die Korrelationslinien zu Systemen zusammengefasst wurden, die paarweise Ungleichheit bedingen.

Lace	Diagramm
$\mathbf{\Sigma_1}$	
$\mathbf{\Sigma_2}$	
$\mathbf{\Sigma_3}$	
$\mathbf{\Sigma_4}$	

In den aufgeführten Diagrammen, ebenso wie in höheren Diagrammen, reichen die Korrelationen jeweils nur maximal bis zum drittnächsten Teilweg. Diese Eigenschaft kann mittels der im nächsten Abschnitt besprochenen algebraischen Lace-Entwicklung verstanden werden. Die einzelnen Beiträge $\boldsymbol{\Sigma_n}$ zeigen ein charakteristisches dimensionales Verhalten, das eine Vernachlässigung bestimmter Beiträge erlaubt. Dieses Verhalten wird in Abschnitt (3.4) untersucht.
Insbesondere verschwinden in unendlichen Dimensionen alle Beiträge bis auf $\boldsymbol{\Sigma_1}$.
Es gilt in dieser Näherung

$$\breve{\boldsymbol{G}} = (\boldsymbol{1} - \boldsymbol{g} + \langle \boldsymbol{G} \rangle)^{-1} \tag{3.11}$$

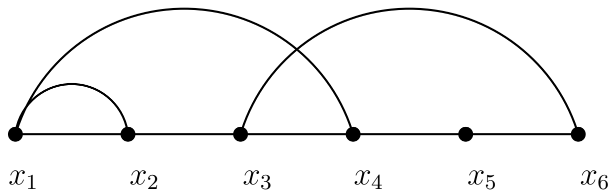
bzw. mit (3.6)

$$\boldsymbol{G} = \boldsymbol{g} + \boldsymbol{g}\boldsymbol{G} - \langle \boldsymbol{G} \rangle \, G \tag{3.12}$$

Diese Gleichung ist äquivalent zu Gl.(2.23), die bei der CPA-Herleitung benutzt wurde.

3.3 Die algebraische Lace-Entwicklung

Die algebraische Lace-Entwicklung, die von Brydges und Spencer gefunden wurde, basiert auf der **Lace-Abbildung** $\ell(\Gamma)$. Hierbei bezeichnet Γ einen Graphen. In diesem Zusammenhang ist der Begriff "Graph" abstrakt als *Menge von Kanten* zu verstehen. Der Begriff *Kante* bezeichnet wiederum die Übereinstimmung von zwei Punkten. Der folgende Graph besteht also aus den Kanten (x_1,x_2),(x_1,x_4) und (x_3,x_6).



Die Lace-Abbildung ordnet nun jedem Graphen eindeutig einen reduzierten Graphen $\ell(\Gamma) \subseteq \Gamma$ zu. Dies geschieht folgendermaßen:

Seien bereits $(s_1, t_1), ..., (s_k, t_k) \in \Gamma$ ausgewählt.

(a) Gibt es Kanten $(s, t) \in \Gamma$ mit $\boxed{s < t_k < t \quad (*)}$, 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 $\boxed{t_k \leq s \quad (\dagger)}$, so wähle diejenigen mit minimalem $s \geq t_k$ und unter diesen 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 zu Schritt (a) zurück.

(c) Das Verfahren endet, wenn es keine Kante $(s, t) \in \Gamma$ mit $(*)$ oder $(\dagger)$ mehr gibt.

Der reduzierte Graph $\ell(\Gamma)$ ist die zu Γ gehörende *Lace*. Welche Graphen stellen nun Laces dar, also für welche gilt $\ell(\Gamma) = \Gamma$?. Diese Frage soll nun geklärt werden, wobei die Betrachtungen sich auf *zusammenhängende* Graphen beschränken, da die Verallgemeinerung auf Graphen mit mehreren Zusammenhangskomponenten trivial ist.
Die einfachste Lace besteht nur aus einer Kante:

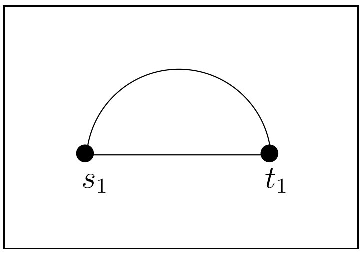


Abbildung 3.7

Die nächste Lace erhält man durch Hinzufügen einer Kante, die durch ℓ nicht gelöscht wird und auch nicht zur Löschung der bereits bestehenden Kante führt. Offenbar muß dafür $s_1 < s_2 < t_1 < t_2$ gelten.

Wäre z.B. $s_2 < s_1 < t_1 < t_2$, so würde (s_1, t_1) gelöscht.

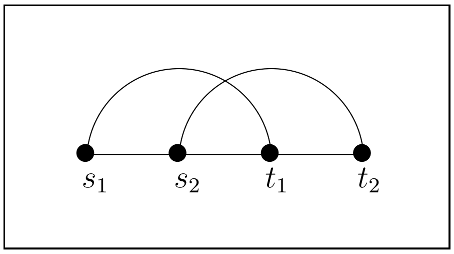


Abbildung 3.8

Für die dritte Kante muß offenbar $s_3 < t_2 < t_3$ gelten. Für die Relation zwischen t_1 und s_3 gibt es aber zwei Möglichkeiten, nämlich $t_1 < s_3$ und $t_1 = s_3$. $t_1 > s_3$ scheidet aus, da dann (s_2, t_2) zugunsten von (s_3, t_3) wegfallen würde.

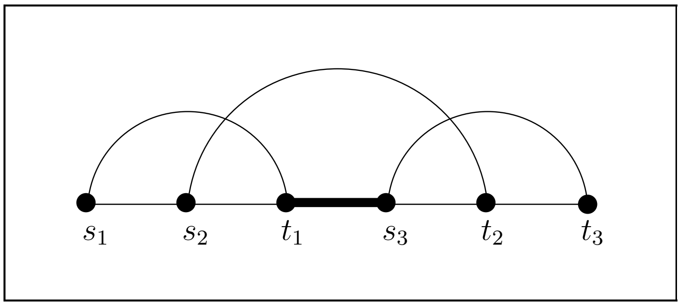


Abbildung 3.9

Die dicke Linie repräsentiert wie in Abschnitt 3.2, daß t_1 und s_3 auch übereinstimmen können, dann aber der Weg zwischen ihnen zur Länge Null zusammenfällt.
Im Weiteren hat man immer (s_{i+1}, t_{i+1}) so zu wählen, daß $s_{i+1} < t_i < t_{i+1} \wedge t_{i-1} \leq s_{i+1}$ gilt. Damit ergibt sich also diagrammatisch folgende Grundstruktur der höheren Laces:

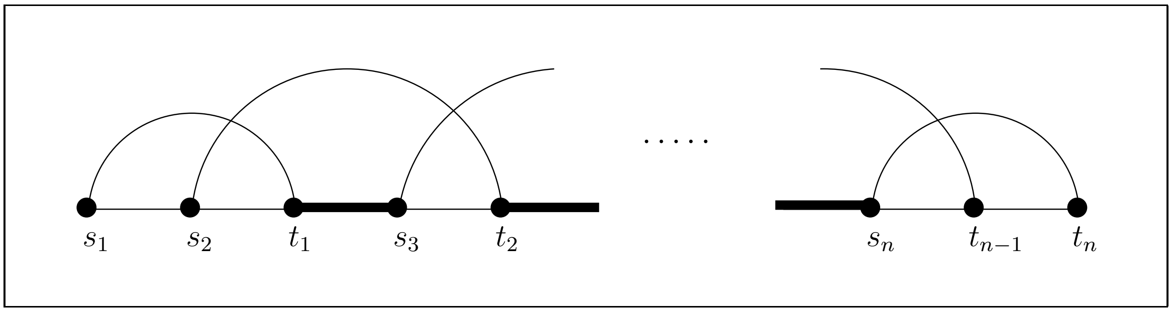


Abbildung 3.10

Um die vollen Diagramme aus den Laces zurückzugewinnen, müssen sämtliche Wege von einem Punkt zum im Graphen benachbarten Punkt mittels sämtlicher Laces (auch der nicht-zusammenhängenden!) voll und rekursiv renormiert werden. Ein Beispiel soll dies verdeutlichen: Man betrachte z.B. im zweiten Lace-Graphen den Weg $[s_2 \to t_1]$. Hier sind nun alle möglichen Laces einzusetzen. Mit diesen ist wiederum genauso zu verfahren.

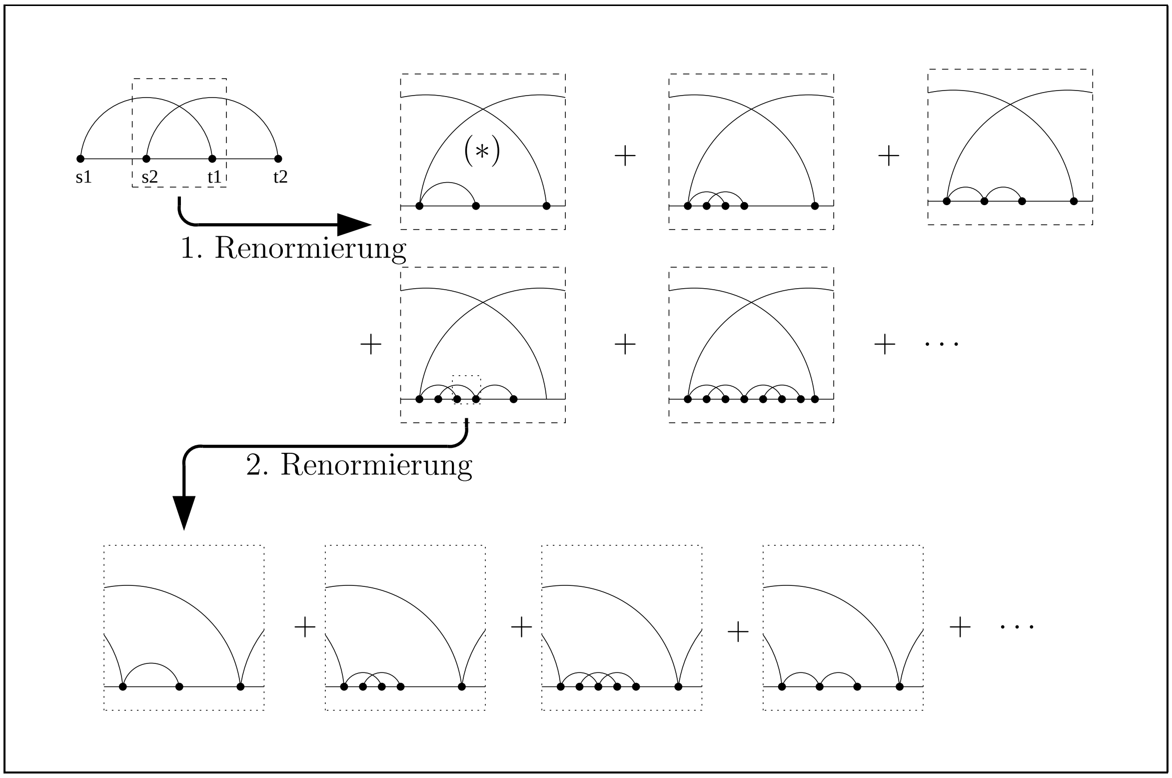


Abbildung 3.11

An dieser Stelle soll noch eine Sprechweise definiert werden. Der mit $(*)$ gekennzeichnete Prozess wird charakterisiert durch: "*Die zweite Lace wird bei s_2 mit der ersten Lace renormiert.*"

Man kann offenbar durch Renormieren nicht alle Diagramme wiedergewinnen, die durch die Lace-Abbildung reduziert wurden, nämlich all jene nicht, bei denen sich Kanten über verschiedene Teilwege innerhalb der zugehörigen Lace erstrecken.

Man könnte annehmen, daß innerhalb einer Lace nun *alle* möglichen Kombinationen solcher Kanten zu ergänzen sind. Dies ist jedoch nicht so, wie die folgende Überlegung anhand der dritten Lace zeigt.

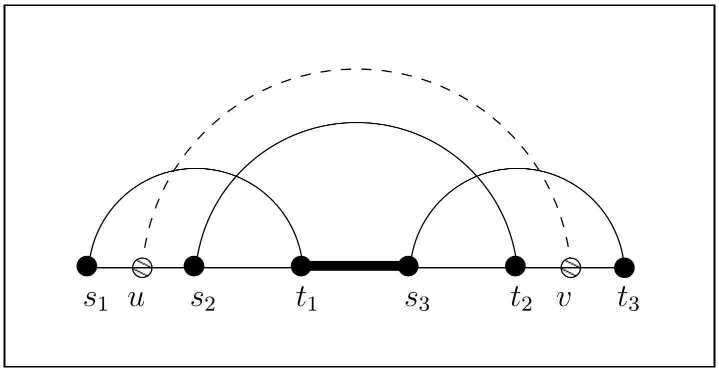


Abbildung 3.12

Würde man eine Kante (u, v) hinzufügen, so würde diese durch die Lace-Abbildung nicht entfernt, sondern statt ihrer die Kante (s_2, t_2). Das Ergebnis wäre - in diesem Fall - topologisch gesehen wieder die dritte Lace; man kann für höhere Laces auch Beispiele konstruieren, wo gar auf eine andere Lace abgebildet wird. Der entscheidende Punkt ist, daß eine Kante, die Bestandteil des ursprünglichen Lace-Graphen war, durch den Prozess entfernt wird. Es ist also nur sinnvoll solche Kanten hinzuzufügen, die selber durch die Lace-Abbildung wieder entfernt würden. Diese Kanten in ihrer Gesamtheit kann man im Lace-Graphen durch Korrelationslinien zwischen den Teilwegen kennzeichnen.
Aus der Struktur der Laces ergibt sich nun auch die früher festgestellte Eigenschaft, daß die Korrelationslinien sich maximal bis zum drittnächsten Teilweg erstrecken:

- In einem Lace-Graphen erstreckt sich eine Kante (s, t) über maximal drei Teilwege.

- Eine (hypothetische) Korrelationslinie zu einem viertnächsten Teilweg würde Kanten (u_i, v_i) repräsentieren, für die $u_i < s < t < v_i$ gilt.

- Die Lace-Abbildung würde die Kante (s, t) zugunsten einer der Kanten (u_i, v_i) entfernen.

Bezeichnet man nun einen renormierten Teilweg durch einen Doppelstrich, bzw. durch einen dicken Strich, wenn der Teilweg auch zur Länge Null zusammenfallen kann, und zeichnet unter Beachtung der oben erläuterten Einschränkung alle Korrelationslinien ein, so ergibt sich für die Laces das aus Abschnitt (3.2) bekannte Erscheinungsbild.

3.4 Das dimensionale Verhalten der Laces

Da die CPA die Eigenschaft besitzt, im Grenzfall unendlicher Dimensionen exakt zu sein, ist für eine Erweiterung eine Entwicklung in der inversen Dimension (D^{-1}) ein möglicher Ausgangspunkt. Hierzu muss das dimensionale Skalierungsverhalten der einzelnen Laces bestimmt werden.

Hierzu ist zunächst festzustellen, daß in einem einfach hyperkubischen Gitter die Anzahl von Gitterplätzen im Abstand δ vom Ursprung im Limes hoher Dimensionen wie

$$\begin{aligned}\sum_{\{x;|x|=\delta\}} &= 2^{\delta}\binom{D}{\delta} + \mathcal{O}(D^{\delta-1}); \qquad D \geq \delta \\ &\overset{D\to\infty}{\sim} D^{\delta}\end{aligned} \tag{3.13}$$

skaliert. Hierbei bezeichnet $|\cdots|$ die *Betragssummennorm.*
Weiterhin ist das Skalenverhalten des Propagators wichtig. Dieser skaliert wie

$$G_{0x} \sim D^{-\frac{1}{2}|x|} \tag{3.14}$$

Eine Begründung dieses Skalierungsverhaltens findet sich z.B. bei [Mie90]. An diesem Verhalten ändern in führender Ordnung auch räumliche Restriktionen nichts, da diese niemals von einer niedrigeren Ordnung in $D^{-\frac{1}{2}}$ sind.
Somit ergibt sich für die erste Lace folgendes dimensionale Verhalten:

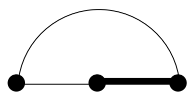


Abbildung 3.13

$$\Sigma_1 \sim G_{00} \sim D^0 \tag{3.15}$$

Diese ist also in beliebiger Dimension zu berücksichtigen.
Die zweite Lace zeigt demgegenüber ein Verhalten, daß erst in endlichen Dimensionen zu einem Beitrag führt.

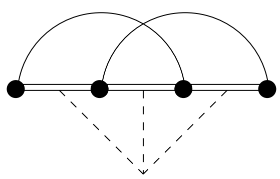


Abbildung 3.14

$$\Sigma_2 \sim \sum_{|x|\neq 0} G_{0x}G_{x0}G_{0x} \sim \sum_{\delta=1}^{\infty} D^{\delta} D^{-\frac{3}{2}\delta} \sim D^{-\frac{1}{2}} \tag{3.16}$$

Hierbei wurde im letzten Schritt die Summe durch den ersten Summanden ersetzt, was im Limes hoher Dimensionen statthaft ist.
Die Korrelationslinien sind für das dimensionale Verhalten in führender Ordnung hier wie auch im Folgenden irrelevant. Wie bereits erläutert würde eine Berücksichtigung der Korrelationen zu mindestens einer weiteren Kante führen. Dies bedeutet allerdings unweigerlich eine höhere Ordnung in $D^{-\frac{1}{2}}$, wie nun gezeigt werden soll.
Man betrachte das Diagramm, daß in niedrigster Ordnung durch Berücksichtigung der Korrelationen zwischen erstem und zweitem Teilweg innerhalb von Σ_2 entsteht:

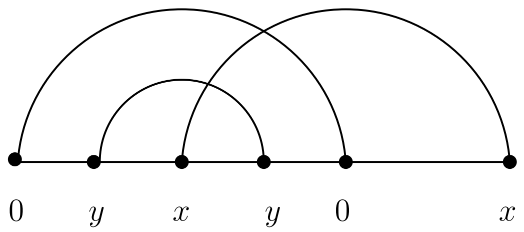


Abbildung 3.15 Einfachste Korrektur durch Korrelationen

Der Beitrag führender Ordnung ergibt sich, wenn 0 und y einerseits, sowie x und y andererseits *nächste Nachbarn* sind. Daraus folgt dann, daß 0 und x übernächste Nachbarn sind.
Das sich hieraus ergebende Verhalten ist das folgende:

$$\begin{aligned} &\sum_{|y|=1} \sum_{|x-y|=1} G_{0y} G_{yx} G_{xy} G_{y0} G_{0x} \\ &\overset{D\to\infty}{\sim} D^2 D^{-\frac{4}{2}} D^{-1} = D^{-1} \end{aligned} \tag{3.17}$$

Dieser Beitrag ist also schon in der nächsten Ordnung zu berücksichtigen! Wie verhalten sich nun die Korrelationen zwischen zweitem und drittem sowie zwischen erstem und drittem Teilweg?

