Störungstheorie des Anderson-Modells: Untersuchung und Erweiterung der NCA und DMFT

Dissertation

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

vorgelegt von

Dirk Otto

Mai 2003

Tag der mündlichen Prüfung:	27. Juni 2003
Vorsitzender und Prodekan:	Prof. Dr. K. Wille
1. Gutachter:	Prof. Dr. H. Keiter
2. Gutachter:	Prof. Dr. B. Gerlach
Vertreter der promovierten wissenschaftlichen Mitarbeiter:	Dr. C. Gutt

*„Der Beginn aller Wissenschaften ist das Erstaunen,
dass die Dinge so sind, wie sie sind.“
Aristoteles (384 - 322 v. Chr.)*

Für meine Eltern.

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einleitung

Seit vielen Jahren stehen die außergewöhnlichen Eigenschaften von Systemen mit magnetischen Störstellen im Blickpunkt des Interesses vieler Physiker [Hew93]. Bereits in den 30er Jahren des vorherigen Jahrhunderts wurden die ersten Experimente auf diesem faszinierenden Gebiet gemacht. Bei Widerstandsmessungen an Metallen konnte ein Minimum bei tiefen Temperaturen gefunden werden. Bei einem weiteren Absenken der Temperatur zeigte sich zunächst ein logarithmischer Anstieg und schließlich ein quadratischer Abfall. Dies steht im Gegensatz zum Verhalten „normaler“ Metalle, bei denen der Widerstand mit abnehmender Temperatur aufgrund der Phononenbeiträge proportional zu T^5 monoton abfällt. Dieses Phänomen blieb lange Zeit unerklärt und konnte erst 1964 von J. Kondo gelöst werden [Kon64]. Er erklärte den nach ihm benannten Effekt in einer Störungsrechnung dritter Ordnung für das *sd*-Modell, das ein lokales magnetisches Moment über eine Austauschwechselwirkung an die Leitungselektronen koppelt. Später wurde klar, dass diese Kondo-Systeme unterhalb einer charakteristischen Kondo-Temperatur T_K die magnetischen Eigenschaften der einzelnen Störstelle verlieren, stattdessen entsteht ein Singlett-Zustand mit den umliegenden Leitungselektronen. Daher kann sich keine magnetische Ordnung mehr ausbilden und man erhält ein pauli-magnetisches Verhalten.

In der Folgezeit wurden nicht nur Systeme mit einer sehr geringen, sondern auch mit einer höheren Konzentration an magnetischen Störstellen untersucht. Hierbei beobachtet man zunächst ein Verhalten, das sich durch mehrere einzelne Störstellen beschreiben lässt. Bei einer weiteren Erhöhung der Störstellenkonzentration zeigt sich eine Spinglas-Phase, in der die Impurity-Spins wegen ihres unterschiedlichen Abstands zufällig ferro- oder antiferro-magnetisch gekoppelt sich. Z. T. ähnliche Eigenschaften wie im Ein-Störstellen-Modell stellt man wieder in fast reinen Legierungen fest [FulKelZwi88]. Man bezeichnet diese Verbindungen daher auch als Kondo-Gitter. Der Ausdruck „Schwere Fermionen“ für einige dieser Substanzen leitet sich aus einer Betrachtung der spezifischen Wärme ab, die bei tiefen Temperaturen proportional zu T verläuft. Die Proportionalitätskonstante liegt bei schwerfermionischen Systemen um einen Faktor 100 . . . 1000 höher als bei den meisten anderen Metallen, woraus sich eine entsprechend größere effektive Masse der Elektronen ergibt, die sogar vergleichbar mit der Protonenmasse werden kann. Darüber hinaus findet man bei den Schweren Fermionen ein ganz unterschiedliches Verhalten, wie Antiferro- ($U_2\,Zn_{17}$, $U\,Cd_{11}$) und Pauli-Magnetismus ($Ce\,Zn_6$) sowie auch Supraleitung ($U\,Pt_3$, $U\,Be_{13}$), die durch die magnetischen Störstellen eigentlich unterdrückt werden sollte.

Legierungen, die ein solch ungewöhnliches Verhalten zeigen, sind einige intermetallische Verbindungen von Übergangsmetallen oder Lathaniden und Aktiniden. Diese Elemente besitzen wegen ihrer elektronischen Konfiguration sehr ähnliche physikalische und chemische Eigenschaften. Sie unterscheiden sich nur in der tief liegenden d- bzw. f-Schale, in der zwischen den dort lokalisierten Elektronen eine starke Coulomb-Abstoßung wirkt. Das die Chemie bestimmende äußere s-Niveau ist stets mit zwei Elektronen voll besetzt, die in einer metallischen Verbindung an das Leitungsband abgeben werden.

Ein mikroskopisches Modell zur Beschreibung einer magnetischen Störstelle wurde 1961 von P. W. Anderson eingeführt [And61]. Es beinhaltet die wesentlichen Eigenschaften von Verbindungen mit Übergangsmetallen und Selten-Erd-Elementen und wird in Kapitel 2 ausführlich erläutert. Nach einigen allgemeinen Ausführungen wird eine diagrammatische Störungstheorie für das Single-Impurity-Anderson-Modell (SIAM) beschrieben, die die Besonderheiten aufgrund der starken elektronischen Korrelationen berücksichtigt [KeiKim70, KeiKim71, KeiMor84]. Die charakteristische Vielteilchenresonanz in der f-Green-Funktion des Modells ergibt sich aus der Non-Crossing Approximation (NCA), die eine sehr weit verbreitete Näherung für das Anderson-Modell darstellt [KeiKim71, KeiCzy83, Kur83]. Eine Verallgemeinerung der Diagrammtechnik auf eine periodische Anordnung von Störstellen ist ebenfalls möglich [GreKei81]. Wegen der zusätzlichen Intersite-Anteile entsteht hierbei allerdings eine größere Zahl an zu berücksichtigen Beiträgen als für das SIAM. Daher ist man auf andere Näherungen für das periodische Anderson-Modell (PAM) wie die Extended Non-Crossing Approximation (XNCA) [Kur85], die Lattice Non-Crossing Approximation (LNCA) [Gre87, KeiLeuMelSch95] oder den

Hilfsfeldformalismus [HülQin94] angewiesen. In diesen Approximationen wird das Gittermodell auf ein Ein-Störstellen-System abgebildet, bei dem ein effektives Band den Einfluss der anderen Störstellen beschreibt. Dieses Verfahren, das allgemein als Dynamische-Mean-Field-Theorie (DMFT) bezeichnet wird [GeoKotKraRoz96], ist nach einer geeigneten Skalierung des Hopping-Matrixelements im Limes unendlicher Raumdimensionen exakt [MetVol89]. In der DMFT setzt man das effektive Band als einen Self-Avoiding Walk (SAW) durch das Gitter mit einer lokalen Streumatrix an, die aus der Lösung des Single-Impurity-Modells folgt.