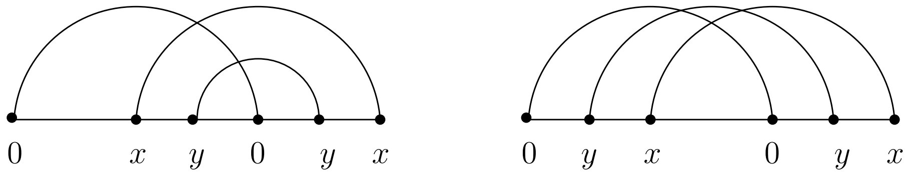


Abbildung 3.16

Diese haben das gleiche dimensionale Verhalten. Mehr noch, sie liefern sogar *exakt* den gleichen Beitrag. Dies erkennt man, wenn man die entsprechenden Terme in Indexschreibweise aufschreibt:

$$G_{0x}G_{xy}G_{y0}G_{0y}G_{yx}$$

$$\text{bzw.} \qquad (3.18)$$

$$G_{0y}G_{yx}G_{x0}G_{0y}G_{yx}$$

Dies sind die gleichen Faktoren wie in (3.17), nur jeweils in einer anderen Reihenfolge! Zwar ist gegebenenfalls z.B. G_{ij} durch G_{ji} zu ersetzen, dies ist jedoch aufgrund der Inversions- und Translationssymmetrie des Gitters unerheblich. Dieselben Faktoren tauchen auch bei der dritten Lace nochmals auf. Diese beinhaltet zwei Anteile, die getrennt betrachtet werden müssen. Der erste Anteil ist diagonal im Ortsraum:

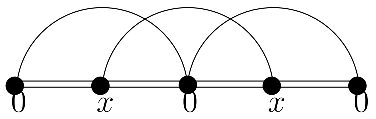


Abbildung 3.17

Im ersten Fall ergibt sich nach den Überlegungen zur zweiten Lace sofort

$$\begin{aligned} \Sigma_3^{(1)} \quad &\sim \quad \sum_{|x|\neq 0} G_{0x}G_{x0}G_{0x}G_{x0} \\ &\overset{D\to\infty}{\sim} \quad \sum_{\delta=1}^{\infty} D^{\delta} D^{-\frac{4}{2}\delta} \approx D^{-1} \end{aligned} \qquad (3.19)$$

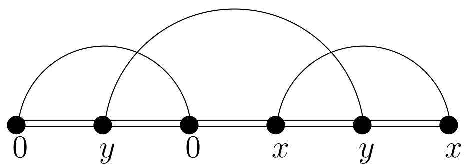


Abbildung 3.18

Im zweiten Fall ist einerseits eine zusätzliche Gitterplatzsummation auszuführen, andererseits tritt eine weitere Propagation auf. Der führende Beitrag ergibt sich, wenn $|x - y| = |y| = 1$ und $|x| = 2$ ist. Hierbei stellt sich die Frage, inwieweit die Eigenschaft, nächster Nachbar von y zu sein *und* gleichzeitig übernächster Nachbar des

Ursprungs, die Summation bezüglich x einschränkt. Hierzu mache man sich klar, daß y nächster Nachbar des Ursprungs ist. Somit sind alle nächsten Nachbarn von y übernächste Nachbarn des Ursprungs, mit Ausnahme natürlich des Ursprungs selber. Diese Einschränkung ist allerdings von der relativen Ordnung D^{-1} (von $2D$ nächsten Nachbarn wird einer ausgenommen) und kann vernachlässigt werden. Dann ergibt sich also für den zweiten Anteil der dritten Lace folgendes dimensionale Verhalten:

$$\begin{aligned} \Sigma_3^{(2)} \quad &\sim \quad \sum_{|x|\neq 0} \sum_{\substack{|y|\neq 0 \\ |x-y|\neq 0}} G_{0x}G_{x0}G_{0y}G_{yx}G_{xy} \\ &\overset{D\to\infty}{\sim} \quad D^2 D^{-\frac{4}{2}} D^{-1} = D^{-1} \end{aligned} \tag{3.20}$$

In führender Ordnung skalieren also beide Beiträge der dritten Lace gleich!
Die in (3.20) auftretenden Faktoren sind wiederum dieselben wie in (3.17) und (3.18), wiederum in anderer Reihenfolge. Dies bedeutet, daß auch hier der Beitrag in beliebiger Genauigkeit der gleiche ist. In Gitterplatzdarstellung sehen die entsprechenden Terme auch genau gleich aus, nur daß die Teilwege in anderer Reihenfolge durchlaufen werden, wie die folgende Abbildung verdeutlicht:

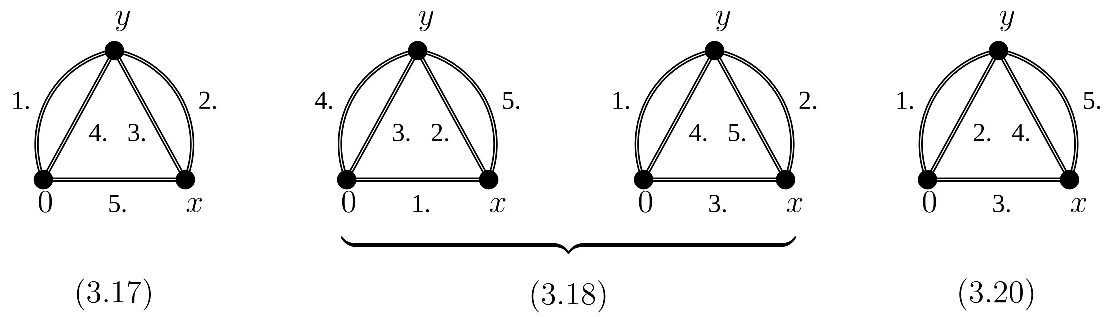


Abbildung 3.19

Da gleiche Gitterplatzdarstellung zweier Diagramme hinreichend für gleiches Skalierungsverhalten ist, sind Betrachtungen wie diese höchst instruktiv. Es wäre auch möglich, eine Lace in Gitterplatzdarstellung aufzuschreiben und *hieraus* alle korrespondierenden Indexdarstellungen abzuleiten.
Die vierte Lace liefert bereits vier Beiträge, deren Skalierungsverhalten einzeln untersucht werden muß.

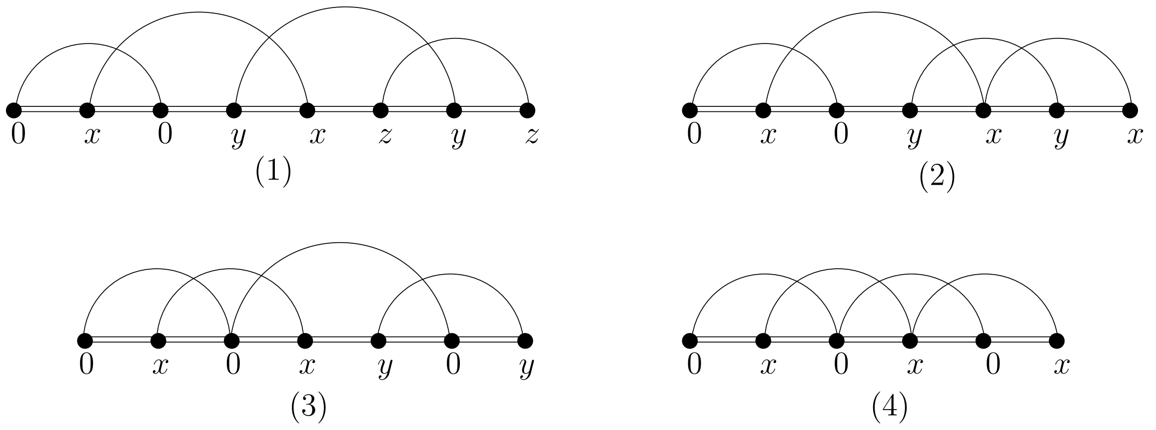


Abbildung 3.20

Das dimensionale Verhalten des Beitrags (4) lässt sich leicht bestimmen. Hier gilt offenbar

$$\Sigma_4^{(4)} \sim \sum_{|x|\neq 0} G_{0x}G_{x0}G_{0x}G_{x0}G_{0x} \sim D^{-\frac{3}{2}} \tag{3.21}$$

Die Beiträge (2) und (3) skalieren aufgrund ihrer Symmetrie beide gleich. Man erkennt, daß es sich bei ihnen im Grunde um den zweiten Beitrag zur dritten Lace $\Sigma_3^{(2)}$ handelt, in dem jeweils noch eine (NN-)Propagation hinzugefügt wurde. Somit skalieren diese wie:

$$\begin{aligned} \Sigma_4^{(2)} &\sim \Sigma_4^{(3)} \sim \Sigma_3^{(2)} D^{-\frac{1}{2}} \\ &\sim D^{-\frac{3}{2}} \end{aligned} \tag{3.22}$$

Für die Untersuchung des Beitrags (1) ist eine **Gitterplatzdarstellung** des Diagramms hilfreich.

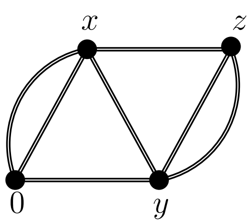


Abbildung 3.21 $\Sigma_4^{(1)}$ in Gitterplatzdarstellung

Wenn man zudem noch mit für Nächste-Nachbar-Paaren (0,x),(x,y) und (y,z) exemplarische Koordinaten aufstellt, so ergibt sich folgende Koordinatenschreibweise:

$$\begin{array}{rcl} 0 & = & (0,0,\cdots 0 \cdots 0 \cdots 0 \cdots, 0,0) \\ \vec{x} & = & (0,0,\cdots 0 \cdots 1 \cdots 0 \cdots, 0,0) \\ \vec{y} & = & (0,0,\cdots 1 \cdots 1 \cdots 0 \cdots, 0,0) \\ \vec{z} & = & (0,0,\cdots 1 \cdots 1 \cdots 1 \cdots, 0,0) \\ & & \qquad\quad\ \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \\ & & \qquad\quad\ i \quad\ j \quad\ k \end{array} \tag{3.23}$$

Hier können nun die Summen über i,j und k unabhängig laufen. Es sind dann sowohl (0,y) als auch (x,z) Paare von übernächsten Nachbarn. Dann erhält man folgendes dimensionale Verhalten:

$$\begin{aligned} \Sigma_4^{(1)} &\sim \sum_{(0,x)NN} \sum_{(x,y)NN} \sum_{(y,z)NN} G_{0x}^2 G_{0y} G_{yx} G_{xz} G_{yz}^2 \\ &\sim D^3 D^{-\frac{2}{2}} D^{-1} D^{-\frac{1}{2}} D^{-1} D^{-\frac{2}{2}} = D^{-\frac{3}{2}} \end{aligned} \tag{3.24}$$

Es skalieren also auch in der vierten Lace alle Anteile in führender Ordnung gleich!
Nach diesem Ergebnis liegt die Vermutung nahe, daß jeweils alle Anteile der n-ten Lace wie $D^{-\frac{n-1}{2}}$ skalieren. Diese Annahme soll nun mittels Induktion bewiesen werden.
Die Behauptung ist für $n \leq 4$ bereits gezeigt. Damit ist die Induktionsverankerung gegeben. Für den Induktionsschluß betrachte man Σ_n in Gitterplatzdarstellung.

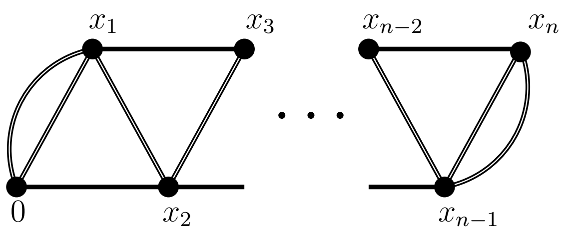


Abbildung 3.22 Σ_n in Gitterplatzdarstellung

Hier sind die im Diagramm diagonal verlaufenden Propagationen in führender Ordnung NN-Propagationen, die waagerecht verlaufenden in führender Ordnung Übernächste-Nachbar-Propagationen (sofern sie nicht zur Länge Null zusammenfallen).
Die Beiträge zu Σ_{n+1} lassen sich in zwei Untermengen aufteilen. Die erste geht aus

Beiträgen zu Σ_n ohne zusätzliche Gitterplatzsummation nur durch Hinzunahme einer weiteren Propagation hervor.

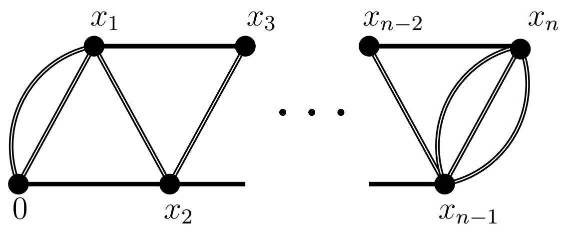


Abbildung 3.23 Die erste Gruppe von Beiträgen zu Σ_{n+1}

Diese bedingt, da sie in führender Ordnung zu nächsten Nachbarn führt, einen zusätzlichen Faktor $D^{-\frac{1}{2}}$, womit diese Beiträge also wie

$$\begin{aligned}\Sigma^{\mathrm{I}}_{n+1} &\sim \Sigma_n D^{-\frac{1}{2}} \\ &\sim D^{-\frac{n}{2}}\end{aligned} \tag{3.25}$$

skalieren.

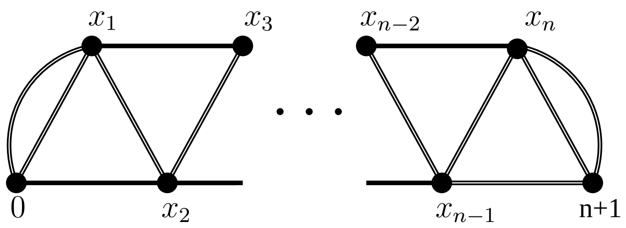
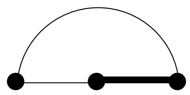
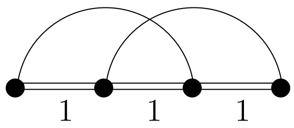
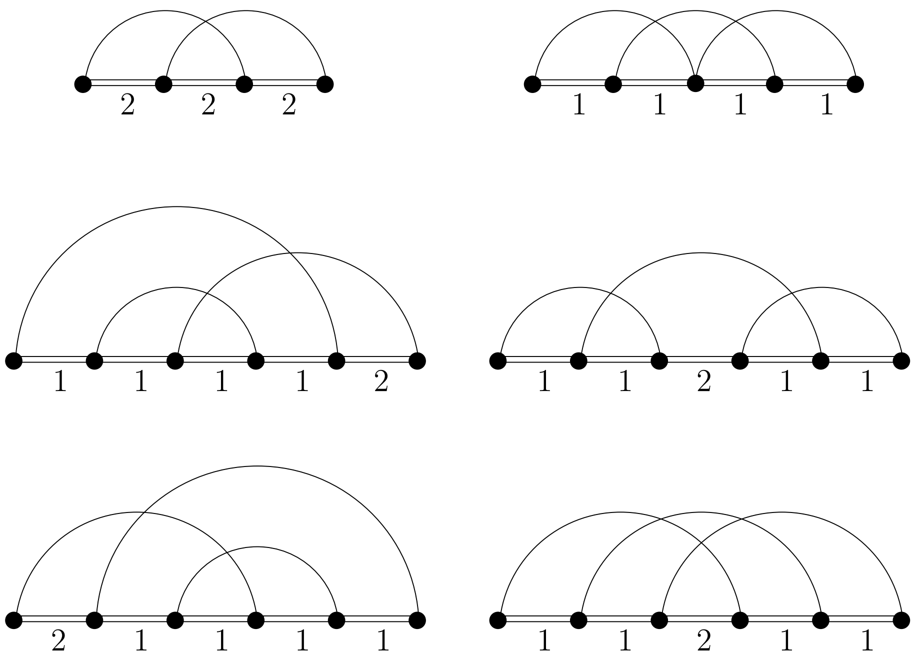


Abbildung 3.24 Die zweite Gruppe von Beiträgen zu Σ_{n+1}

Bei der zweiten Gruppe tritt gegenüber der ersten eine weitere Gitterplatzsummation hinzu. Außerdem fallen zwei Propagatoren $G_{n-1,n}$ weg, stattdessen treten zwei Propagatoren $G_{n,n+1}$ hinzu, diese führen jedoch auch zu nächsten Nachbarn, somit ändert sich hierdurch die D-Abhängigkeit nicht. Des Weiteren tritt ein Propagator $G_{n-1,n+1}$ hinzu, der in führender Ordnung zu übernächsten Nachbarn führt. Also ergibt sich insgesamt:

$$\begin{aligned}\Sigma^{\mathrm{II}}_{n+1} &\sim \Sigma^{\mathrm{I}}_{n+1} D\, D^{-1} \\ &\sim D^{-\frac{n}{2}}\end{aligned} \tag{3.26}$$

Zum Abschluß sollen nochmals bis zur Ordnung D^{-1} die zu berücksichtigenden Beiträge der einzelnen Ordnungen aufgeführt werden. Die Zahlen unter den Teilwegen geben jeweils den Abstand zwischen Anfangs- und Endpunkt an.

Ordnung	Diagramme
D^0	
$D^{-\frac{1}{2}}$	
D^{-1}	

Es soll nochmals betont werden, daß das ermittelte dimensionale Verhalten nur die jeweils niedrigste Ordnung in $D^{-\frac{1}{2}}$ darstellt, und auch dies nur im Grenzwert hoher Dimension, da das Skalierungsverhalten (3.14) des Propagators nur in hohen Dimensionen in der angegebenen Form gilt.

Kapitel 4

Die Lace-Abbildung für das allgemeine Streuproblem

Das allgemeine Streuproblem lässt sich nicht sinnvoll auf einen SAW abbilden, da die Propagation des Elektrons keinerlei Restriktionen unterliegt. Dennoch wird in diesem Kapitel eine Methode vorgestellt, wie mittels der Lace-Entwicklung, die ja ursprünglich für (schwach) selbstvermeidende Wege entwickelt wurde, eine Resummation der Selbstenergie-Diagramme vorgenommen werden kann. Hierzu muß allerdings die Lace-Abbildung durch einen Zusatz modifiziert werden.

4.1 Vergleich von Streuproblem und Self-Avoiding Walk

Als Vorüberlegung betrachte man ein Diagramm aus der T-Matrix des SAW. Die Anzahl der Plätze ist hier zur besseren Überschaubarkeit niedrig gehalten.

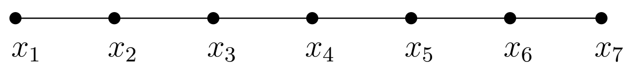


Abbildung 4.1

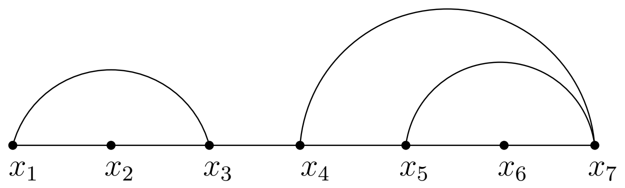
Hier führt, wie in Abschnitt 3.1 dargelegt wurde, die paarweise Ungleichheit der Gitterplätze zu einem Faktor

$$\prod_{\substack{i,j=1 \\ i<j}}^{7} (1 - \delta_{ij}) \tag{4.1}$$

Hier wie im Folgenden ist δ_{ij} als verkürzte Schreibweise für $\delta_{x_i x_j}$ zu verstehen. Es entstehen aus (4.1) durch Ausmultiplizieren *alle* möglichen Kantenkombinationen, jeweils mit einem Vorfaktor

$$(-1)^{\#\mathrm{Kanten}}$$

z.B.



$$(-1)^3 \delta_{13}\delta_{47}\delta_{57}$$

Insbesondere entstehen hier Gruppen von Graphen, die dieselbe Topologie haben, wie z.B.:

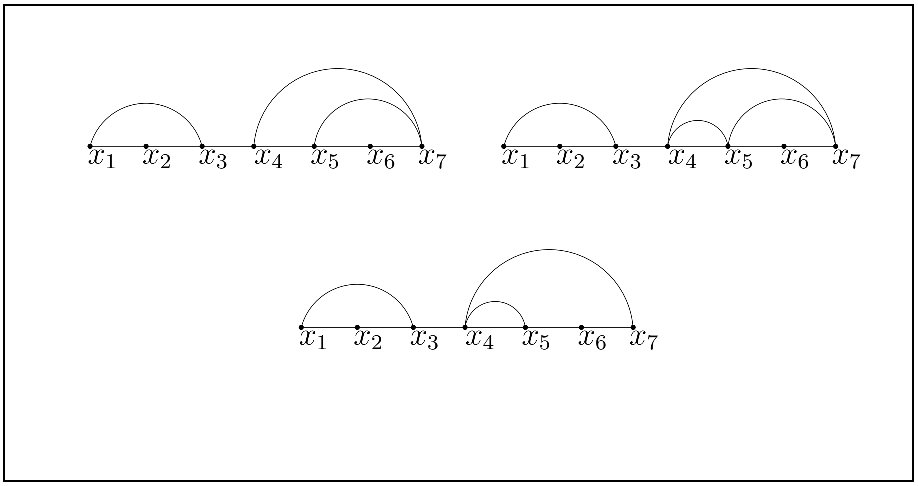


Abbildung 4.2

Für die Graphen Γ, die im SAW auftreten, ist die Lace-Abbildung $\ell(\Gamma)$ definiert, die im Abschnitt (3.3) vorgestellt wurde.

Im Vergleich hierzu gibt es im Random Walk Selbstüberschneidungen, die bei der Konfigurationsmittlung zu berücksichtigen sind. Man kann sich aber nun die Tatsache zunutze machen, daß eine Selbstüberschneidung einerseits und ein Ausschluß derselben andererseits *topologisch äquivalente* Diagramme erzeugen. Die zugehörigen Beiträge unterscheiden sich nur (evtl.) im Vorzeichen und in der Abhängigkeit von der Konzentration.
Dies bedeutet zunächst einmal, daß durch Einschluß von Diagrammen mit Selbstüberschneidung keine neuen Topologien hinzukommen. Somit kann man grundsätzlich die Lace-Abbildung auch auf diese Diagramme anwenden. Es wird sich allerdings zeigen, daß sinnvollerweise bestimmte Kantenkombinationen von vornherein fortzulassen sind.
Ein Beispieldiagramm aus der T-Matrix des Random Walk ist

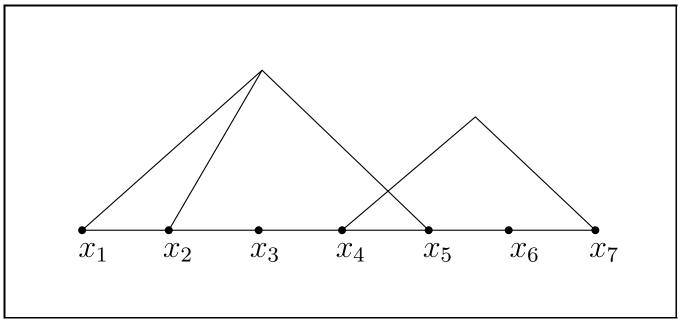


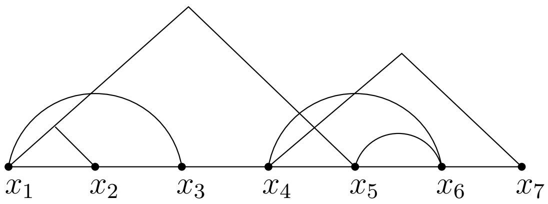
Abbildung 4.3

Man hat es hier mit vier Gruppen von in positionsmäßig identischen Gitterplätzen zu tun, nämlich $\{x_1, x_2, x_5\}$, $\{x_3\}$, $\{x_4, x_7,\}$ sowie $\{x_6\}$. Stellen die eingezeichneten Linien die Mehrfachstreuungen vollständig dar, so ist festzulegen, daß die Positionen dieser Gruppen paarweise verschieden sein müssen.
Das Diagramm ist vollständig charakterisiert, wenn innerhalb einer Mehrfachstreuung die Übereinstimmung von einem Platz mit genau einem anderen festgelegt ist, sowie die Nichtübereinstimmung eines Platzes aus der Gruppe mit einem Platz aus einer anderen Gruppe. D.h. in diesem Fall reicht z.B.

$$\delta_{12}\delta_{15}\delta_{47}(1-\delta_{13})(1-\delta_{14})(1-\delta_{56})(1-\delta_{34})(1-\delta_{36})(1-\delta_{46}) \tag{4.2}$$

Es ist unnötig, z.B. einen Faktor $\delta_{25}(1-\delta_{35})$ hinzuzufügen. Man sieht hier im Unterschied zum Self-Avoiding Walk, daß man für die vollständige Charakterisierung des Diagramms *nicht* alle möglichen Kantenkombinationen benötigt. Aus dieser Erkenntnis folgt umgekehrt, daß eine Resummation aller möglichen Kantenkombinationen in diesem Fall zu Überzählungen führt. Man wird sich auf *eine* Schreibweise im Falle von Mehrfachstreuungen festlegen müssen.

Diese Schreibweise wird dadurch festgelegt, daß man - wie beim SAW - jede Lace mit allen anderen Laces renormiert. Das bedeutet also, daß bei mehreren möglichen Schreibweisen, von denen eine als Renormierung einer Lace interpretiert werden kann, diese Schreibweise benutzt wird, *alle anderen sind auszuschließen*.
Durch das Ausmultiplizieren der $(1-\delta_{ij})$-Terme in (4.2) entstehen Diagramme wie das folgende:



$(-1)^3\delta_{12}\delta_{13}\delta_{15}\delta_{46}\delta_{47}\delta_{56}$

Abbildung 4.4

Die Lace-Abbildung reduziert dies auf

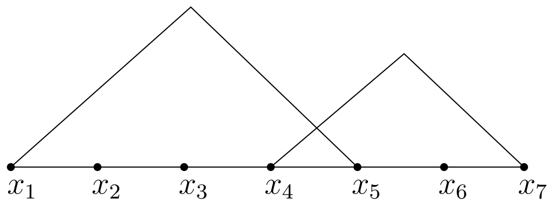


Abbildung 4.5

Die Kanten (1,2),(1,3),(5,6), die durch die Lace-Abbildung verloren gegangen sind, lassen sich durch Renormieren wiedergewinnen, die Lage von (4,6) lässt dies nicht zu.
Allgemein kann wie in der Lace-Abbildung für den SAW jedes Diagramm aus der ihm zugeordneten Lace durch Renormieren einerseits und Beachtung von Korrelationen, die durch die LA wegfallen, andererseits wiedergewonnen werden.

4.2 Auswahlregel bei Mehrfachstreuung

Es ist nun eine Regel, die die Schreibweise von Diagrammen bei Mehrfachstreuungen festlegt, aufzustellen.
Stimmt ein Platz a_{n+1} mit einer Gruppe von Plätzen $\{a_1 \dots a_n\}$ einer Mehrfachstreuung überein, so ist dies durch eine Kante zwischen a_{n+1} und folgendem Platz auszudrücken:

O.B.d.A. existiert mindestens ein $a_i < a_{n+1}$. Wähle unter diesen zunächst das Größte, $a_{i,max}$. Wähle, wenn möglich, stattdessen das kleinste $a_i < a_{i,max}$, für das es keine Kantenmenge

$$\Gamma_b = \{(b_1, b_2), (b_3, b_4) \ldots (b_{m-1}, b_m)\} \subset \Gamma \backslash \{(a_i, a_j)\}; \quad b_{i+1} \leq b_i$$
$$\text{mit}$$
$$b_1 < a_i < b_m \quad \vee \quad a_i < b_1 < a_{i+1} < a_{n+1} < b_m \qquad (\star)$$

gibt.

Alle Diagramme, die nicht mit dieser Regel konform sind, sind auszuschließen.

Verbal bedeutet die Eigenschaft $(\star)$:
"Die Kanten (a_i, a_{i+1}) und (a_i, a_{n+1}) kreuzen beide (links oder rechts) Γ_b"

In beiden Fällen kann das Diagramm mit der Kante (a_i, a_{n+1}) statt $(a_{i,max}, a_{n+1})$ nicht als Renormierung einer Lace mit einer anderen interpretiert werden.
Anzumerken ist, daß die Kantenmenge Γ_b für den Fall $b_i = b_{i+1}$ keine Zusammenhangskomponente darstellt.
Das folgende Diagramm soll nochmals die Eigenschaft $(\star)$ illustrieren. Hierbei steht die "Klammer mit runden Ecken" () wahlweise für "Dach" oder "Bogen"

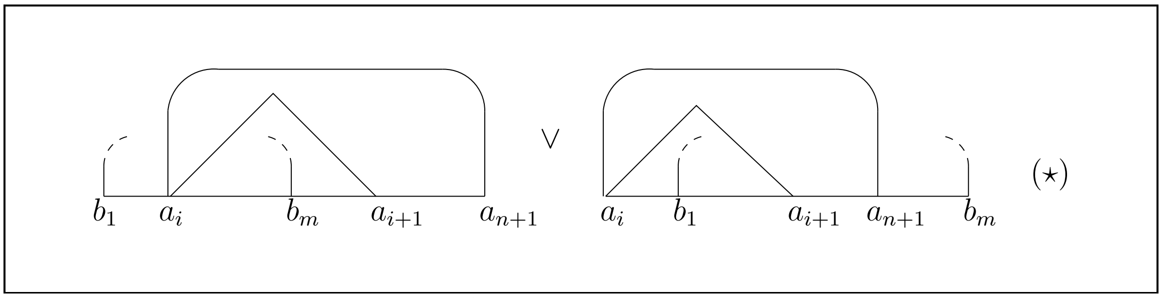


Abbildung 4.6

Es soll nochmals betont werden, daß für die geschilderte Ersetzung einer Kante die Plätze $a_1 \ldots a_n$ alle zu *einer* Mehrfachstreuung gehören müssen (d.h. also mittels "Dächern" verbunden). Man kann daher im folgenden Beispiel (b, c) durch (a, c) ersetzen, nicht aber (c, d) durch (a, d)!

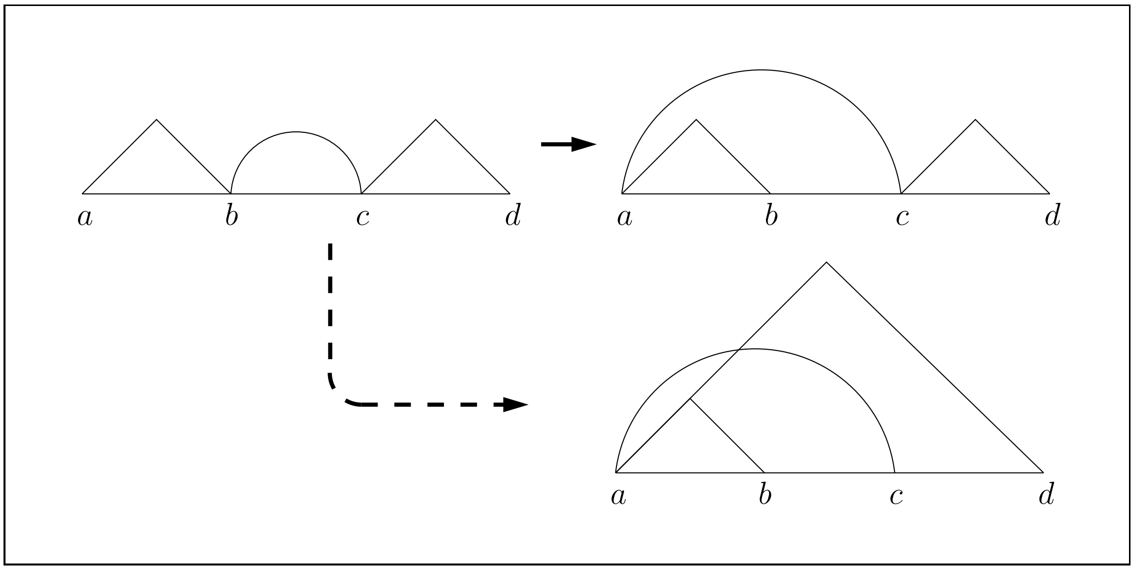
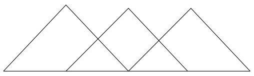
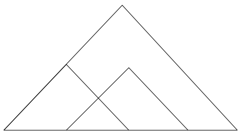
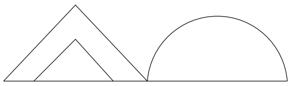
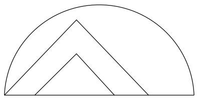
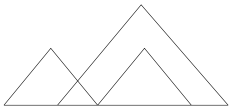
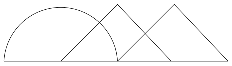
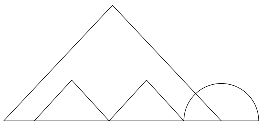
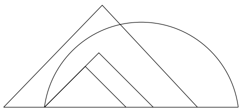
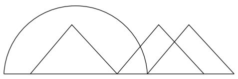
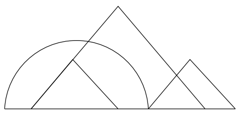
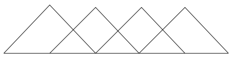
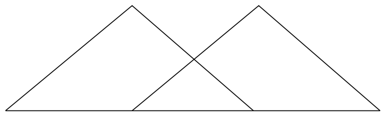


Abbildung 4.7

Die folgende Tabelle enthält Beispiele für das Umschreiben eines Diagrammes auf ein Äquivalent, das eine renormierte Lace darstellt. Teilweise können hier mehrere Kanten verschoben werden.

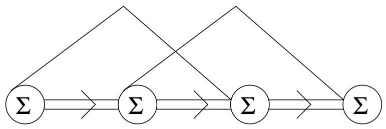
	$\rightarrow$		Σ_1 mit Σ_2 renormiert
	$\rightarrow$		Σ_1 mit Σ_1 renormiert
			kann nicht umgeschrieben werden
			kann nicht umgeschrieben werden
	$\rightarrow$		Σ_2 mit Σ_1 renormiert
	$\rightarrow$		$\Sigma_3^{(1)}$ mit Σ_1 renormiert
			kann nicht umgeschrieben werden

Man kann nun - unter Beachtung der aufgestellten Regel - alle Laces wie gewohnt renormieren. Man ersetzt z.B. das folgende Diagramm



$$V^4 g_{ij} g_{ji} g_{ij}$$

durch



$$(\Sigma G)_{ij} (\Sigma G)_{ji} (\Sigma G)_{ij} \Sigma$$

Allgemein kann man als Ausgangspunkt jeweils eine bestimmte Lace nehmen und erhält gegenüber dem SAW durch die Ersetzung

$$-\delta_{ij} \to -\delta_{ij} + \frac{1}{c}\delta_{ij} \tag{4.3}$$

(also "Bogen"→ "Bogen + Dach") alle Skelettdiagramme der entsprechenden Topologie. Hiervon fallen aber im Allgemeinen einige weg, nämlich jedes Diagramm, in dem keine Kantenmenge mit der Eigenschaft ($\star$) ein Umschreiben verhindert.
Die Ersetzung (4.3) ist in dieser einfachen Form nur möglich, wenn nur ein Potential sich von Null unterscheidet. Ansonsten wird jedem Anfangs- bzw. Endpunkt der Teilwege ein (komponentenabhängiger) Faktor $\Sigma^{(\alpha)}$ zugeordnet, jeder Gruppe von Punkten einer Mehrfachstreuung (wobei diese aus einem einzigen Punkt bestehen kann) wird ein Faktor c_α zugeordnet, anschließend wird über jede der Gruppen einzeln gemittelt. Diese kompliziertere Verfahrensweise soll aber zunächst außer Acht gelassen werden.

4.3 Alternative Herleitung der CPA

Aus der in 4.2 aufgestellten Vorschrift folgt z.B. auch sofort die - zunächst vielleicht unlogisch erscheinende - Asymmetrie zwischen dem zweiten und dritten Selbstenergieteil in der CPA-Gleichung (2.19). Dort wird die erste Lace berücksichtigt. Diese hat in der modifizierten Lace-Entwicklung zwei Beiträge. Deren Skelettdiagramme sind die folgenden:

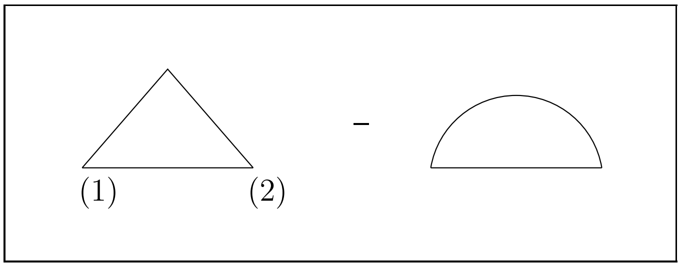


Abbildung 4.8

Man kann nun renormieren, indem man die Ersetzungen

$$V \to \Sigma \quad \text{und} \quad g \to G$$

vornimmt. Renormiert man jedoch an der mit (2) gekennzeichneten Stelle, so gilt für die erste Kante, die sich rechts von (2) anschließt (auch wenn Erweiterungen der Selbstenergie vorgenommen werden!), daß ihr linker Endpunkt immer von (2) nach (1) verschoben werden kann. Somit ist der Beitrag all dieser Diagramme Null mit Ausnahme des Diagramms, in dem keine Kante existiert, nämlich der Einfachstreuung V. Also ist der Beitrag der ersten Lace

$$\Sigma \langle \boldsymbol{G} \rangle V - \Sigma \langle \boldsymbol{G} \rangle \Sigma$$

was unmittelbar auf

$$\Sigma = cV + \Sigma \langle \boldsymbol{G} \rangle V - \Sigma \langle \boldsymbol{G} \rangle \Sigma$$

führt, was die Form (2.19) der CPA-Gleichung ist.