Daher wird in Kapitel 4 der mathematische Self-Avoiding Walk [MadSla96], bei dem im Unterschied zum physikalischen in jedem Schritt nur Propagationen zu einem nächsten Nachbarn erlaubt sind, eingehend untersucht. Im Gegensatz zum Random Walk (RW), dessen Ergebnisse ebenfalls kurz zusammengefasst werden, lässt sich der SAW nicht exakt lösen. Die Lace-Entwicklung ermöglicht es jedoch verschiedene Näherungen für den SAW anzugeben sowie diese sukzessive zu verbessern. Z. B. berücksichtigt ein Non-Crossing Walk (NCW) ähnlich der NCA in einer diagrammatischen Herleitung aus der Lace-Entwicklung alle Beiträge ohne Überkreuzungen, während in einem Memory-2 Walk (M2W) alle direkten Rückkehrprozesse ausgeschlossen werden. Anschließend wird das unterschiedliche Verhalten beider Approximationen in echt endlichen und genuin unendlichen Raumdimensionen aufgezeigt, auf das zuerst in [Leu98] hingewiesen wurde. Durch Anwenden des NCWs auf einen physikalischen SAW erhält man die in unendlichen Raumdimensionen exakte Selbstkonsistenzbedingung (SCC) der DMFT, deren Lösungseigenschaften im weiteren Verlauf dieser Arbeit detailliert untersucht werden.

Zuvor wird jedoch in Kapitel 3 eine Erweiterung der NCA für das Ein-Störstellen-Problem vorgestellt, die auf der bekannten diagrammatischen Störungsrechnung des SIAMs basiert. Diese Verallgemeinerung lässt sich aus einem erzeugenden Funktional herleiten [BayKad61, Bay62], wobei alle Crossing-Beiträge der Bandelektronenlinien zwischen drittnächsten Vertices berücksichtigt werden. Mithilfe dreier Streumatrizen, wobei sich zwei aus jeweils einer eindimensionalen Integralgleichung ergeben, können die zusätzlichen Selbstenergieanteile und daraus die f-Green-Funktion berechnet werden. Eine ähnliche Näherung wurde vor einigen Jahren auch als Conserving T-Matrix Approximation (CTMA) über den umständlicheren Slave-Boson-Formalismus eingeführt [KroWölCos97], die Herleitung in dieser Arbeit ist jedoch wesentlich einfacher und direkter.

Nachdem in Kapitel 2 die XNCA als Näherung für das PAM und in Kapitel 4 die Eigenschaften eines SAWs als effektives Band in der DMFT beschrieben wurden, gibt Kapitel 5 einen Überblick über die allgemeine Form der DMFT. Die entstehenden Gleichungen besitzen dieselbe Struktur wie die Coherent Potential Approximation (CPA) aus der Theorie ungeordneter Systeme, die bereits seit 1967 bekannt ist [Sov67, VelKirEhr68, Sov69, EllKruLea74]. Auch die analoge Herleitung über ein effektives Medium und das Einbeziehen aller Beiträge ohne Überkreuzungen in einer diagrammatischen Beschreibung legen eine enge Verbindung der DMFT und CPA nahe. Diese Vermutung bestätigt sich im letzten Abschnitt dieses Kapitels. Es kann gezeigt werden, dass sich die CPA als Spezialisierung der DMFT auf ungeordnete Systeme interpretieren lässt und beide Formulierungen in diesem Fall äquivalent sind.

Nach diesen allgemeinen Betrachtungen über die DMFT werden im nächsten Kapitel die Lösungseigenschaften der Selbstkonsistenzgleichung für ein konkretes physikalisches System untersucht. Hierzu wird das Anderson-Modell im Schrieffer-Wolff-Limes [SchWol66, KeiKim71] behandelt, das in diesem Grenzfall auf ein *sd*-Modell mit zusätzlicher Potentialstreuung führt. Vernachlässigt man die Quanteneigenschaften des Impurity-Spins völlig und behandelt ihn als einen klassischen Vektor, so lässt sich die Streumatrix exakt bestimmen, die ferner über diesen Spin in einem konstanten äußeren Magnetfeld klassisch gemittelt wird. Sowohl in einer analytischen Lösung für einfache Leitungsbanddichten als auch in der numerischen Lösung für das Tight-Binding-Band wird überprüft, ob sich der in [Leu98, KeiLeu00] beschriebene Analytizitätsschnitt im effektiven Band bestätigt. Hierbei stellt man fest, dass der Verzweigungsschnitt in diesem vereinfachten Modell nicht auftritt und somit keine allgemeine Schwierigkeit der DMFT darstellt.

Der Analytizitätsschnitt wurde in der exakten Lösung der DMFT-Gleichung für das quadrierte Lorentz-Band mit einer modellierten Streumatrix gefunden und die daraus resultierende Mehrdeutigkeit in der effektiven Green-Funktion für die Konvergenzprobleme der XNCA verantwortlich gemacht. Seitdem kritisierten einige Autoren die ihrer Meinung nach zu grobe Approximation der f-Green-Funktion in der Arbeit von H. Keiter und T. Leuders [PruMetVol01]. Th. Pruschke, W. Metzner und D. Vollhardt wiesen weiterhin darauf hin, dass eine Verletzung der Analytizitätsbedingungen für die Green-Funktionen im Verlauf der Iteration der Selbstkonsistenzbedingung ebenfalls zu dem beobachteten unphysikalischen Verhalten im effektiven Band führen könne. Diesen Kritikpunkten wird in Kapitel 7 nachgegangen und es wird überprüft, ob der Analytizitätsschnitt eventuell nur ein Artefakt

der in [Leu98, KeiLeu00] benutzten Näherungen darstellt. Hierzu werden zunächst die Konvergenzeigenschaften der CPA untersucht. Aus diesem Spezialfall der DMFT lassen sich wichtige Erkenntnisse für die numerische Behandlung der Selbstkonsistenzgleichung gewinnen, die im folgenden auf das Anderson-Modell angewendet werden. Die lokale Streumatrix wird in den hier durchgeführten Berechnungen zum einen durch zwei verschiedene Modelle a priori vorgegeben, zum anderen mit der NCA selbstkonsistent in jedem Iterationsschritt der DMFT neu bestimmt. In allen Fällen zeigt sich bei einem Anwachsen der Resonanz in der Streumatrix ein Verzweigungsschnitt im effektiven Band, dieser bestätigt sich somit als ein echtes Vielteilchenphänomen im Anderson-Modell.
Den Abschluss der numerischen Betrachtungen bildet eine Analyse und Bewertung der d^{-1}-Korrektur des effektiven Bandes für die CPA und XNCA, die aus der Lace-Entwicklung des SAWs folgt.

Am Ende dieser Arbeit werden die wichtigsten Resultate nochmals zusammengefasst und eine allgemeine Einordnung der Ergebnisse zur Theorie schwerfermionischer Systeme und deren Lösungsmethoden gegeben. Weiterhin werden mögliche zukünftige Forschungsprojekte zu diesem aktuellen Gebiet der Physik vorgestellt, die sich an diese Arbeit anschließen.

Kapitel 2

Anderson-Modell

P. W. Anderson führte 1961 ein Modell zur Beschreibung der Eigenschaften einer magnetischen Störstelle ein, das heute zu den wichtigsten Modellen der theoretischen Festkörperphysik zählt [And61]. C. M. Varma und Y. Yafet verallgemeinerten 15 Jahre später das Anderson-Modell auf eine periodische Anordnung der Störstellen [VarYaf76]. In diesem Kapitel werden zunächst die wichtigsten Eigenschaften dieses Modells erläutert, bevor in den weiteren Abschnitten die störungstheoretischen Methoden und daraus resultierende Näherungen für das Single-Impurity- und das periodische Anderson-Modell beschrieben werden. In [Hew93] findet man eine weitaus umfangreichere Darstellung dieses Themas, das die Physiker während der vergangenen 40 Jahre fortwährend beschäftigt hat.

2.1 Einführung

Im Anderson-Modell beschreibt der übliche Ein-Teilchen-Hamilton-Operator das Leitungsband, das aus delokalisierten Elektronen der s-Schale bei den Übergangsmetallen bzw. der s- und d-Schale bei den Selten-Erd-Elementen gebildet wird.

$$H_c = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c^\dagger_{k\sigma} c_{k\sigma} \tag{2.1}$$

$c^\dagger_{k\sigma}$ bzw. $c_{k\sigma}$ erzeugen bzw. vernichten hierbei ein Bandelektron mit Impuls k, Spin σ und Energie ϵ_k. Orts- und Impulsdarstellung dieser Operatoren hängen über die Fourier-Transformation zusammen.

$$c_{k\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i c_{i\sigma} e^{-ikR_i} \quad \text{und} \quad c_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_{k\sigma} e^{ikR_i} \tag{2.2}$$

Die Elektronen der tiefer liegenden d- bzw. f-Niveaus mit Entartungsgrad N_f, die an ihren Gitterplätzen lokalisiert sind, stellen die magnetischen Störstellen in diesem Modell dar.

$$H_f = \sum_{i,\sigma} \epsilon_f f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \tag{2.3}$$

Die Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren dieser Elektronen am Gitterplatz i mit Spin σ und konstanter Energie ϵ_f werden mit $f_{i\sigma}^\dagger$ bzw. $f_{i\sigma}$ bezeichnet.

Im Gegensatz zu den Bandelektronen kann aufgrund der starken Lokalisation der f-Niveaus die Coulomb-Abstoßung U der Elektronen nicht vernachlässigt werden.

$$H_U = \frac{U}{2} \sum_i \sum_{\sigma,\sigma'}^{\sigma \neq \sigma'} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} f_{i\sigma'}^\dagger f_{i\sigma'} \tag{2.4}$$

Der letzte Anteil des Anderson-Modells koppelt die beiden konkurrierenden Teilsysteme. Er beschreibt den Übergang eines Bandelektrons in ein lokalisiertes Niveau und vice versa. Die Übergangswahrscheinlichkeit wird dabei in der Regel als k-unabhängig angenommen und mit V bzw. $\tilde{V} = \frac{V}{\sqrt{N}}$ bezeichnet.

$$H_V = \sum_{i,\sigma} \left(V f_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + V^* c_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \right) \tag{2.5a}$$

$$= \sum_{i,k,\sigma} \left(\tilde{V} e^{ikR_i} f_{i\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \tilde{V}^* e^{-ikR_i} c_{k\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \right) \tag{2.5b}$$

Das Anderson-Modell wird weiterhin nach der Zahl der Störstellen charakterisiert. Im Falle von nur einem f-Niveau entfällt in den obigen Ausdrücken die Summation über i und man spricht vom Single-Impurity-Anderson-Modell (Abschnitt 2.3). Für eine periodische Anordnung der Störstellen in einer Verbindung erhält man das periodische Anderson-Modell (Abschnitt 2.4). Es kann ebenfalls vorkommen, dass die f-Niveaus statistisch über das Gitter verteilt sind. Diese Situation wurde in [Ott99] ausführlich diskutiert und daher in dieser Arbeit nicht weiter behandelt.