4.4 Erweiterung der CPA

Man kann sich leicht klarmachen, daß für alle höheren Laces die Ersetzung von V durch Σ immer statthaft ist. Dies liegt an der Struktur der Laces, die - abgesehen von der ersten - immer eine Überkreuzung beinhaltet, welche ein Umschreiben von Kanten aus der renormierenden Selbstenergie unmöglich macht. Es kann aber vorkommen, daß sich die Überkreuzung innerhalb des Skelettdiagramms teilweise auflösen lässt. Es reicht hier aber jeweils, die Eigenschaft ($\star$) anhand der Skelettdiagramme zu prüfen.

Die zweite Lace liefert vier Diagramme, die alle zu berücksichtigen sind:

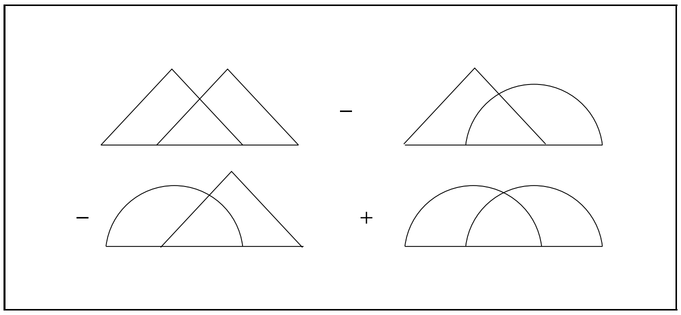


Abbildung 4.9 Beiträge durch Σ_2

$$\left(\frac{1}{c^2} - \frac{2}{c} + 1\right)(\Sigma G)_{ij}(\Sigma G)_{ji}(\Sigma G)_{ij}\Sigma_{jf}$$

Also ändert sich die Selbstkonsistenzgleichung zu

$$\Sigma_{if} = (cV + \langle \Sigma G \rangle V)\delta_{if} - \langle \Sigma G \rangle \Sigma_{if} + \left(\frac{1}{c^2} - \frac{2}{c} + 1\right) \sum_{j \neq i} (\Sigma G)_{ij}(\Sigma G)_{ji}(\Sigma G)_{ij}\Sigma_{jf}$$

Man beachte, daß die Korrektur im Limes $c \to 1$ verschwindet, sowie daß die Singularität bei $c = 0$ hebbar ist, da $\Sigma \sim c$.
Im Gegensatz zu (2.19) bezieht sich das Diagonalelement nun auf das Produkt von Σ und G, da Σ nun nicht mehr diagonal in Wannierdarstellung ist.
Vom ersten Anteil der dritten Lace tragen nicht alle Skelettdiagramme bei:

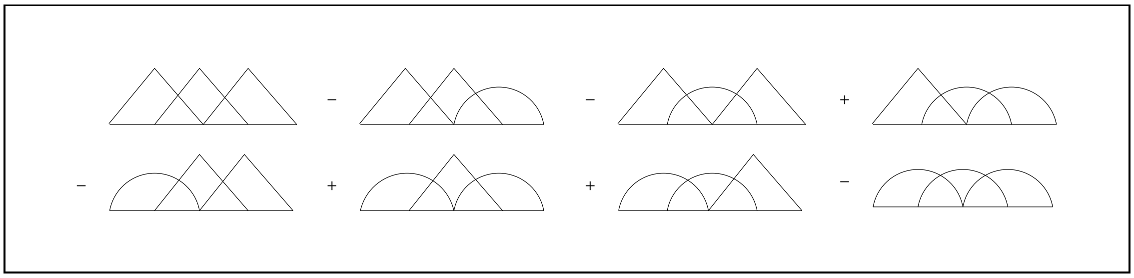


Abbildung 4.10 Beiträge durch $\Sigma_3^{(1)}$

Die ersten vier Diagramme liefern keinen Beitrag. Somit bleibt als Beitrag hier:

$$-\left(\frac{1}{c^2}-\frac{2}{c}+1\right)(\Sigma G)_{ij}(\Sigma G)_{ji}(\Sigma G)_{ij}(\Sigma G)_{ji}\Sigma_{if}$$

Wiederum verschwindet die Korrektur im Limes $c \to 1$. Der zweite Anteil der dritten Lace sowie der erste Anteil der vierten Lace liefern Skelettdiagramme, die alle beitragen. Die Beiträge sind

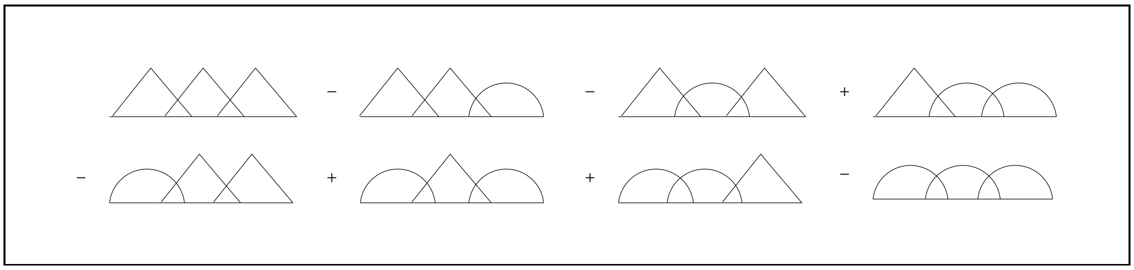


Abbildung 4.11 Beiträge durch $\Sigma_3^{(2)}$

$$\left(\frac{1}{c^3}-\frac{3}{c^2}+\frac{3}{c}-1\right)(\Sigma G)_{ij}(\Sigma G)_{ji}(\Sigma G)_{ik}(\Sigma G)_{kj}(\Sigma G)_{jk}\Sigma_{kf}$$

sowie

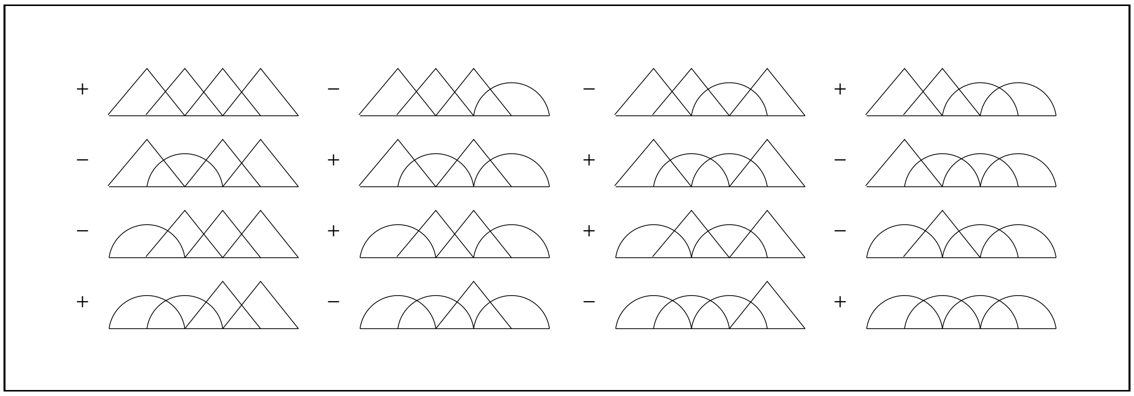


Abbildung 4.12 Beiträge durch $\Sigma_4^{(1)}$

$$\left(\frac{1}{c^4}-\frac{4}{c^3}+\frac{6}{c^2}-\frac{4}{c}+1\right)(\Sigma G)_{ij}(\Sigma G)_{ji}(\Sigma G)_{ij}(\Sigma G)_{ji}(\Sigma G)_{ij}\Sigma_{jf}$$

Das Verfahren kann auf beliebige Laces, auch mit Erweiterung durch Korrelationen zwischen den Teilwegen, angewandt werden. In den numerischen Simulationen dieser Arbeit wurden allerdings nur die Anteile der zweiten und dritten Lace sowie die erste Korrelation innnerhalb der zweiten Lace berücksichtigt.

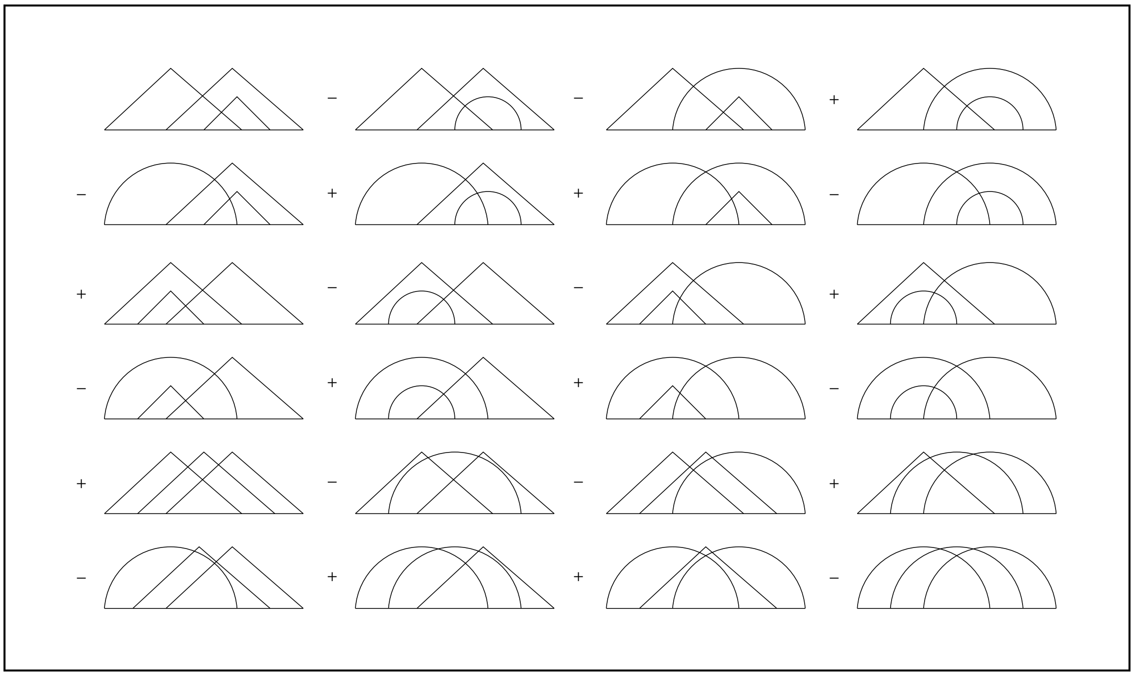


Abbildung 4.13 Beiträge durch Korrelationen innerhalb von Σ_2

Diese Korrelationen liefern jede nochmals den gleichen Beitrag wie $\Sigma_3^{(1)}$, insgesamt also:

$$3 \cdot \left(\frac{1}{c^4} - \frac{4}{c^3} + \frac{6}{c^2} - \frac{4}{c} + 1 \right) (\Sigma G)_{ij} (\Sigma G)_{ji} (\Sigma G)_{ij} (\Sigma G)_{ji} (\Sigma G)_{ij} \Sigma_{jf}$$

Vom Standpunkt einer Entwicklung in $D^{-\frac{1}{2}}$ wären auch, zusammen mit den Anteilen der vierten Lace, weitere Korrelationen innnerhalb der zweiten und dritten Lace zu berücksichtigen; die numerische Behandlung verkompliziert sich hierdurch deutlich.
An dieser Stelle soll darauf hingewiesen werden, daß *jede* Stufe der Erweiterung in den Limiten $c \to 0$ und $c \to 1$ verschwindet.
Im ersten Fall liegt dies daran, daß die höheren Laces mindestens wie $\mathcal{O}(c^2)$ skalieren, was gegenüber den führenden Termen in der CPA, die wie $\mathcal{O}(c)$ skalieren, zu vernachlässigen ist.

Im zweiten Fall ergibt sich das Verschwinden der Korrektur daraus, daß zunächst formal die Ersetzung

$$-\delta_{ij} \to -\delta_{ij} + \frac{1}{c}\delta_{ij}$$

bezüglich jeder Kante im Skelettdiagramm vorgenommen wird. Offenbar verschwinden die so entstehenden Terme für $c \to 1$. Zwar fallen nun aufgrund der in 4.2 formulierten Regel einige Skelettdiagramme weg; sie tun dies jedoch immer paarweise, da das Umschreiben für beide Arten von Kanten gleichermaßen möglich ist. D.h. wenn es möglich ist, einen "Bogen" zu ersetzen, ist es im korrespondierenden Diagramm (das zunächst einmal immer existiert!) möglich, das entsprechende "Dach" zu ersetzen. Da also immer paarweise Diagramme wegfallen, die sich im Limes $c \to 1$ gegenseitig aufheben, ist insgesamt auch nach Wegfall dieser Diagramme der richtige Grenzwert gegeben.

Man kann die vorgestellten Erweiterungen der CPA auch für ein System mit zwei explizit auftauchenden Konstituenten (d.h. $V_{1,2} \neq 0$) anwenden. Man hat in diesem Fall allerdings separate Gleichungen für die zwei Komponenten aufzustellen. Auch ist zu beachten, daß in diesem Fall die Beiträge durch Korrelationen einzeln zu behandeln sind. Hier liefern die Beiträge, die dem zweiten Diagramm in Abb.3.16 entsprechen, einen anderen Beitrag und müssen getrennt behandelt werden. Dies erkennt man, wenn man die Beiträge mit drei "Dächern" betrachtet:

$$\begin{aligned}
& \underbrace{\overline{(\Sigma G)_{ij}(\Sigma G)_{ik}} \cdot \overline{(\Sigma G)_{ji}(\Sigma G)_{jk}} \cdot \overline{(\Sigma G)_{kj}\Sigma_{kf}}}_{\Sigma_3^{(2)}} \\
= \; & \underbrace{\overline{(\Sigma G)_{ij}(\Sigma G)_{ik}} \cdot \overline{(\Sigma G)_{jk}(\Sigma G)_{ji}} \cdot \overline{(\Sigma G)_{kj}\Sigma_{kf}}}_{\text{Korrelation 1-2}} \\
= \; & \underbrace{\overline{(\Sigma G)_{ik}(\Sigma G)_{ij}} \cdot \overline{(\Sigma G)_{ji}(\Sigma G)_{jk}} \cdot \overline{(\Sigma G)_{kj}\Sigma_{kf}}}_{\text{Korrelation 2-3}} \\
\neq \; & \underbrace{\overline{(\Sigma G)_{ij}(\Sigma G)_{ij}} \cdot \overline{(\Sigma G)_{jk}(\Sigma G)_{jk}} \cdot \overline{(\Sigma G)_{kf}\Sigma_{kf}}}_{\text{Korrelation 1-3}}
\end{aligned}$$

Das entstehende Gleichungssystem lautet dann:

$$\begin{aligned}
\Sigma_{if}^{(1)} = &(V_1 + \langle\Sigma^{(1)}G\rangle V_1)\delta_{if} - \langle\Sigma^{(1)}G\rangle\Sigma_{if} \\
&+ (\Sigma^{(1)}G)_{ij}\left((\Sigma^{(1)}G)_{ij} - (\Sigma G)_{ij}\right)\left(\sum_{l=1}^{2} c_l(\Sigma^{(l)}G)_{ji}\Sigma_{jf}^{(l)} - (\Sigma G)_{ji}\Sigma_{jf}\right) \\
&+ (\Sigma^{(1)}G)_{ij}\left(\sum_{m=1}^{2} c_m(\Sigma^{(m)}G)_{ij}(\Sigma^{(m)}G)_{ij} - (\Sigma G)_{ij}(\Sigma G)_{ij}\right) \\
&\quad\otimes\left(\sum_{l=1}^{2} c_l(\Sigma^{(l)}G)_{ji}\Sigma_{if}^{(l)} - (\Sigma G)_{ji}\Sigma_{if}\right) \\
&+ 3\cdot(\Sigma^{(1)}G)_{ij}\left((\Sigma^{(1)}G)_{ik} - (\Sigma G)_{ik}\right)\left(\sum_{l=1}^{2} c_l(\Sigma^{(l)}G)_{ji}(\Sigma^{(l)}G)_{jk} - (\Sigma G)_{ji}(\Sigma G)_{jk}\right) \\
&\quad\otimes\left(\sum_{m=1}^{2} c_m(\Sigma^{(m)}G)_{kj}\Sigma_{kf}^{(m)} - (\Sigma G)_{kj}\Sigma_{kf}\right) \\
&+ (\Sigma^{(1)}G)_{ij}\left((\Sigma^{(1)}G)_{ij} - (\Sigma G)_{ij}\right)\left(\sum_{l=1}^{2} c_l(\Sigma^{(l)}G)_{jk}(\Sigma^{(l)}G)_{jk} - (\Sigma G)_{jk}(\Sigma G)_{jk}\right) \\
&\quad\otimes\left(\sum_{m=1}^{2} c_m(\Sigma^{(m)}G)_{ki}\Sigma_{kf}^{(m)} - (\Sigma G)_{ki}\Sigma_{kf}\right)
\end{aligned} \tag{4.4}$$

$$\text{s.}(4.4),\ \ \Sigma^{(1)} \to \Sigma^{(2)},\ \ V_1 \to V_2 \tag{4.5}$$

$$\boldsymbol{\Sigma} = \sum_{l=1}^{2} c_l \boldsymbol{\Sigma}^{(l)} =: c\boldsymbol{\Sigma}^{(1)} + (1-c)\boldsymbol{\Sigma}^{(2)} \tag{4.6}$$

Eine Frage, auf die noch eingegangen werden sollte, ist, ob es beim geschilderten Verfahren zu Überkorrekturen kommt. Eine wichtige Eigenschaft der CPA ist beispielsweise, daß sie keine Überkorrekturen beinhaltet, d.h. es werden in der Selbstenergie keine Diagramme abgezogen, die von vornherein nicht vorkamen. Dieses Problem wird von YONEZAWA im Zusammenhang mit dem von ihr in [YON68] vorgestellten Kumulantenformalismus beschrieben. Dort führen solche Überkorrekturen zu divergenten

Selbstenergien.
Die einzige Möglichkeit, wie entsprechende Überkorrekturen im vorliegenden Fall entstehen könnten, liegt in Diagrammen, die "Bögen" und "Dächer" gleichzeitig enthalten. Sind nur "Bögen" vorhanden, handelt es sich um einen Beitrag aus dem SAW, der als Teilmenge der Streuprozesse immer enthalten ist und durch die Lace-Entwicklung bis zu einer gewissen Ordnung korrekt erfasst wird. Liegen nur "Dächer" vor, so handelt es sich um ein Diagramm ohne Korrekturen, somit also offenbar auch ohne Überkorrekturen.
Im folgenden Beispiel befindet sich in einem ansonsten aus Mehrfachstreuungen bestehenden Graphen ein einzelner "Bogen", was auf eine Korrektur hindeutet.