Eine weitere Unterscheidung im Modell ergibt sich aus der relativen Lage von ϵ_f und der Fermi-Energie ϵ_{Fermi}.
Falls die Onsite-Energie der f-Elektronen deutlich oberhalb ϵ_{Fermi} liegt, so sind alle lokalisierten Niveaus unbesetzt und man erhält ein „normales“ metallisches Verhalten ohne magnetische Störstellen.

Eine Fluktuation der f-Besetzung kann bei Experimenten mit hoher zeitlicher Auflösung beobachtet werden, wenn beide Energien dieselbe Größenordnung besitzen. Da sich in diesem Fall bei einer geringeren Zeitauflösung eine nicht-ganzzahlige Besetzung zeigt, wird dieses Parameterregime auch als zwischenvalenter Bereich bezeichnet.
In dieser Arbeit wird ausschließlich der Kondo-Bereich $\epsilon_f \ll \epsilon_{\text{Fermi}}$ betrachtet. Nach den Hundschen Regeln bilden sich hierbei magnetische Momente in den lokalisierten f-Niveaus aus. Allerdings lässt sich der daraus erwartete Para-Magnetismus mit einem Curie-Weiss-Verhalten der Suszeptibilität nur für hohe Temperaturen finden. Unterhalb der Kondo-Temperatur entsteht ein Vielteilchen-Singlett-Zustand mit den umliegenden Leitungselektronen ohne langreichweitige magnetische Ordnung. Das System verhält sich somit Pauli-magnetisch.

In einigen Grenzfällen kann das Anderson-Modell auch exakt gelöst werden. Für $V = 0$ entkoppeln beide Teilsysteme und die Green-Funktionen lassen sich aus den Bewegungsgleichungen bestimmen, die ein in sich geschlossenes Gleichungssystem ergeben. Verschwindet der Wechselwirkungsanteil $U = 0$, so erhält man einen bilinearen Hamilton-Operator, der mit einer Bogolubov-Transformation diagonalisiert werden kann [Hew93]. Das Modell ist ebenfalls im Limes eines unendlich schmalen Leitungsbandes $\epsilon_k = \text{const}$ analytisch lösbar [Ste82, Kei82].

Bei einer allgemeinen Lösung des Modells muss jedoch auf Näherungsmethoden zurückgegriffen werden. Dazu kann man mit einer Feynman-Störungstheorie nach dem einzigen 4-Teilchen-Anteil des Systems, der Coulomb-Wechselwirkung in den f-Niveaus, beginnen [FetWal71]. Dieses Standardverfahren aus der Vielteilchenphysik wurde zuerst 1984 von B. Horvatić und V. Zlatić auf das Anderson-Modell angewendet [HorZla84] und seitdem von einigen Autoren erfolgreich erweitert [SchCzy89b, SchCzy89a, SchCzy90].

Da in realen Systemen U die bei weitem größte Energie im Modell ist, wird als sehr gute Näherung häufig der Grenzfall unendlicher Coulomb-Abstoßung $U \to \infty$ betrachtet, durch den Mehrfachbesetzungen eines Gitterplatzes vollständig verboten werden. Derselbe Limes lässt sich mit einer Einschränkung des Hilbert-Raumes auf leere und einfach-besetzte f-Level erreichen. Dabei muss gewährleistet sein, dass man durch Anwenden eines Erzeugungsoperators stets in diesem eingeschränkten Raum bleibt. Zu diesem Zweck werden modifizierte $\bar{f}$-Operatoren eingeführt, die in (2.3) und (2.5) eingebaut dieselben Erwartungswerte wie die f-Operatoren besitzen, den restringierten

Hilbert-Raum jedoch nicht verlassen können.

$$\bar{f}^\dagger_{i\sigma} = f^\dagger_{i\sigma} \prod_{\sigma'}^{\neq\sigma} \left(1 - f^\dagger_{i\sigma'} f_{i\sigma'}\right) \quad \text{und} \quad \bar{f}_{i\sigma} = \prod_{\sigma'}^{\neq\sigma} \left(1 - f^\dagger_{i\sigma'} f_{i\sigma'}\right) f_{i\sigma} \tag{2.6}$$

Diese Operatoren erlauben es nicht, dass an einem Gitterplatz zwei Teilchen erzeugt werden, d. h. $\bar{f}^\dagger_{i\sigma} \bar{f}^\dagger_{i\sigma'} = 0$ auch für $\sigma \neq \sigma'$. Allerdings erfüllen sie nicht mehr die fermionischen Antikommutator-Relationen, stattdessen gilt

$$[\bar{f}_{i\sigma}, \bar{f}^\dagger_{i\sigma}]_+ = 1 - \sum_{\sigma'}^{\neq\sigma} \bar{f}^\dagger_{i\sigma'} \bar{f}_{i\sigma'} \tag{2.7}$$

Die Hubbard- oder ionischen Transfer-Operatoren, wie die $\bar{f}$ auch genannt werden, führte J. Hubbard 1965 zur Untersuchung der Eigenschaften des nach ihm benannten Modells in einer Projektor-Darstellung ein [Hub63, Hub64a, Hub64b, Hub65].

$$\bar{f}^\dagger_{i\sigma} = X^{(i)}_{\sigma 0} = |i, \sigma\rangle\langle i, 0| \tag{2.8a}$$
$$\bar{f}_{i\sigma} = X^{(i)}_{0\sigma} = |i, 0\rangle\langle i, \sigma| \tag{2.8b}$$
$$\bar{f}^\dagger_{i\sigma}\bar{f}_{i\sigma} = X^{(i)}_{\sigma\sigma} = |i, \sigma\rangle\langle i, \sigma| \tag{2.8c}$$

Weiterhin muss folgende Vollständigkeitsrelation berücksichtigt werden.

$$X^{(i)}_{00} + \sum_{\sigma} X^{(i)}_{\sigma\sigma} = 1 \tag{2.9}$$

Diese Schreibweise verschleiert zwar die korrekten Antikommutator-Relationen, dafür können jedoch viele Eigenschaften der $\bar{f}$ leicht gezeigt werden, z. B. das Verbot von Mehrfachbesetzungen einer Site.

$$X^{(i)}_{\sigma 0} X^{(i)}_{\sigma' 0} = |i, \sigma\rangle \underbrace{\langle i, 0|i, \sigma'\rangle}_{=0} \langle i, 0| = 0 \qquad \text{für } \sigma' \neq 0 \tag{2.10}$$

Im weiteren Verlauf dieser Arbeit wird das Anderson-Modell stets im Limes $U \to \infty$ betrachtet, dadurch entfällt der störende Coulomb-Anteil (2.4). Dazu müssen allerdings die modifizierten $\bar{f}$-Operatoren eingeführt werden, weshalb sich das Anderson-Modell nicht mit den Standardmethoden der Störungstheorie behandeln lässt.

2.2 Bewegungsgleichung und Streumatrix des Anderson-Modells

In diesem Abschnitt werden die Bewegungsgleichungen für das Anderson-Modell aufgestellt, aus denen die Streumatrix abgelesen werden kann. Im allgemeinen ist eine fermionische Green-Funktion wie folgt definiert.

$$G_{AB}(\tau) = \ll A, B \gg(\tau) = -\langle \mathcal{T} A(\tau) B \rangle = \begin{cases} -\frac{1}{\mathcal{Z}} \operatorname{Tr} e^{-\beta H} A(\tau) B & \text{für } \tau > 0 \\ +\frac{1}{\mathcal{Z}} \operatorname{Tr} e^{-\beta H} B A(\tau) & \text{für } \tau < 0 \end{cases} \tag{2.11}$$

Nach Transformation in ein Energiebild erhält man

$$G_{AB}(i\omega_n) = \ll A, B \gg(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau \, e^{i\omega_n \tau} G_{AB}(\tau) \tag{2.12}$$

Hierbei müssen wegen der Antiperiodizität der Green-Funktion $G_{AB}(\tau) = -G_{AB}(\tau - \beta)$ die Frequenzen ω_n auf diskrete Werte eingeschränkt werden, die als Matsubara-Frequenzen bezeichnet werden.

$$\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta} \qquad \text{mit } n \in \mathbb{Z} \tag{2.13}$$

Falls die Green-Funktion für betragsmäßig große Argumente hinreichend schnell abfällt, kann sie eindeutig in die obere oder untere komplexe Halbebene analytisch fortgesetzt werden $i\omega_n \to z$ [Ric80]. Im folgenden werden zur besseren Übersichtlichkeit häufig die Argumente $i\omega_n$ bzw. z weggelassen, falls es zu keinen Missverständnissen führen kann.

Über die Bewegungsgleichungen für die Green-Funktionen, wobei das positive Vorzeichen für fermionische und das negative für bosonische Operatoren gilt,

$$z \ll A, B \gg = \langle [A, B]_\pm \rangle + \ll [A, H]_-, B \gg \tag{2.14a}$$
$$= \langle [A, B]_\pm \rangle + \ll A, [H, B]_- \gg \tag{2.14b}$$

lässt sich der volle Bandpropagator $G_{kk'}(z) = \ll c_{k\sigma}, c^\dagger_{k'\sigma} \gg(z)$ auf eine gemischte $\bar{f}c$-Green-Funktion zurückführen.

$$(z - \epsilon_k) \ll c_{k\sigma}, c^\dagger_{k'\sigma} \gg = \delta_{kk'} + \sum_a \tilde{V}^* e^{-ikR_a} \ll \bar{f}_{a\sigma}, c^\dagger_{k'\sigma} \gg \tag{2.15}$$

Ein weiteres Anwenden von (2.14) liefert

$$(z - \epsilon_{k'}) \ll \bar{f}_{a\sigma}, c^{\dagger}_{k'\sigma} \gg = \sum_b \tilde{V} e^{ik'R_b} \ll \bar{f}_{a\sigma}, \bar{f}^{\dagger}_{b\sigma} \gg \tag{2.16}$$

Der ungestörte Propagator wird im weiteren mit g bezeichnet, eine ausführliche Darstellung der Eigenschaften von g_k findet man in Anhang A.

$$g_k(z) = \frac{1}{z - \epsilon_k} \tag{2.17}$$

In Ortsdarstellung g_{xy} beschreibt er eine Bewegung durch das ungestörte Band von einem Gitterplatz x nach y und ist aufgrund der Periodizität des zugrunde liegenden Gitters translationsinvariant, es gilt somit $g_{xy} = g_{x-z,y-z}$.

$$g_{xy} = \frac{1}{N} \sum_k g_k e^{ik(R_x - R_y)} \quad \text{und} \quad g_k = \sum_y g_{xy} e^{ik(R_y - R_x)} \tag{2.18}$$

Nach diesen Überlegungen lässt sich die Bewegungsgleichung für die volle Green-Funktion angeben.

$$G_{kk'} = g_k \delta_{kk\prime} + g_k T_{kk\prime} g_{k'} \tag{2.19}$$

Hierbei wird durch die im allgemeinen nicht-diagonale Streumatrix $T_{kk'}$ die Wechselwirkung mit den f-Niveaus beschrieben.

$$T_{kk'} = |\tilde{V}|^2 \sum_{a,b} \ll \bar{f}_{a\sigma}, \bar{f}^{\dagger}_{b\sigma} \gg e^{i(k'R_b - kR_a)} \tag{2.20}$$

Die Transformation in den Ortsraum ermöglicht eine anschauliche Interpretation des Ergebnisses.

$$G_{xy} = g_{xy} + \sum_{a,b} g_{xa} \; |V|^2 \ll \bar{f}_{a\sigma}, \bar{f}^{\dagger}_{b\sigma} \gg g_{by} \tag{2.21}$$

Ein Bandelektron kann, um vom Gitterplatz x nach y zu gelangen, entweder ohne Wechselwirkung direkt dorthin propagieren oder es bewegt sich zunächst zu einer Störstelle a, wird von dort zum f-Niveau am Site b gestreut und läuft weiter nach y.