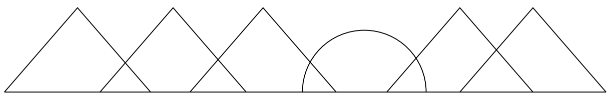


Abbildung 4.14

Dies ist jedoch keine Überkorrektur, wie die folgende Abbildung deutlich macht, sondern berücksichtigt in führender Ordnung die Korrelationen zwischen zwei Laces (genauer: von $\Sigma_3^{(2)}$ und Σ_2) innerhalb der T-Matrix.

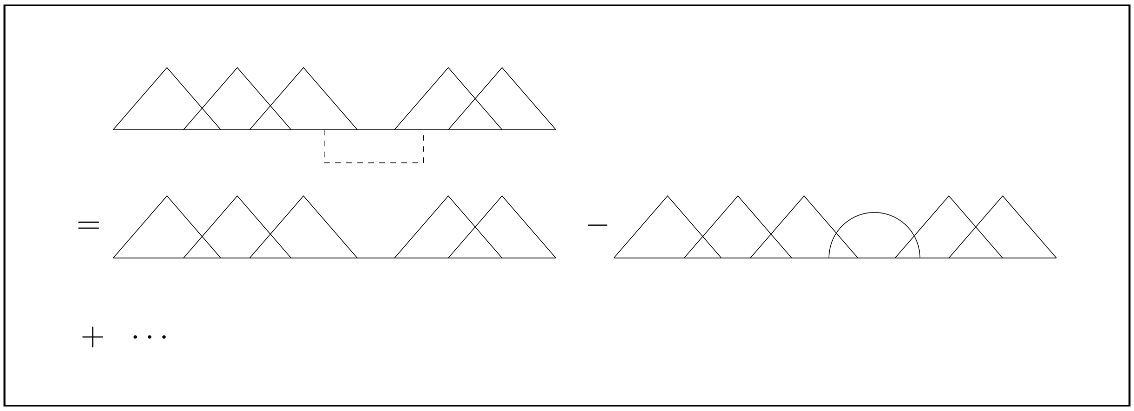


Abbildung 4.15

Diese Feststellung kann verallgemeinert werden, da durch Entfernen einer beliebigen Kante eine Lace in Teile zerfällt, die ihrerseits wieder Laces darstellen. Diese Eigenschaft kann man sich anhand der Lace-Abbildung klar machen, wenn man bedenkt, daß durch das Entfernen einer Kante allenfalls eine Zusammenhangskomponente in mehrere zerfallen kann.
Somit ist jeder Bogen innerhalb eines Diagramms als Korrektur zwischen Streubeiträgen niedrigerer Ordnung zu verstehen. Sofern eine Näherung *alle Laces bis zu einer*

gewissen Ordnung berücksichtigt, sind die entsprechenden Streubeiträge bereits enthalten und es kommt zu keinerlei Überkorrekturen.
Insgesamt ist sicherlich die Hauptschwierigkeit bei den vorgestellten Erweiterungen, daß diese, wie in Kapitel 3 dargelegt, einer Entwicklung in $D^{-\frac{1}{2}}$ folgen. Inwieweit dies in der niedrigen Raumdimension $D = 3$ zu einer Verbesserung führt, ist fraglich. Dies soll im folgenden Kapitel numerisch untersucht werden.

Kapitel 5

Numerische Ergebnisse

In diesem Kapitel sollen die numerischen Ergebnisse, die im Rahmen dieser Arbeit gewonnen wurden, vorgestellt und kritisch betrachtet werden. In den numerischen Simulationen, auf die im Anhang B genauer eingegangen wird, wurden Erweiterungen mittels der $\mathcal{O}(D^{-\frac{1}{2}})$- sowie mittels der $\mathcal{O}(D^{-1})$-Korrekturen implementiert. Es wurden verschiedene Werte für Konzentration und die Potentiale gewählt, wobei sich zeigte, daß für bestimmte Parameter der numerische Aufwand derartig anwächst, daß eine Untersuchung im Rahmen dieser Arbeit nicht gelang. In diesem Licht sind auch derzeit noch keine allgemeinen Aussagen über die Qualität der Erweiterung möglich.

5.1 Simulationen eines 3D-Systems

Alle folgenden Graphen zweigen Simulationen eines dreidimensionalen NN-Hopping-Systems. Die Energie wird stets in dimensionslosen Einheiten der Hoppingstärke t gemessen. Somit hat auch die Zustandsdichte keine Dimension.
Abbildung 5.1 zeigt die Daten für gleiche Konzentration beider Komponenten, allerdings mit asymmetrischer Verteilung der Potentiale. Es fällt vor allem auf, daß sowohl das CPA-Band als auch das exakte Band symmetrisch zur Bandmitte bei $E = 1.75$ sind. Diese Eigenschaft haben die Bänder, die mittels der Erweiterungen gefunden wurden, nicht. Des Weiteren sind die Korrekturen gegenüber der CPA im rechten Teil des Bandes in der richtigen Größenordnung und liegen auch in etwa in den Bereichen, wo die CPA das wahre Band schlecht approximiert; sie stellen aber kaum eine Annäherung an die exakten Ergebnisse dar. Auch ist zu bemerken, daß der Unterschied zwischen Berücksichtigung und Vernachlässigung der dritten Lace relativ gering ist.

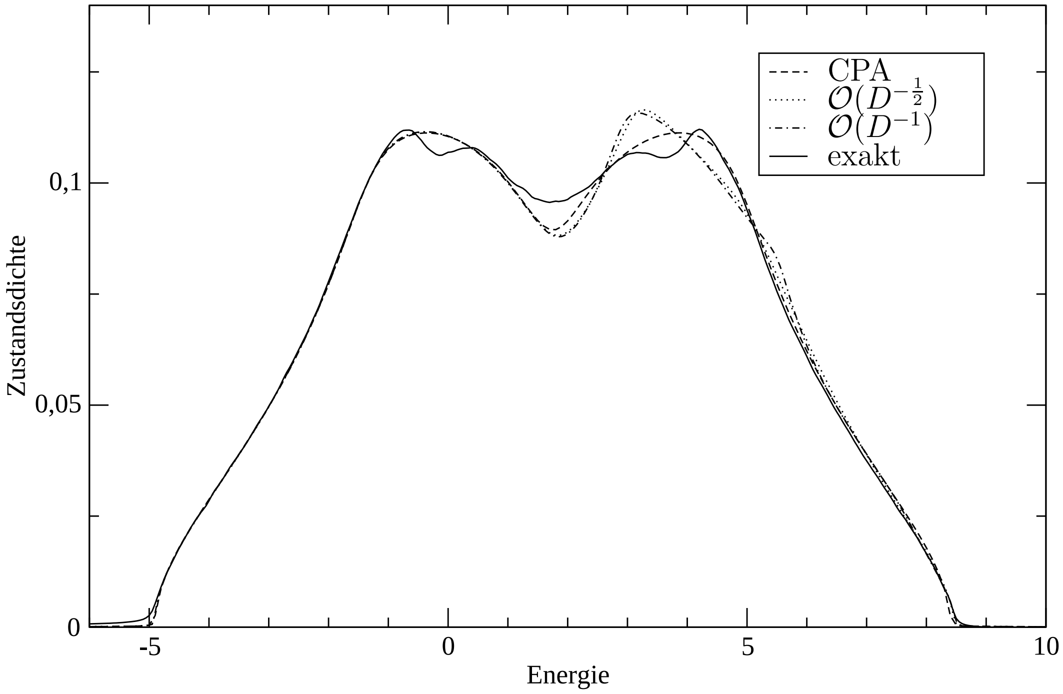


Abbildung 5.1 Zustandsdichte für $c = 0.5, V_1 = 0, V_2 = 3.5$

Die Asymmetrie der Zustandsdichte findet ihr Gegenstück im Nichtdiagonalanteil der Selbstenergie. Dieser ist in diesem Zusammenhang definiert durch

$$\frac{\int\limits_{BZ1} d^3k|\Sigma(\vec{k}) - \langle\Sigma\rangle\,|}{\int\limits_{BZ1} d^3k|\Sigma(\vec{k})|} \tag{5.1}$$

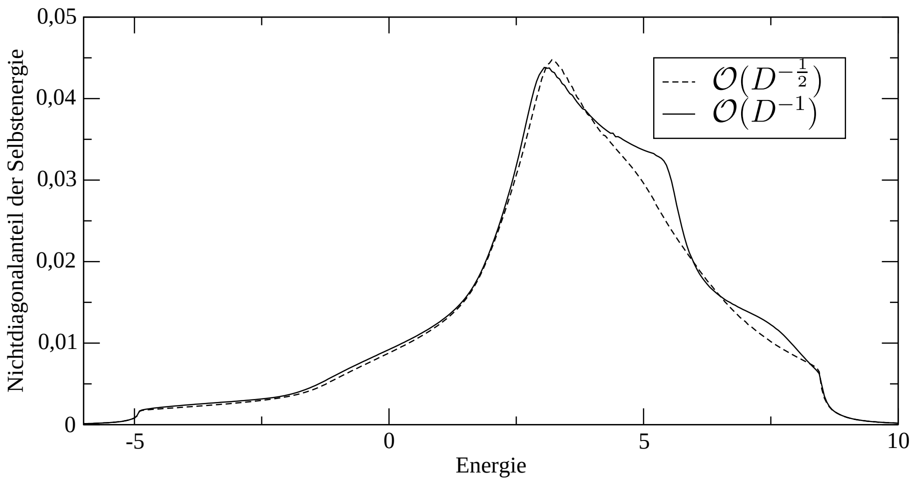


Abbildung 5.2 Nichtdiagonalanteil von Σ für $c = 0.5, V_1 = 0, V_2 = 3.5$

Die angesprochene Asymmetrie verliert sich, wenn man bei gleicher Konzentration und gleichem Abstand der Potentiale die beiden Potentiale symmetrisch zum Ursprung legt, wie die folgende Abbildung illustriert.

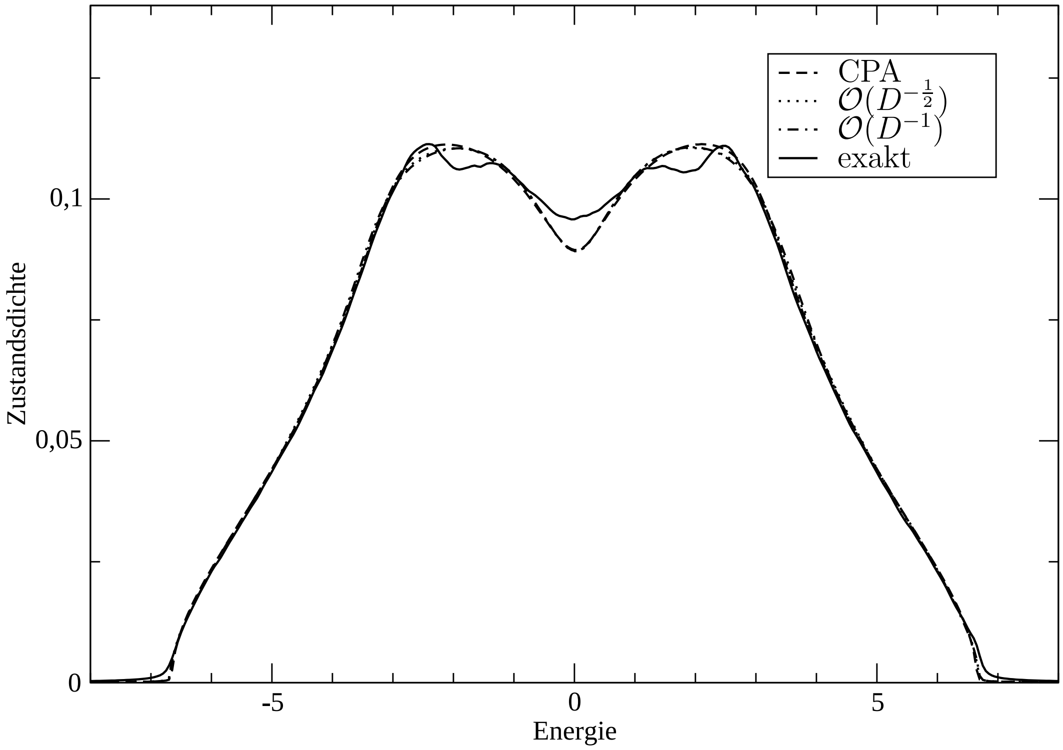


Abbildung 5.3 Zustandsdichte für $c = 0.5, V_1 = -1.75, V_2 = 1.75$

Die Beseitigung der Asymmetrie zeigt sich auch im Nichtdiagonalanteil der Selbstenergie (Abb.5.4). Es verbleibt hier allerdings eine gewisse Asymmetrie bei der D^{-1}-Erweiterung. Diese wird offenbar durch die nichtdiagonalen Anteile von Σ_3 sowie die (in Gitterplatzdarstellung zu Σ_3 identischen) Korrelationsbeiträge aus Σ_2 hervorgerufen. Bei Berücksichtigung von Σ_2 und $\langle\Sigma_3\rangle$ tritt keinerlei Asymmetrie auf. Der Grund für diese Unstimmigkeit ist derzeit noch nicht geklärt. Es handelt sich jedoch nicht um eine Folge des endlichen Imaginärteils der Energie. Möglicherweise ist ein Fehler bei der numerischen Implementierung unterlaufen, oder aber es handelt sich um eine echte Eigenschaft der entsprechenden Beiträge. Letzteres könnte das gesamte Verfahren in Frage stellen, da sich das Problem bei höheren Laces noch verschärfen könnte.

In Abbildung 5.5 ist der (unter Berücksichtigung der Symmetrie) relevante Bereich von Abb.5.3 vergrößert dargestellt, um die relativ geringen Unterschiede besser diskutieren zu können.

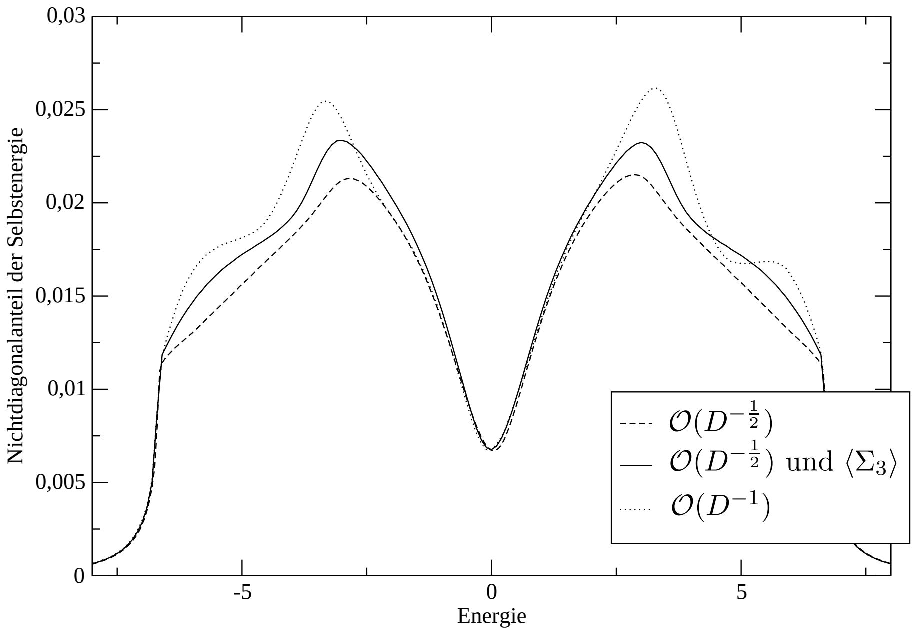


Abbildung 5.4 Nichtdiagonalanteil von Σ für $c = 0.5, V_1 = -1.75, V_2 = 1.75$

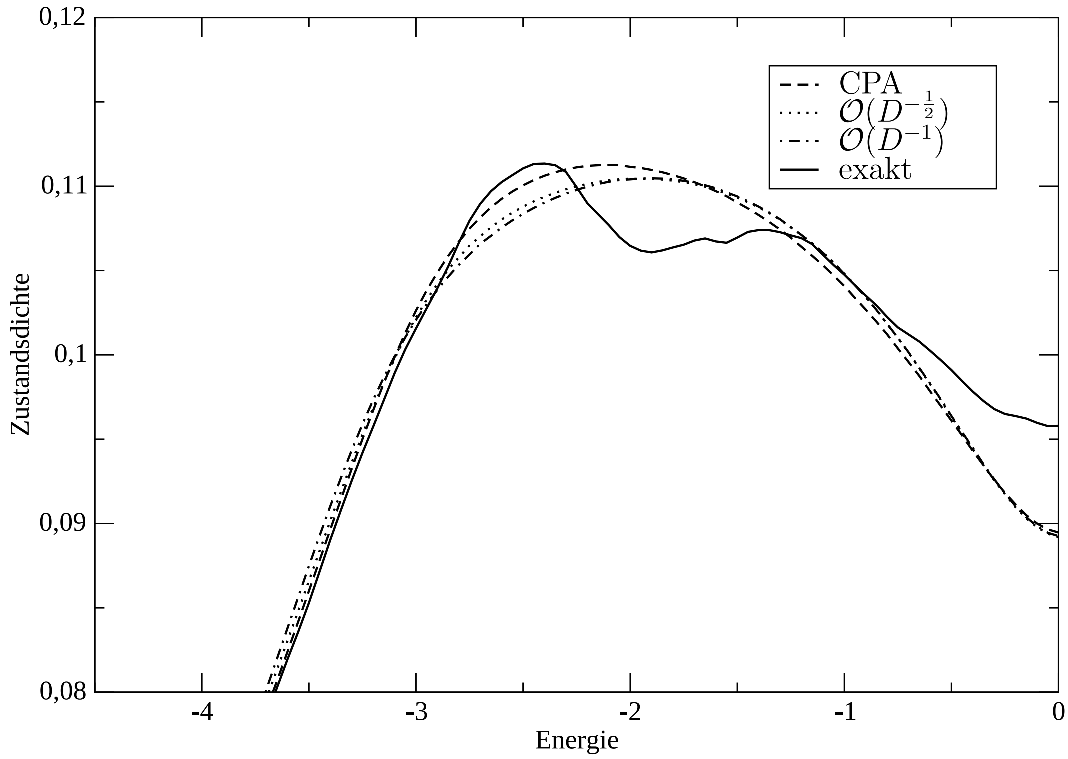


Abbildung 5.5 Zustandsdichte für $c = 0.5, V_1 = -1.75, V_2 = 1.75$

Es ist erkennbar, daß hier die beiden Erweiterungsstufen wiederum keinen großen Unterschied zeigen.

Die Erweiterungen unterschätzen zwar im Energiebereich von ca.-2.9 bis ca.-2.3 das wahre Band deutlich stärker als die CPA dies tut, dafür überschätzen sie es im darauffolgenden Bereich weniger stark als die CPA. Im Bereich von ca.-1.2 bis ca.-0.8 ist die Übereinstimmung mit dem wahren Band hervorragend, danach werden die Korrekturen gegenüber der CPA zunehmend geringer und in der Bandmitte versagen die Erweiterungen gleichermaßen wie die CPA.

Die Abbildungen 5.6 und 5.7 zeigen den Diagonalteil der Selbstenergie, getrennt nach Real- und Imaginärteil, für die CPA und die Erweiterungen. Hierbei wurde wegen der sehr geringen Unterschiede nicht zwischen $\mathcal{O}(D^{-\frac{1}{2}})$- und $\mathcal{O}(D^{-1})$-Korrekturen unterschieden. Man erkennt bei beiden in beiden Fällen die Symmetrie bzw. Antisymmetrie zur Bandmitte bei $E = 0$.

Abbildung 5.8 illustriert für den in Abschnitt 2.5 gezeigten Fall des separaten Minoritätsbandes die Veränderungen durch die $\mathcal{O}(D^{-1})$-Korrekturen. In diesem Fall konnte aufgrund der numerischen Komplexität (Simplexgröße wuchs auf über 100 an) nicht das gesamte Spektrum berechnet werden. Die Erweiterung überschätzt die Bandbreite ungefähr in dem gleichen Maße, wie die CPA sie unterschätzt. Offenbar wird aber der große Zentralpeak um $E \approx 9.7$ von der Erweiterung nachvollzogen, während er in der CPA überhaupt nicht zu erkennen ist.

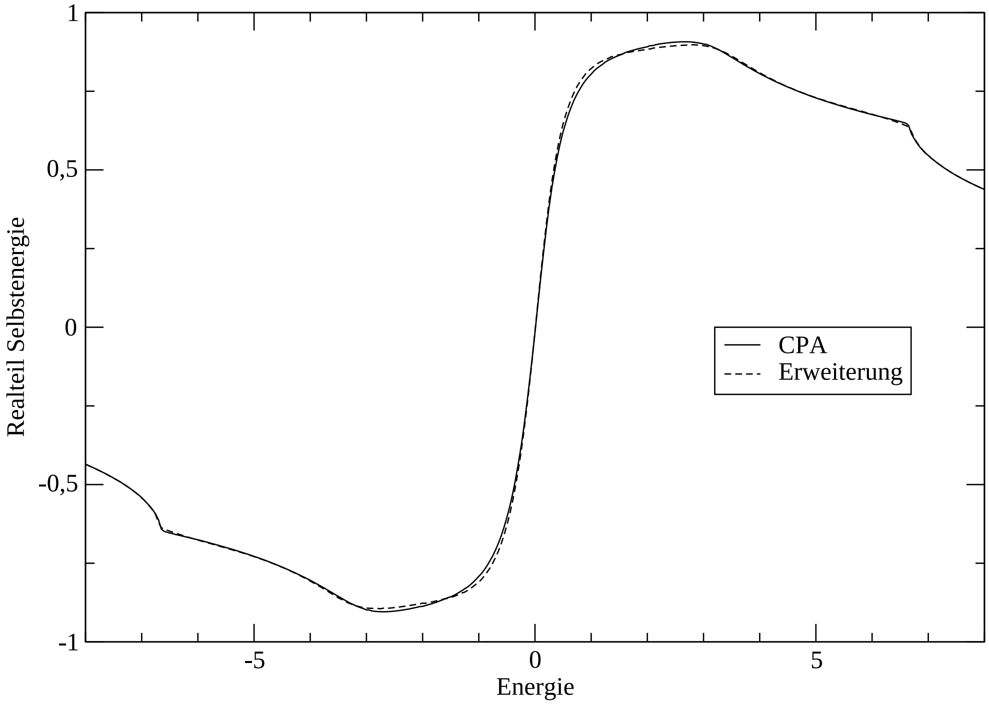


Abbildung 5.6 $\mathfrak{Re}\ \langle\Sigma\rangle$ für $c = 0.5, V_1 = -1.75, V_2 = 1.75$

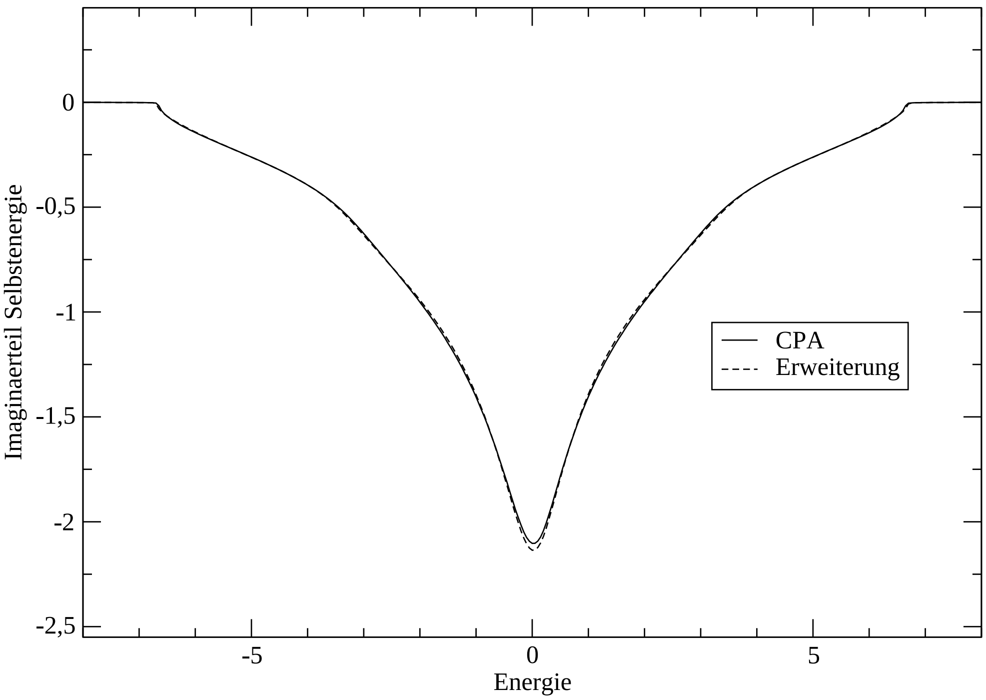


Abbildung 5.7 $\mathfrak{Im}\ \langle\Sigma\rangle$ für $c = 0.5, V_1 = -1.75, V_2 = 1.75$

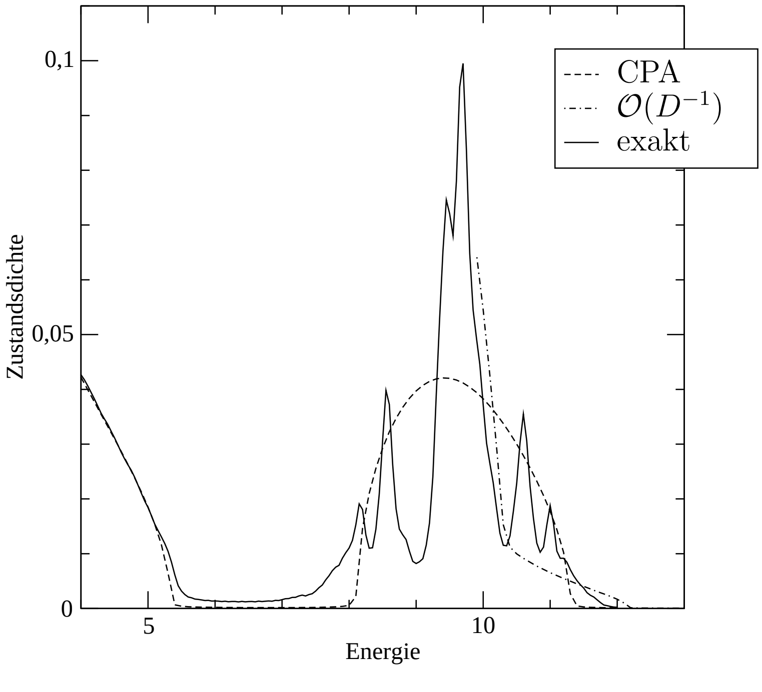


Abbildung 5.8 Zustandsdichte für $c = 0.9, V_1 = 0, V_2 = 9$

Die Abbildungen 5.9 und 5.10 zeigen mit $V_{1/2} = \pm 1$ einen Fall schwacher Streuung. In diesem Bereich ist eine Verbesserung zu erwarten, da die implementierten Erweiterungen in einer Entwicklung nach V bis zur Ordnung $\mathcal{O}(V^5)$ exakt sind, während die CPA dies nur bis $\mathcal{O}(V^3)$ ist.

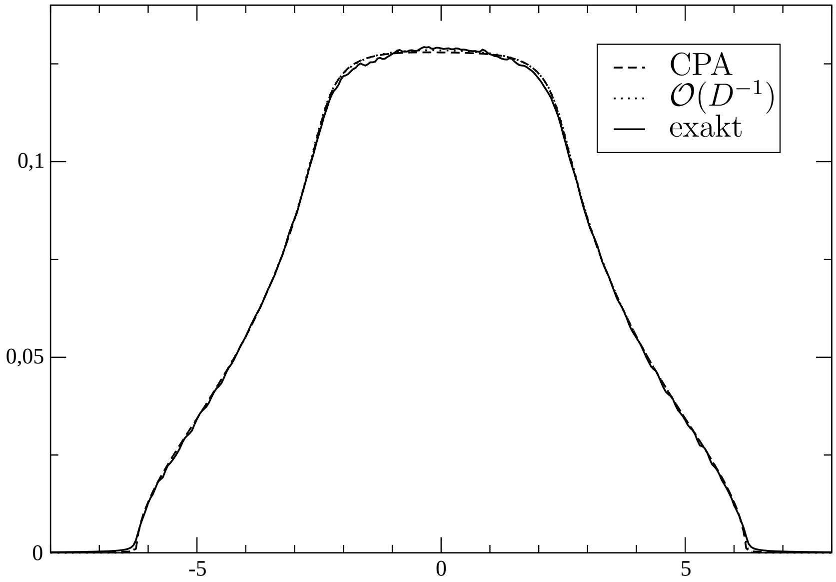


Abbildung 5.9 Zustandsdichte für $c = 0.5, V_1 = -1, V_2 = 1$

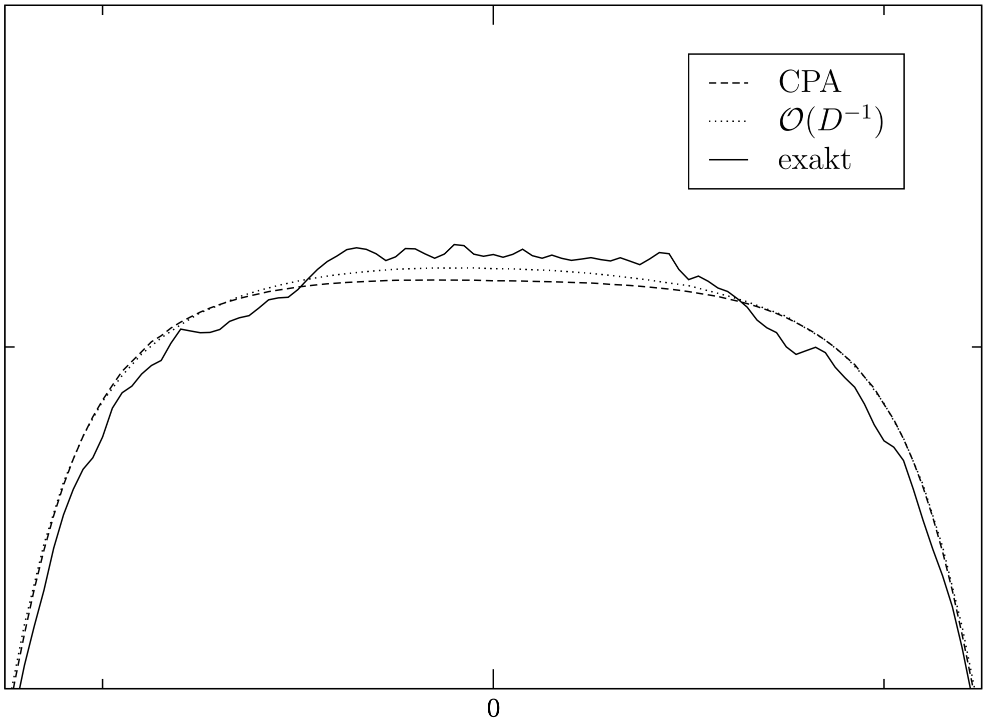


Abbildung 5.10 Zustandsdichte für $c = 0.5, V_1 = -1, V_2 = 1$

Tatsächlich bewirken die $\mathcal{O}(D^{-1})$-Korrekturen im Zentrum des Bandes eine Verbesserung. Die exakten Ergebnisse werden zwar stark von Finite-Size-Effekten überlagert, jedoch ist deutlich zu erkennen, daß die CPA im Zentrum des Bandes die Zustandsdichte unterschätzt. Die Differenz zu den exakten Daten beträgt bei der Erweiterung nur ungefähr die Hälfte, d.h. die Korrekturen liegen in der richtigen Größenordnung. Für $|E| > 1$ ist allerdings kaum eine Korrektur gegenüber der CPA zu erkennen.

5.2 Bewertung der Ergebnisse

Insgesamt ist bei kritischer Betrachtung festzustellen, daß die implementierten Erweiterungen der CPA innerhalb des dreidimensionalen Modells keine substanzielle Verbesserung bei der Vorhersage der Zustandsdichte bewirken. In diesem Zusammenhang ist besonders ernüchternd, daß die Unterschiede, die sich aus einer Berücksichtigung der dritten Lace ergeben, deutlich kleiner sind als die Unterschiede zum exakten Ergebnis.

Andererseits ist zu bemerken, daß die Korrekturen - zumindest in etwa - in den Bereichen liegen, in denen die CPA das exakte Band schlecht approximiert, was ein Hinweis darauf sein kann, daß man im Prinzip auf dem richtigen Weg ist. Außerdem führten die Korrekturen in den getesteten Parameterbereichen zu positiven Zustandsdichten, was ebenfalls als Erfolg zu werten ist und in der Vergangenheit bei diversen Näherungsmethoden nicht immer erfüllt war.

Insgesamt stellen die Erweiterungen jedenfalls keine Verschlechterung gegenüber der CPA dar, wobei allerdings hervorzuheben ist, daß die numerische Behandlung der CPA-Gleichung deutlich weniger aufwändig ist, weil zum einen keine Nichtdiagonalelemente des Propagators zu berechnen sind, womit sämtliche Fouriertransformationen entfallen, zum anderen das Problem der Bestimmung der Selbstenergie ein lediglich vierdimensionales ist (Es sind Real- und Imaginärteil von zwei skalaren Selbstenergiekomponenten zu bestimmen).

Als wichtigen Nachteil muß man die Tatsache nennen, daß bei den vorgestellten Erweiterungen die Ergebnisse vom absoluten Wert der Potentiale abhängen. Dies bedeutet eine offenbare und meiner Ansicht nach entscheidende Unzulänglichkeit. Auch ist die sichtbare Asymmetrie des Nichtdiagonalanteils bei symmetrischer Lage der Potentiale nicht akzeptabel, wobei derzeit noch nicht klar ist, ob es sich hierbei um ein numerisches Artefakt handelt oder aber um einen Fehler der Entwicklung nach Laces.
Die Vermutung liegt nahe, daß die fehlende "Translationssymmetrie" des Bandes eine Folge der Tatsache ist, daß die implementierten Erweiterungen einer Entwicklung nach $D^{-\frac{1}{2}}$ *in hohen Raumdimensionen* folgen.

Kapitel 6

Abschließende Betrachtungen

Zum Abschluß dieser Arbeit sollen noch einmal die wesentlichen Inhalte zusammengefasst werden und ihre Bedeutung herausgestellt werden. Schließlich werden auf der Grundlage der gewonnenen Erkenntnisse einige Vorschläge für ein zukünftiges Vorgehen gemacht.

6.1 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde das Streuproblem von einem neuen Blickwinkel aus angegangen. Das mathematische Verfahren der Lace-Abbildung, das für den Self-Avoiding Walk konzipiert wurde, lässt sich auch auf die Diagramme des Streuproblems anwenden. Hierdurch eröffnet sich eine neue Möglichkeit der Resummation von Beiträgen.
Dies wird dadurch ermöglicht, daß im Rahmen einer korrekten Konfigurationsmittlung Ein- und Ausschluß von übereinstimmenden Positionen Diagramme mit gleicher Topologie erzeugen. Somit treten durch die Übertragung vom SAW auf den Random Walk keine neuen Diagrammtypen hinzu. Allerdings sind gewisse Diagramme auszuschließen, um Überzählungen zu vermeiden.
Das Zusammenfassen von Diagrammen gleicher Topologie ist ein im Zusammenhang mit dem Kumulantenformalismus bekanntes Verfahren.

Mittels der Entwicklung nach Laces - die in hohen Dimensionen einer Entwicklung in $D^{-\frac{1}{2}}$ gleichkommt - kann man im Prinzip das Streuproblem exakt beschreiben, jedoch steigt der numerische Aufwand schnell an, je mehr Laces berücksichtigt werden. Der Entwicklungsparameter $D^{-\frac{1}{2}}$ ist für niedrige Dimensionen eigentlich ungeeignet.

Die numerische Ergebnisse, die mittels der Erweiterungen der CPA durch höhere Laces gewonnen wurden, sind unbefriedigend, und zwar auch dort, wo die Selbstkonsistenzgleichungen für alle relevanten Energien gelöst werden konnten. Die Korrekturen sind teilweise von der falschen Größenordnung oder verschlechtern gar die Approximation gegenüber der CPA. Der naheliegendste Grund hierfür ist die zugrunde liegende $D^{-\frac{1}{2}}$-

Entwicklung, die als Ausgangspunkt für eine Verbesserung in niedrigen Dimensionen zumindest fragwürdig ist.

Es müssen aber beim derzeitigen Kenntnisstand auch andere Gründe in Betracht gezogen werden. So könnte zum einen die diagrammatische Entwicklung fehlerhaft sein, d.h. es könnten systematische Überzählungen oder Auslassungen von Diagrammen vorliegen. Dies halte ich für unwahrscheinlich, aber nicht unmöglich. Zum anderen könnten (trotz diverser Tests des entsprechenden Programms) Fehler bei der numerischen Umsetzung unterlaufen sein.

6.2 Ausblick

Bei einer weiteren Erforschung des Themenbereichs sind grundlegende Aufgaben zu lösen.

Um die Übereinstimmung mit den exakten Ergebnissen zu verbessern, wird es nötig sein, höhere Laces und weiter Korrelationsterme miteinzubeziehen. Hierdurch wird sich der numerische Aufwand weiter vergrößern.

Hierbei kann auch die Gitterplatzdarstellung - wie bei den $\mathcal{O}(D^{-1})$-Termen in Abschnitt 3 - hilfreich sein. In diesem Sinne kann eine Lace jeweils als Vertreter einer topologischen Äquivalenzklasse und darüber hinaus als Vertreter aller Diagramme mit einer bestimmten Gitterplatzdarstellung betrachtet werden.