Im Falle des Single-Impurity-Anderson-Modells mit der einzigen Störstelle bei $R_i = 0$ entfällt in der Streumatrix offensichtlich die Summation über a, b. Das volle System besitzt somit keine Translationsinvarianz mehr, daher ist

$G_{kk'}$ nicht-diagonal $G_{kk'} \neq G_{kk}\delta_{kk'}$ und eine Darstellung im Ortsraum bietet sich an.

$$G_{xy}^{\text{SIAM}} = g_{xy} + g_{x0}\,|V|^2 \ll \bar{f}_\sigma, \bar{f}_\sigma^\dagger \gg g_{0y} \tag{2.22}$$

Für den Diagonalteil $G_{00} = G_0$, aus dem die Bandzustandsdichte gewonnen werden kann, erhält man

$$G_0^{\text{SIAM}} = g_0 + g_0\,|V|^2 \ll \bar{f}_\sigma, \bar{f}_\sigma^\dagger \gg g_0 \tag{2.23}$$

Im periodischen Anderson-Modell wird die Translationsinvarianz des Gesamtsystems wieder hergestellt und es gilt

$$G_{kk'}^{\text{PAM}} = \delta_{kk'}\big(g_k + g_k\,|V|^2 \sum_c \ll \bar{f}_{0\sigma}, \bar{f}_{c\sigma}^\dagger \gg e^{ikR_c}\, g_k\big) \tag{2.24}$$

oder in Ortsdarstellung

$$G_{0y}^{\text{PAM}} = g_{0y} + g_{0a}\,|V|^2 \sum_{a,c} \ll \bar{f}_{0\sigma}, \bar{f}_{c\sigma}^\dagger \gg g_{a+c,y} \tag{2.25}$$

Es wird deutlich, dass zur Bestimmung des vollen Propagators die f-Green-Funktion ausgewertet werden kann. Berechnet man im SIAM G mithilfe einer Bandselbstenergie $G(z) = g(z - \Sigma_c(z))$, so besteht ein eindeutiger Zusammenhang zwischen $\Sigma_c(z)$ und $\ll \bar{f}_\sigma, \bar{f}_\sigma^\dagger \gg(z)$.

$$\Sigma_c(z) = \frac{|V|^2 \ll \bar{f}_\sigma, \bar{f}_\sigma^\dagger \gg(z)}{1 + g_0(z)\,|V|^2 \ll \bar{f}_\sigma, \bar{f}_\sigma^\dagger \gg(z)} \tag{2.26}$$

2.3 Single-Impurity-Anderson-Modell

Zunächst wird auf das Anderson-Modell mit nur einer Störstelle eingegangen, die o. B. d. A. in den Ursprung $R_i = 0$ gelegt wird. Dadurch entfällt in allen Termen des Hamilton-Operators die Summation über die Gitterplatzindices i. Durch die Einführung der Hubbard-Operatoren zur Beschreibung des $(U \to \infty)$-Grenzfalls lässt sich das Anderson-Modell nicht mehr mit einer gewöhnlichen Störungstheorie behandeln, da die $\bar{f}$-Operatoren nicht die fermionischen Antikommutator-Relationen besitzen und somit das Wick-Theorem und eine Linked-Cluster-Entwicklung nicht mehr angewendet werden können. Eine diagrammatische Störungstheorie nach der Hybridisierung V, die dieser Besonderheit Rechnung trägt, wurde 1970 von H. Keiter und J. C. Kimball entwickelt und wird im ersten Abschnitt vorgestellt [KeiKim70, KeiKim71]. Anschließend lässt sich eine weit verbreitete Näherung für das SIAM, die Non-Crossing Approximation, in wenigen Schritten herleiten [KeiKim71, KeiCzy83, Kur83]. Eine vollständige Übersicht der störungstheoretischen Behandlung des SIAMs sowie viele numerische Ergebnisse finden sich in [KeiMor84, Bic87, BicCoxWil87].

2.3.1 Störungstheorie für die Zustandssumme

Eine Störungstheorie nach der Hybridisierung geht von einer Darstellung der Zustandssumme $\mathcal{Z}$ als Konturintegral aus, dabei umschließt der Integrationsweg alle Singularitäten des Integranden in mathematisch positiver Richtung.

$$\mathcal{Z} = \operatorname{Tr} e^{-\beta H} = \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z} \operatorname{Tr}(z - H)^{-1} \tag{2.27}$$

Bei der Aufteilung des Hamilton-Operators in einen ungestörten Anteil $H_0 = H_c + H_{\bar{f}}$ und die Hybridisierung H_V wird bereits ein entscheidender Unterschied zur Standard-Störungstheorie deutlich. Aufgrund der Hubbard-Operatoren ist H_0 nicht mehr bilinear in Erzeugern und Vernichtern, eine wesentliche Voraussetzung für das Anwenden des Wick-Theorems ist daher nicht mehr erfüllt. Mit der Summenformel für die geometrische Reihe und der ungestörten Zustandssumme $\mathcal{Z}_0 = \operatorname{Tr} e^{-\beta H_0} = \sum_N e^{-\beta E_N}$ erhält man

$$\mathcal{Z} - \mathcal{Z}_0 = \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z} \operatorname{Tr}\Big((z - H_0)^{-2} \sum_{n=0}^{\infty} H_V\big((z - H_0)^{-1} H_V\big)^n\Big) \tag{2.28}$$

Die Spur über die Eigenzustände $|N\rangle$ des ungestörten Systems $H_0|N\rangle = E_N|N\rangle$ kann nun ausgeführt werden, zur weiteren Vereinfachung verschiebt man zusätzlich die Integrationsvariable um den Bandenergieanteil $z \to z + E_N^c$.

$$\begin{aligned}\mathcal{Z} - \mathcal{Z}_0 = \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z} \sum_N e^{-\beta E_N^c} \\ \times \frac{1}{(z + E_N^c - H_0)^2} \sum_{n=0}^{\infty} \langle N| H_V\big((z + E_N^c - H_0)^{-1} H_V\big)^n |N\rangle\end{aligned} \tag{2.29}$$

Zur Auswertung des Matrixelements werden Sätze vollständiger Basen $\sum_{N_j} |N_j\rangle\langle N_j| = 1$ eingeschoben. An dieser Stelle zeigt sich, dass aufgrund der Teilchenzahlerhaltung der Leitungs- und f-Elektronen nur Summanden mit geradzahligem n einen nicht-verschwindenden Beitrag liefern. Mit den Eigenzuständen $|N_j\rangle$ lassen sich weiterhin die Energienenner bestimmen. Die Zustandssumme $\mathcal{Z}$ bzw. das ungestörte $\mathcal{Z}_0$ faktorisiert außerdem in einen Band- und einen f-Elektronenanteil $\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_c \mathcal{Z}_f$ bzw. $\mathcal{Z}_0 = \mathcal{Z}_c \mathcal{Z}_{f0}$ mit $\mathcal{Z}_c = \operatorname{Tr} e^{-\beta H_c} = \sum_k e^{-\beta \epsilon_k}$ und $\mathcal{Z}_{f0} = \operatorname{Tr} e^{-\beta H_{\bar{f}}} = 1 + N_f e^{-\beta \epsilon_f}$.