Es muß geklärt werden, ob die in 6.1 angesprochene sichtbare Asymmetrie systematisch bedingt ist oder auf einem Fehler in der numerischen Behandlung beruht.

Für eine Fortsetzung der Untersuchungen ist eine Bewältigung der numerischen Probleme unerlässlich. Der Simplex-Algorithmus hat sich insbesondere bei der Behandlung von Systemen mit zwei explizit auftauchenden Potentialen als nicht hinreichend effektiv erwiesen. Ideal wäre es, wenn man die Gleichungen (4.4)-(4.6) derart umformen könnte, daß man für alle Parameterbereiche eine kontrahierende Abbildung erhält.

Die Abschätzungen in Abschnitt 3.4 für das Verhalten der Laces sind nur für hohe Dimensionen korrekt. Für die korrekte Behandlung eines niedrigdimensionalen Systems wäre auch eine Analyse des niedrigdimensionalen Verhaltens der Laces unabdingbar. Ob hierbei allerdings ein kleiner Entwicklungsparameter gefunden wird, wird in zukünftigen Untersuchungen zu klären sein.

Anhang A

Stützstellenanpassung

In der vorliegenden Arbeit sind die zentralen Größen in den numerischen Simulationen i.Allg. Funktionen des Wellenvektors (sowie der komplexen Energie z) innerhalb der 1. Brillouinzone.
Da man es mit einem makroskopischen System zu tun hat, ist der Wellenvektor praktisch eine kontinuierliche Größe. Im Rahmen der Numerik ist man allerdings auf ein diskretes Stützstellennetz angewiesen, das das Gerüst für Interpolationen darstellt. Die gegenläufigen Anforderungen von möglichst großer Genauigkeit einerseits und geringem Rechenaufwand und Speicherverbrauch andererseits kann man mittels einer *Anpassung des Stützstellennetzes* bis zu einem gewissen Grad vereinbaren.
Qualitativ ermöglicht diese Anpassung eine genaue Interpolation (dichtes Stützstellennetz) in "wichtigen" Bereichen auf Kosten einer ungenaueren Interpolation (dünnes Stützstellennetz) in "unwichtigen" Bereichen. Die Kriterien für "wichtig" und "unwichtig" können durchaus unterschiedlich gewählt werden. Das vielleicht naheliegendste Kriterium ist der Absolutbetrag der Funktion. Dieser Fall soll am Beispiel der Gaussfunktion erläutert werden. Die Funktion $f(x)$ sei zu Anfang auf den n (i.a. äquidistanten) Stützstellen

$$\{x_i\} \qquad i = 1...n \tag{A.1}$$

gegeben.

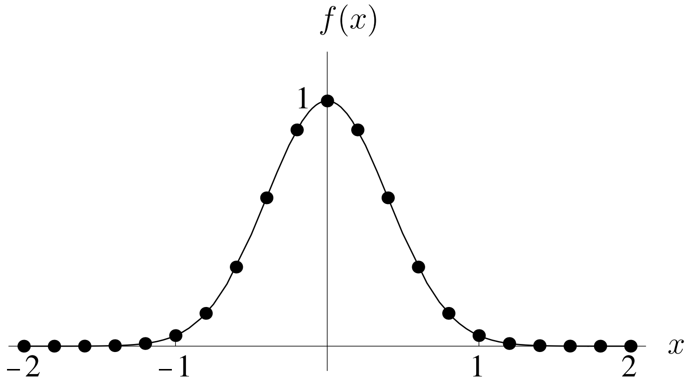


Abbildung A.1 Ursprüngliches Stützstellennetz

Man bildet nun eine Funktion $g(x)$, die durch Integration des Absolutbetrages von $f(x)$ entsteht, d.h.

$$g(x_1) = 0, \qquad g(x_{i+1}) = g(x_i) + \frac{(|f(x_{i+1})| + |f(x_i)|)(x_{i+1} - x_i)}{2} \tag{A.2}$$

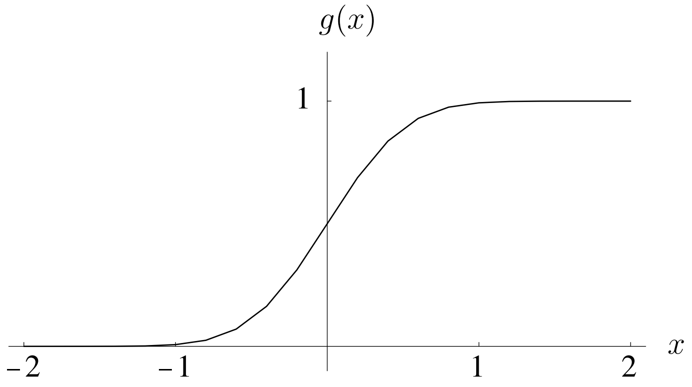


Abbildung A.2 Integral des Absolutbetrages

Die Funktion $g(x)$ ist offensichtlich monoton steigend (für die in der Praxis auftretenden Anwendungen auch streng monoton steigend) und somit umkehrbar. Man normiert die Funktion, so daß $g(x_n) = 1$, und ermittelt nun dasjenige Stützstellennetz

$$\{x'_j\} \qquad i = 1...m, \tag{A.3}$$

für das gilt

$$g(x'_{j+1}) - g(x'_j) = \frac{g(x_n)}{m-1} \quad \forall j \tag{A.4}$$

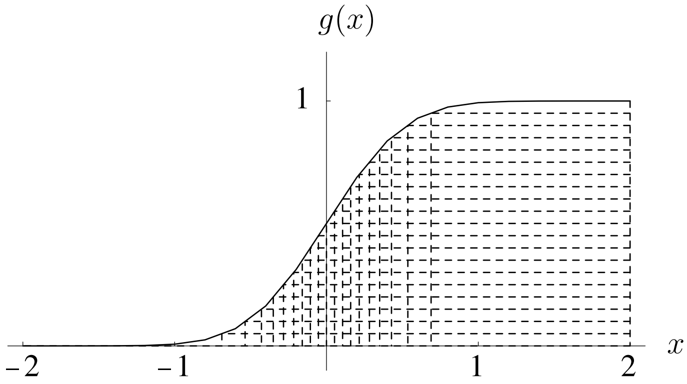


Abbildung A.3 Ermittlung des neuen Netzes

Die entsprechende Ermittlung ist fehlerbehaftet, da zwischen endlich vielen Stützstellen linear interpoliert wird. Das neue Netz verdichtet allerdings die Stützstellen in den Bereichen, wo die Funktion betragsmäßig große Werte annimmt, wodurch im nächsten Schritt die Interpolation dort genauer wird. Auf der Basis des Stützstellennetzes der $\{x'_j\}$ wird nun eine weitere Stützstellenanpassung durchgeführt. Nun wird allerdings die Stützstellenzahl nicht mehr verändert, und man erhält durch die Positionsveränderung der Stützstellen bei jedem Anpassungsschritt ein Maß für den Grad der Anpassung. Wenn die Positionsänderungen eine gewisse Schranke nicht mehr überschreiten, ist das Netz angepasst und das Verfahren beendet.

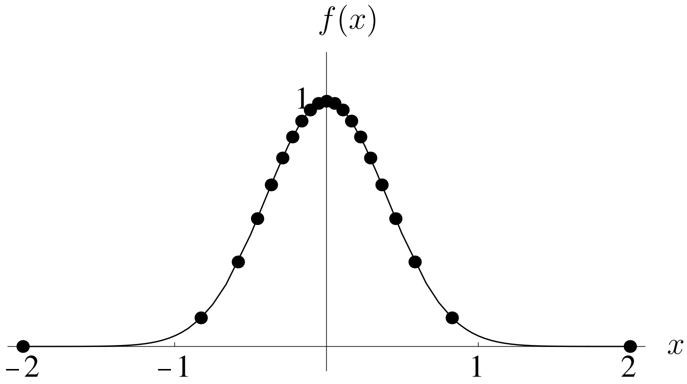


Abbildung A.4 Das angepasste Netz

Neben dem Absolutbetrag der Funktion kann man auch andere Eigenschaften für die Gewichtung heranziehen, z.B.

- Absolutbetrag von Ableitungen
- Absolutbetrag der Krümmung

Letzteres führt dazu, daß stark gekrümmte Bereiche - wie z.B. der Übergang zum Plateau in der Zustandsdichte des 3d-NN-hopping-Bandes - stark abgestützt und somit exakt nachgezeichnet werden. Fließen mehrere Größen in die Anpassung ein, so ist für jede dieser Größen eine *normierte* Funktion $g^{(k)}$ zu bilden. Diese Funktionen werden dann gemäß einer nach den jeweiligen Bedürfnissen gewählten Gewichtung α_k zu einer zu einer Gesamtfunktion g addiert:

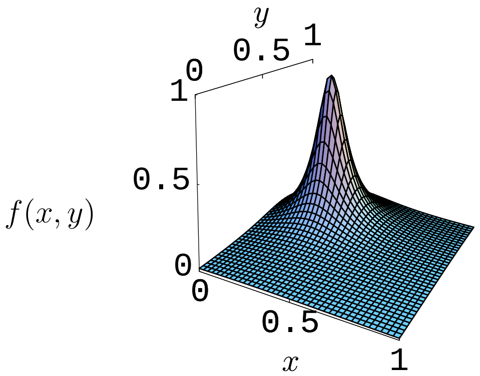
$$g(x_i) = \frac{\sum_k \alpha_k g^{(k)}(x_i)}{\sum_k \alpha_k} \tag{A.5}$$

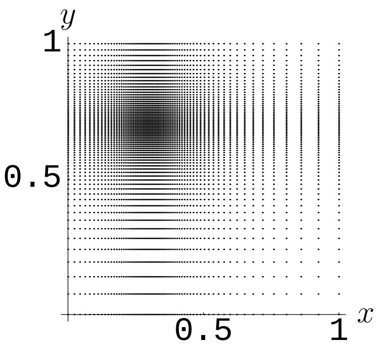
Das Verfahren ist auch auf zwei und drei Dimensionen anwendbar, allerdings ergeben sich hier Probleme. Da mit Hilfe des Stützstellennetzes Interpolationen und Integrationen durchgeführt werden, ist ein nicht-rechteckiges Stützstellennetz schwer zu handhaben. Für ein rechteckiges Netz ist die Standardvorgehensweise die, daß man die Anpassung für jede Raumdimension unabhängig durchführt, d.h. die Summation (A.2) erfolgt dann nicht über Intervalle, sondern über Streifen (2d) bzw. Scheiben (3d). In zwei Dimensionen ist die Stützstellendichte dann eine Funktion des relativen Gewichtes des zugehörigen Streifens in x-Richtung sowie des zugehörigen Streifens in y-Richtung. Für Funktionen, die in der x-y-Ebene einzelne Peaks aufweisen, führt dies zu einer halbwegs adäquaten Anpassung.

Das Beispieldiagramm zeigt die Funktion

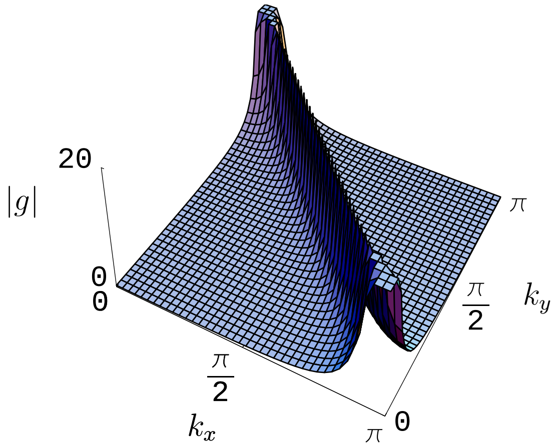
$$f(x,y) = \frac{1}{1 + (10x-3)^2 + (10y-7)^2}$$

sowie das ermittelte Stützstellennetz

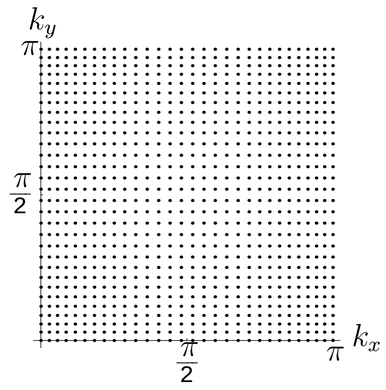




Für Funktionen, bei denen die betragsgroßen Bereiche ausgedehnt sind und symmetrisch bezüglich der Vertauschung von x und y, bleibt die Anpassung unvollständig, bei einigen Funktionen wird sogar fast gar nicht angepasst. Ein für die vorliegende Arbeit wichtiges Beispiel ist der freie Propagator innerhalb der 1. Brillouin-Zone. In zwei Dimensionen zeigt der Absolutbetrag für die komplexe Energie $z = 10^{-2} \cdot i$ $(t = 1)$ folgende Form.



Eine Standardanpassung versagt hier praktisch vollständig, wie die folgende Verteilung der Stützstellen zeigt:



Aufgrund der Symmetrie des zugrundeliegenden Kristallgitters sind *alle* auftauchenden Größen symmetrisch bezüglich Vertauschung der Koordinaten, so daß stets mit dem skizzierten Problem zu rechnen ist.
Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde dies durch eine Unterteilung des Argumentbereichs in Sektionen gelöst. Hierbei erhält in jedem Anpassungsschritt jede Sektion eine Anzahl von Stützstellen entsprechend ihrem Gesamtgewicht, im Folgenden wird innerhalb der einzelnen Sektionen gemäß dem Standardverfahren angepasst. Dies ermöglicht einerseits eine adäquate Anpassung bezüglich der Stützstellenzahl in den einzelnen Sektionen, zum anderen ergibt sich mitunter innerhalb der Sektionen eine günstigere Lage der betragsgroßen Bereiche. Außerdem kann man die Symmetrie ausnutzen, um einen Teil der Sektionen wegzulassen (nämlich diejenigen, die durch Koordinatenpermutation aus anderen hervorgehen), wodurch zudem noch Speicherplatz (und mitunter Rechenzeit) gespart wird. Auf diese Weise wird, wenn man zudem noch die (triviale) Spiegelsymmetrie ausnutzt, im Limes kleiner Sektionen in 2 Dimensionen nur noch 1/8 der Brillouinzone abgespeichert, in 3 Dimensionen gar nur 1/48.

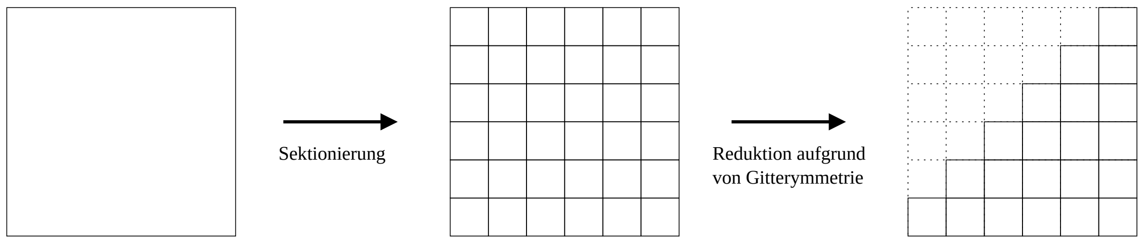
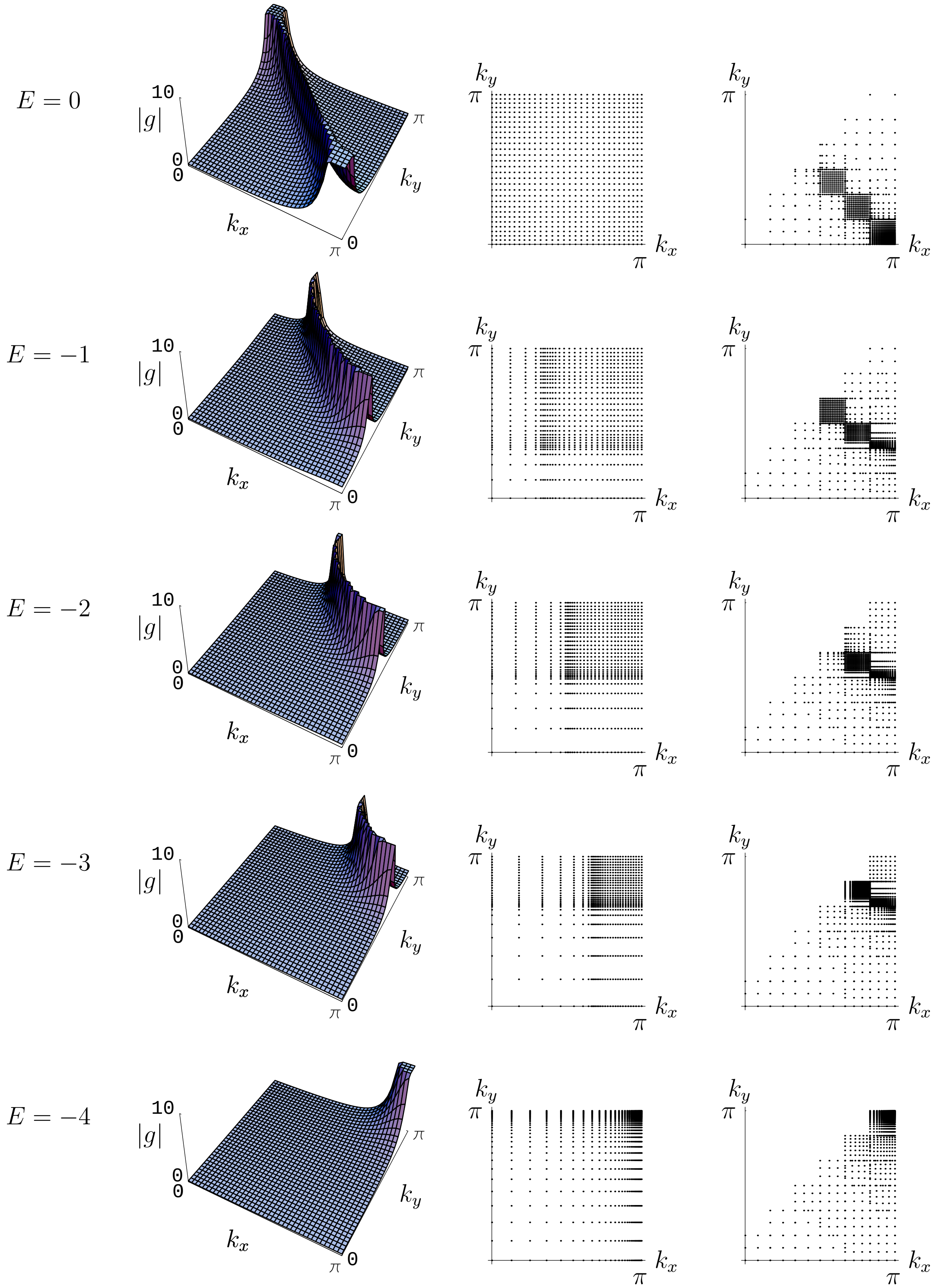


Abbildung A.5

Der Nachteil dieses Verfahrens liegt einerseits im komplizierten Zugriff auf ein bestimmtes Koordinatenpaar/-tripel, da dieses oftmals ja gar nicht abgespeichert wurde, sondern nur ein durch Symmetrietransformationen aus ihm hervorgehendes Pendant. Dies ist allerdings nur ein programmiertechnisches Problem, das keine prinzipelle Schwierigkeit darstellt. Ein weiteres, grundsätzliches Problem ist die Tatsache, daß in jeder Sektion ein eigenes Stützstellennetz existiert. Um Interpolationen innerhalb einer Sektion durchzuführen, benötigt man Stützstellen auf dem Rand jeder Sektion. Dort an der Grenze zweier Sektionen existieren deshalb zwei Stützstellennetze, wodurch im Prinzip Speicherplatz auf Kosten eines handhabbaren Datenzugriffs verschenkt wird. Dieser Effekt nimmt zu mit zunehmender Sektionsanzahl, wodurch sich eine "beliebig feine" Unterteilung verbietet.
Die folgende Abbildung zeigt für verschiedene Energien jeweils den Absolutbetrag des Propagators,

$$g(k_x, k_y, z) = \frac{1}{z - 2\cos k_x - 2\cos k_y}; \quad z = E + 10^{-2} i$$

die Stützstellenverteilung bei Standardanpassung sowie die Stützstellenverteilung bei (linearer) Sektionszahl 6. Die lineare Stützstellenzahl wurde mit 30 sehr niedrig gewählt, um die einzelnen Graphen übersichtlich zu halten. Für numerische Simulationen wäre eine solche Stützstellenzahl in der Regel zu niedrig.
Man erkennt deutlich die Überlegenheit des Sektionierungsverfahrens gegenüber dem Standardverfahren. Es ist ebenfalls zu erkennen, daß innerhalb der Sektionen teilweise eine gewisse Anpassung vorgenommen wird, teilweise aber auch nicht, da innerhalb der Sektionen die betragsgroßen Bereiche wiederum ungünstig liegen.
Die gezeigten Ergebnisse lassen sich auch auf drei Dimensionen übertragen, aus Darstellungsgründen werden sie hier anhand eines zweidimensionalen Systems erläutert.



$E = 0$
$E = -1$
$E = -2$
$E = -3$
$E = -4$
10
$|g|$
0
k_x
k_y
π

Anhang B

Die Lösung der Selbstkonsistenzgleichungen

Die relevanten Größen in der vorliegenden Arbeit, die Selbstenergie sowie der Propagator, lassen sich jeweils als Funktionen innerhalb der 1. Brillouinzone darstellen. Sie sind dort Funktionen eines einzelnen Wellenvektors $\vec{k}$, da das konfigurationsgemittelte System translationsinvariant ist, woraus die Diagonalität aller auftretenden Größen in Bloch-Darstellung folgt. Aufgrund der Kristallsymmetrien genügt es, einen Teil der Brillouinzone abzuspeichern. Für eine Sektionszahl (s. Kapitel A) von 1 ist dieser Anteil 1/8, im Limes großer Sektionszahl 1/48.
Für die auftauchenden Summationen in Termen wie dem folgenden

$$\left(\frac{1}{c^2} - \frac{2}{c} + 1\right) \underbrace{(\Sigma G)_{ij}(\Sigma G)_{ji}(\Sigma G)_{ij}}_{Q_{ij}} \Sigma_{jf} \tag{B.1}$$

ist es jedoch sinnvoll, von der Blochdarstellung in die Wannierdarstellung zu transformieren. Ein bestimmtes Wannierelement erhält man dann gemäß

$$\Sigma_{ij} = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^3 \int\limits_{BZ1} d^3k \; \Sigma(\vec{k}) e^{i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_i)} \tag{B.2}$$

Hierbei ist a die Gitterkonstante, die ohne weiteres auf 1 gesetzt werden kann.
Um den Term $(\Sigma G)_{ij}$ zu berechnen, wird zunächst in Blochdarstellung das Produkt aus Σ und G gebildet, da die Größen in dieser Darstellung diagonal sind, womit sich die Multiplikation deutlich vereinfacht. Dann wird mittels der dreidimensionalen Fouriertransformation (B.2) das Wannierelement bestimmt. Da gemäß dem dimensionalen Verhalten der einzelnen Beiträge in der vorliegenden Arbeit nur wenige Wannierele-

mente zu berücksichtigen sind, kann z.B. die Summation über j in (B.1) numerisch gut bewältigt werden. Somit erhält man die (relevant erachteten) Wannierelemente Q_{ij} und kann hieraus durch Fouriertransformation

$$Q(\vec{k}) = \sum_j Q_{ij} e^{-i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_i)} \tag{B.3}$$

die Größe Q in Blochdarstellung gewinnen. Nun kann man wiederum in dieser Darstellung die Multiplikation von Q und Σ ausführen, womit die Aufgabe gelöst ist, denn man erhält nun weiter

$$\sum_j Q_{ij} \Sigma_{jf} = (Q\Sigma)_{if} \tag{B.4}$$

Es genügt tatsächlich auch, wenn man die Größe $Q\Sigma$ in Blochdarstellung bestimmt hat, da dies ein Beitrag zur Selbstenergie ist, die man in ebendieser Darstellung benötigt. Nun lässt sich nämlich gemäß (1.14) der Propagator bestimmen.
Die Selbstkonsistenzgleichung wird als erfüllt betrachtet, wenn die Norm

$$||G_n - G_{n+1}||; \quad ||A|| = \sqrt{\int_{BZ1} d^3k \; A(\vec{k}) A^*(\vec{k})} \tag{B.5}$$

einen gewissen Wert unterschreitet. Der Propagator ist die zentrale Größe, da sich aus ihm direkt die Zustandsdichte ergibt. Gleichzeitig sollte auch die Norm

$$||\Sigma_n - \Sigma_{n+1}|| \tag{B.6}$$

überprüft werden, da G unterschiedlich stark von Σ abhängen kann, somit also eine bestimmte Genauigkeit in der Bestimmung des einen nicht mit einer bestimmten Genauigkeit in der Bestimmung des anderen gleichgesetzt werden kann. Eine gewisse Exaktheit bei der Bestimmung von Σ ist notwendig, da die Selbstenergie als Funktion der Energie stetig ist und somit das Ergebnis für einen Energiewert als Ausgangspunkt zur Berechnung beim benachbarten Energiewert verwendet werden kann. Im Falle mehrerer Lösungen der Selbstkonsistenzgleichung kann die Stetigkeit auch benutzt werden, um ein Überwechseln von einer Lösung zu einer anderen zu erkennen und zu unterbinden.

Im günstigsten Fall lässt sich nun die Selbstkonsistenzgleichung der Form

$$\Sigma = f(\Sigma) \tag{B.7}$$

iterativ lösen. D.h. man gibt eine Selbstenergie Σ_0 vor und erhält dann durch sukzessives Einsetzen die weiteren Σ_n gemäß

$$\Sigma_{n+1} = f(\Sigma_n) \tag{B.8}$$

Für Σ_0 bietet sich am Rande des betrachteten Energiespektrums das konfigurationsgemittelte Potential, also die Selbstenergie in der VCA, an. Dies ist nämlich in jeder Selbstenergie der einzige Beitrag, in dem keine Propagation vorkommt. Da der Propagator als Funktion der komplexen Energie z stets folgende Asymptotik zeigt

$$|z| \overset{lim}{\rightarrow} \infty\; g(z) = \frac{1}{z} \tag{B.9}$$

wird für betragsmäßig große Energien die VCA exakt.
Die Iteration endet, wenn die Normen (B.4) und (B.5) bestimmte, erfahrungsgemäß ermittelte Werte unterschreiten.
Wie in Kapitel 2 schon angedeutet wurde, stellt die Abbildung (B.7) für viele Parameter keine Kontraktion dar, so daß eine Lösung aktiv gesucht werden muss. In der Form

$$||\Sigma_n - \Sigma_{n+1}|| \stackrel{!}{=} 0 \tag{B.10}$$

kann man das Problem als Suche nach einem Minimum einer Funktion auffassen. Für diese Art von Problemen existieren eine Vielzahl Algorithmen. Im vorliegenden Fall wurde das *Downhill-Simplex*-Verfahren (s. hierzu z.B. [PFTV88]) benutzt. Dieses hat den Vorteil, daß es auch bis zu einem gewissen Grade in Fällen funktioniert, in denen der Funktionswert nicht monoton mit dem Abstand vom Minimum wächst. Zudem werden keine Ableitungen der Funktion gebraucht.
Um aber das Verfahren anwenden zu können, muß das Problem erst etwas aufbereitet werden. Die Selbstenergie ist ein Objekt, das in der 1. Brillouinzone auf 10^4 Stützstellen gegeben ist. Eine Variation all dieser (komplexen!) Funktionswerte ist selbstverständlich nicht machbar. Hier kann man sich aber die Tatsache zunutze machen, daß in der CPA die Selbstenergie tatsächlich durch ein einziges Wannierelement gegeben ist. Es hat sich gezeigt, daß die vorgestellte Erweiterung in der Asymptotik für betragsmäßig

große Energien stets die CPA-Lösung reproduziert. Auch wenn Nichtdiagonal-Anteile hinzukommen, so sind diese zunächst betragsmäßig klein, und zwar werden sie mit zunehmendem Abstand vom Ursprung (im Wannierraum) kleiner. Man kann also als Startwerte für den Simplex eine gewisse Anzahl von Selbstenergien benutzten, die sich durch Variation einer kleinen Menge von Wannierelementen unterscheiden. Die Anzahl der zu variierenden Wannierelemente kann durch Beachtung der Kristallsymmetrien weiter reduziert werden.

Die Anzahl der berücksichtigten Wannierelemente wurde im Rahmen der Simulationen dynamisch zur Laufzeit angepasst, indem die Gleichung (B.7) einige Schritte iteriert wurde und dann durch Fouriertransformation die Wannierelemente ermittelt wurden, die sich betragsmäßig deutlich von Null unterschieden.

Zudem wurde bei jedem Iterationsschritt eine Stützstellenanpassung vorgenommen.

Das folgende Flussdiagramm soll den Ablauf der numerischen Operationen verdeutlichen:

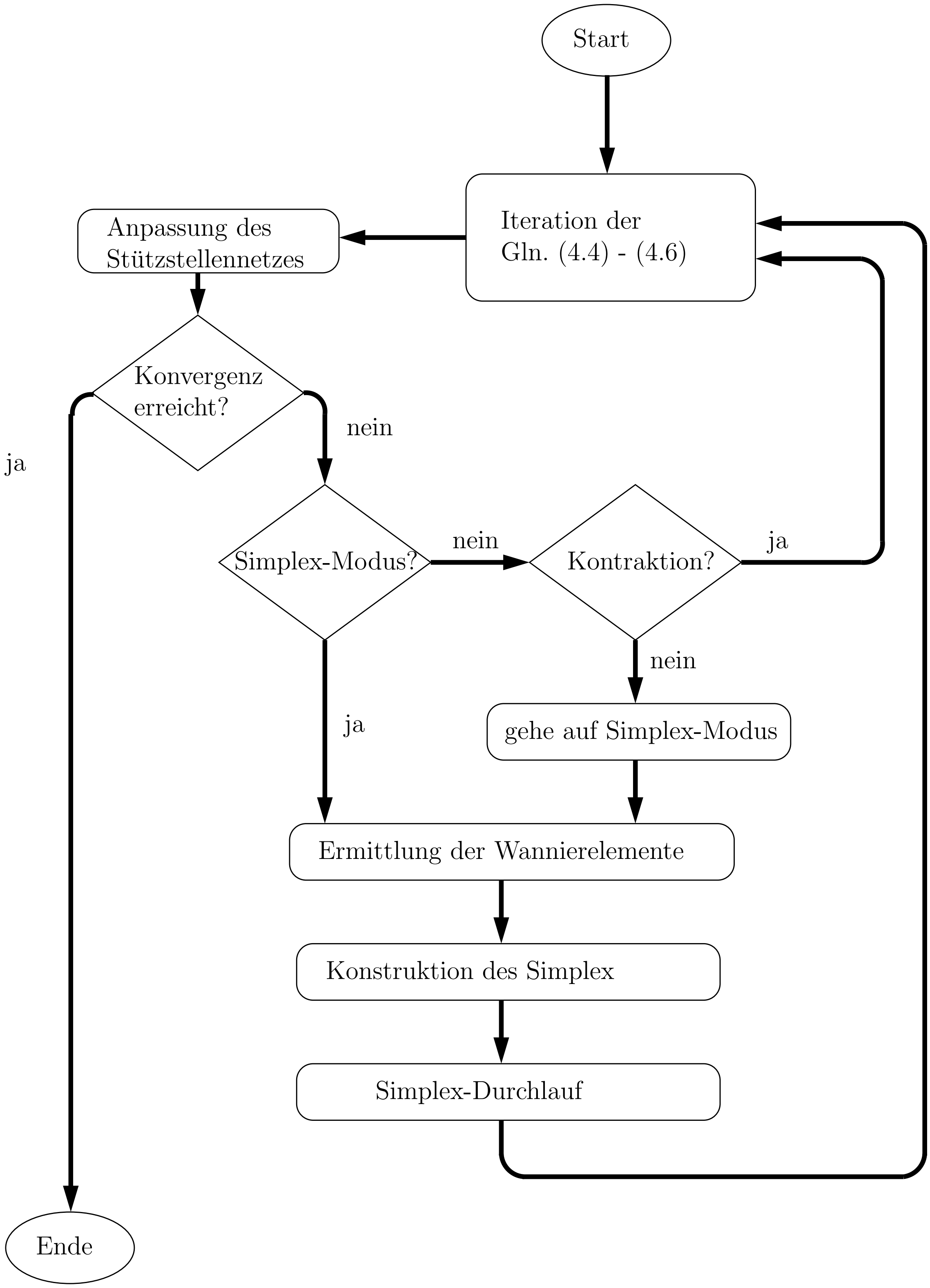


Abbildung B.1 Schema des Programmablaufs

Literaturverzeichnis

[ABKS75] R. Alben, M. Blume, H. Krakauer und L. Schwartz: *Exact results for a three-dimensional alloy with site diagonal disorder; comparison with the coherent potential approximation.* Physical Review B **12** (1975) 4090–4094.

[Bee64] J. L. Beeby: *Electronic Structures of Alloys.* Physical Review **135** (1964) A130–A143.

[BS85] D. Brydges und T. Spencer: *Self-Avoiding Walk in 5 or More Dimensions.* Communications on Mathematical Physics **97** (1985) 125–148.

[DL63] R. W. Davies und J. S. Langer: *Self-Constistent Field Approximation for the Frequency Spectrum of a Disordered Chain.* Physical Review **131** (1963) 163–166.

[ES76] H. Ehrenreich und L. Schwartz: *The Electronic Structure of Alloys.* Solid State Physics **31** (1976) 150–286.

[KL57] W. Kohn und J.M. Luttinger: *Quantum Theory of Electrical Transport Phenomena.* Physical Review **108** (1957) 590–611.

[Kor58] J. Korringa: *Dispersion theory for electrons in a random lattice with applications to the electronic structure of alloys.* Journal of Physics and Chemistry of Solids **7** (1958) 252–258.

[Lax51] M. Lax: *Multiple Scattering of Waves.* Reviews of Modern Physics **23**(4) (1951).

[Lea68] P.L. Leath: *Self-Consistent-Field Approximations in Disordered Alloys.* Physical Review **171**(3) (1968) 725–727.

[Leu98] T. Leuders: *Korrelationen in hohen Raumdimensionen.* Doktorarbeit, Universität Dortmund, 1998.

[MH74] E. Müller-Hartmann: *Analyticity of the CPA.* Solid State Communications **12** (1974) 1269–1270.

[Mie90] C. Mielsch: *Exakte Ergebnisse zum Falicov-Kimball-Modell in hohen Dimensionen.* Doktorarbeit, Universität Dortmund, 1990.

[MS96] N. Madras und G. Slade: *The Self-Avoiding Walk*. Birkhäuser Verlag, 1996.

[Nor31] L. Nordheim: *Zur Elektronentheorie der Metalle*. Annalen der Physik **9** (1931) 607–678.

[OT68] Y. Onodera und Y. Toyozawa: *Persistence and Amalgamation Types in the Electronic Structure of Mixed Crystals*. Journal of the Physical Society of Japan **24** (1968) 341–355.

[Ott03] D. Otto: *Störungstheorie des Anderson-Modells: Untersuchung und Erweiterung der NCA und DMFT*. Doktorarbeit, Universität Dortmund, 2003.

[PFTV88] W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky und W.T. Vetterling: *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press, 1988.

[Sov67] P. Soven: *Coherent-Potential Model of Substitutional Disordered Alloys*. Physical Review **156**(3) (1967) 809–813.

[Tay67] D.W. Taylor: *Vibrational Properties of Imperfect Crystals with Large Defect Concentrations*. Physical Review **156** (1967) 1017–1029.

[VKE68] B. Velicky, S. Kirkpatrick und H. Ehrenreich: *Single-Site Approximations in the Electronic Theory of Simple Binary Alloys*. Physical Review **175** (1968) 747–766.

[Yon68] F. Yonezawa: *A Systematic Approach to the Problems of Random Lattices*. Progress in Theoretical Physics **40** (1968) 734–757.

[Yon82] F. Yonezawa: *Coherent Potential Approximation*. In: T. Matsubara (Herausgeber): *The Structure and Properties of Matter*, Band 28 der Reihe *Springer Series in Solid-State Sciences*, Kapitel 11, Seiten 383–432. Springer Verlag, 1982.

Abschließend möchte ich mich allen danken, die zum Entstehen dieser Arbeit beigetragen haben.

Vor allem danke ich Prof. Helmut Keiter für die Idee zu dieser Arbeit, für die Betreuung und nicht zuletzt für entscheidende Denkanstöße, ohne die die Arbeit nicht in der vorliegenden Weise hätte gelingen können.

Klaus Baumgartner danke ich für die ständige Bereitschaft zu Diskussionen, die mir beim Verständnis fachlicher Inhalte sowie bei der Ausarbeitung eigener Ideen sehr geholfen haben, sowie für die unschätzbare Hilfe beim Erlernen der Programmiersprache C++.

Bei Dr. Dirk Otto möchte ich mich insbesondere für viele nützliche Hinweise zum Umgang mit der Sprache LaTeX bedanken, die mir das Setzen dieser Arbeit enorm erleichtert haben.

Ebenso gilt mein Dank Prof. Joachim Stolze, der mir bei physikalischen Fragen jeder Art viele Male hilfsbereiter Ansprechpartner war.

Des Weiteren danke ich allen Mitgliedern der Lehrstühle T1 und T2 sowie des gesamten Fachbereichs Physik, die mir mit Rat und Tat zur Seite gestanden haben, aber auch für die vielen nicht-fachlichen Gespräche, die mir die Zeit meiner Tätigkeit bereichert haben.

Nicht zuletzt möchte ich mich bei meiner Familie und meinen Freunden bedanken, die mich ermutigt und unterstützt haben.