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}_f - \mathcal{Z}_{f0} = \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z} \frac{1}{\mathcal{Z}_c} \sum_N e^{-\beta E_N^c} \\ \times \frac{1}{\big(z - (E_N - E_N^c)\big)^2} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{N_1,\ldots,N_n} \frac{\langle N|H_V|N_1\rangle \cdots \langle N_n|H_V|N\rangle}{\prod_{j=1}^n \big(z - (E_{N_j} - E_N^c)\big)}\end{aligned} \tag{2.30}$$

Die Differenzen in den Energienennern beschreiben die Anregungsenergie der Zwischenzustände gegenüber der Anfangsbandenergie E_N^c, z. B. gilt für den ersten Term

$$E_N - E_N^c = \begin{cases} \epsilon_f & \text{falls } |N\rangle \text{ ein } f\text{-Elektron besitzt} \\ 0 & \text{bei leerem } f\text{-Niveau am Anfang} \end{cases} \tag{2.31}$$

Aufgrund der Einschränkung des Hilbert-Raumes auf leere und einfachbesetze f-Zustände muss in den Erwartungswerten jeweils abwechselnd ein f-Elektron erzeugt und vernichtet werden, die Energienenner besitzen daher abwechselnd die Energie ϵ_f bzw. 0, zu der noch die Bandenergie des entsprechenden Zwischenzustands addiert werden muss.
Die übrig bleibenden Erwartungwerte der c-Operatoren lassen sich wegen der Bilinearität von H_c mit dem Wick-Theorem als Summe aller vollständigen Paarkontraktionen schreiben. Hierbei ergibt sich die Fermi-Funktion $f(\epsilon_k)$ und bei einer antizyklischen Kontraktion ein zusätzliches Vorzeichen.

$$\langle c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}\rangle_0 = f(\epsilon_k) = \left(1 + e^{\beta\epsilon_k}\right)^{-1} \tag{2.32a}$$

$$\langle c_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger\rangle_0 = 1 - f(\epsilon_k) = f(-\epsilon_k) \tag{2.32b}$$

Diese Überlegungen ermöglichen eine übersichtliche diagrammatische Darstellung der einzelnen Beiträge zu $\mathcal{Z}_f$, die nach den folgenden Regeln ausgewertet werden können. Für $n = 0$ ergibt sich auch das ungestörte $\mathcal{Z}_{f0}$, das auf direktem Wege jedoch einfacher zu bestimmen ist.

1. *Zeichne $2n$-Punkte in einer vertikalen Reihe, die die Wechselwirkungsvertices auf dem f-Niveau darstellen. Ein besetzter (leerer) Störstellenplatz wird durch eine durchgehende Linie mit nach oben gerichtetem Pfeil (durch eine gestrichelte Linie) beschrieben. Verbinde die Punkte abwechselnd mit diesen Linien, beginne dabei vor dem untersten und ende nach dem obersten.*

2. *Verbinde anschließend die Vertices auf alle möglichen Weisen durch Kreisbögen auf der rechten Seite des Diagramms miteinander, beachte dabei die Richtungen der Pfeile.*

3. *Bezeichne unter Berücksichtigung der Spinerhaltung alle halbkreisförmigen Bandelektronenlinien mit Impuls- und Spinindices.*

4. *Jede nach oben bzw. unten laufende Bandelektronenlinie mit Indices (k, σ) liefert einen Faktor $|\tilde{V}|^2\big(1 - f(\epsilon_k)\big)$ bzw. $|\tilde{V}|^2 f(\epsilon_k)$.*

Jeder leere bzw. besetzte Zwischenzustand ergibt einen Faktor

$$P_0^{(0)}(z - E_{up} + E_{down}) = \frac{1}{z - E_{up} + E_{down}} \tag{2.33a}$$

$$\textit{bzw.} \quad P_f^{(0)}(z - E_{up} + E_{down}) = \frac{1}{z - \epsilon_f - E_{up} + E_{down}} \tag{2.33b}$$

E_{up} bzw. E_{down} stellen die Energien der hinauf- bzw. herablaufenden Bandelektronenlinien des Zwischenzustands dar.

5. *Multipliziere mit $(-)^c$, dabei gibt c die Zahl der Überkreuzungen von Bandelektronenlinien an. Summiere abschließend über alle internen Freiheitsgrade und bilde das Konturintegral, das alle Singularitäten des Integranden (Diese liegen auf $\mathfrak{Im}\, z = 0$.) umschließt.*

$$\oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z}$$

Die hierbei entstehenden Diagramme lassen sich in Prozesse, die mit einem leeren oder einem einfach-besetzen f-Niveau beginnen, unterteilen. Diese werden in den Propagatoren $P_0(z)$ und $P_f(z)$ zusammengefasst und die Zustandssumme schreibt sich wie folgt.

$$\mathcal{Z}_f = \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z}\big(P_0(z) + N_f P_f(z)\big) \tag{2.34}$$

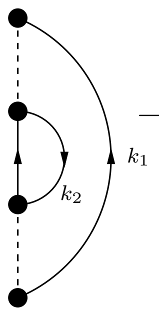
Das Einführen von Selbstenergien $\Sigma_0(z)$ und $\Sigma_f(z)$ erlaubt die Resummation von Diagrammen mithilfe geometrischer Reihen.

$$P_0(z) = P_0^{(0)}(z - \Sigma_0(z)) = \frac{1}{z - \Sigma_0(z)} \tag{2.35a}$$

$$P_f(z) = P_f^{(0)}(z - \Sigma_f(z)) = \frac{1}{z - \epsilon_f - \Sigma_f(z)} \tag{2.35b}$$

Wie in der Standard-Störungstheorie betrachtet man dazu nur diejenigen Prozesse, in denen der Anfangszustand $|N\rangle$ zwischendurch nicht mehr angenommen wird, dies entspricht denjenigen Diagrammen, die nicht durch Aufspalten einer f-Elektronenlinie in zwei separate Anteile zerfallen. Bei der Bestimmung des Selbstenergiebeitrags nach den obigen Diagrammregeln dürfen die unterste und oberste f-Linie nicht berücksichtigt werden und die abschließende Integration entfällt. Details dieses Verfahrens und eine formale Herleitung mit Projektoren $P_N = |N\rangle\langle N|$ und $Q_N = 1 - P_N$ findet man in [KeiMor84].

Das Anwenden der Diagrammregeln soll zur Verdeutlichung an zwei Beiträgen zur Selbstenergie demonstriert werden.



$$\longrightarrow \quad N_f|\tilde{V}|^4 \sum_{k_1,k_2} \frac{\big(1-f(\epsilon_{k_1})\big)f(\epsilon_{k_2})}{(z-\epsilon_{k_1})^2(z-\epsilon_{k_1}+\epsilon_{k_2})} \tag{2.36}$$

$$-N_f|\tilde{V}|^6 \sum_{k_1,k_2,k_3} \frac{f(\epsilon_{k_1})}{(z-\epsilon_f+\epsilon_{k_1})(z+\epsilon_{k_1}-\epsilon_{k_2})} \times \frac{\big(1-f(\epsilon_{k_2})\big)f(\epsilon_{k_3})}{(z-\epsilon_f+\epsilon_{k_1}-\epsilon_{k_2}+\epsilon_{k_3})(z-\epsilon_{k_2}+\epsilon_{k_3})(z-\epsilon_f+\epsilon_{k_3})} \quad \longleftarrow \tag{2.37}$$

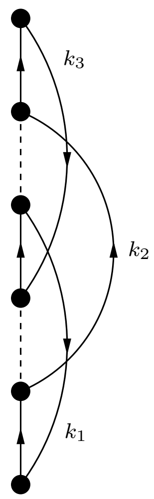


Abbildung 2.1 Beispiele zu den Diagrammregeln

An diesen zwei Beispielen wird ebenfalls deutlich wie der Skalierungsfaktor $\sqrt{N}^{-1}$ der Hybridisierung V in die Berechnung eingeht. Die Summationen über k_i, die jeweils einen Vorfaktor $|\tilde{V}|^2 = \frac{|V|^2}{N}$ besitzen, werden in Integrale über die Bandzustandsdichte $\rho(\epsilon)$ umgeformt.

$$\frac{|V|^2}{N}\sum_k F(\epsilon_k) = |V|^2 \int_0^\infty d\epsilon\, F(\epsilon)\, \underbrace{\frac{1}{N}\sum_k \delta(\epsilon-\epsilon_k)}_{=\rho(\epsilon)} = |V|^2 \int_0^\infty d\epsilon\, \rho(\epsilon) F(\epsilon) \tag{2.38}$$

Somit geht die Gesamtzahl der Gitterplätze N wie bei der Bestimmung der Streumatrix in Abschnitt 2.2 nur als Normierung bei der Mittelung über die Brillouin-Zone ein.

2.3.2 Störungstheorie für die *f*-Green-Funktion

Die Störungstheorie dieses Abschnittes kann auf die Berechnung von Green-Funktionen ausgeweitet werden, deren allgemeine Definition bereits in Abschnitt 2.2 gegeben wurde. Ausgangspunkt ist auch hier eine Konturintegraldarstellung der Green-Funktion

$$G_{AB}(i\omega_n) = \frac{1}{2\pi i \mathcal{Z}} \oint dz\, e^{-\beta z}\, \mathrm{Tr}\left((z-H)^{-1}A(z+i\omega_n-H)^{-1}B\right) \tag{2.39}$$

die für die f-Green-Funktion $G_f(i\omega_n) = \ll \bar{f}_\sigma, \bar{f}_\sigma^\dagger \gg(i\omega_n)$ nach einigen analogen Umformungen auf dieselben Diagrammregeln wie oben führt mit folgenden Änderungen bzw. Erweiterungen.

1*. *Die Linie vor dem ersten Vertex ist fortzulassen und es ist mit einer durchgehenden Linie, also mit einem besetzten f-Level, zu beginnen. Weiterhin sind der erste und ein weiterer gerader Vertex als externe Vertices hervorzuheben, die keine Faktoren $\tilde{V}$ erhalten.*

2*. *Die externen Vertices werden auf der linken Seite des Diagramms mit einem herablaufenden Kreisbogen mit Energie $i\omega_n$ verbunden.*

4*. *Diese zusätzliche externe Linie muss bei der Bestimmung der Energienenner berücksichtigt werden.*

5*. *Bilde abschließend das Konturintegral, das die Singularitäten bei $\mathfrak{Im}\, z = 0$ und $\mathfrak{Im}\, z = -i\omega_n$ umschließt.*

$$\frac{1}{Z_f} \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z}$$

2.3.3 Non-Crossing Approximation

Mit den obigen Diagrammregeln lässt sich die Zustandssumme bis zu jeder beliebigen, aber endlichen Ordnung $|V|^{2n}$ auswerten. Ein solches Verfahren wird jedoch schnell unpraktikabel, da die Zahl der zu berücksichtigen Prozesse sehr stark mit der Ordnung wächst. Einen Ausweg stellt eine Renormalisierung der Propagatoren auf dem f-Niveau dar, die im einfachsten Fall auf die Non-Crossing Approximation führt [KeiKim71, Kur83, KeiCzy83].
Um einen selbstkonsistenten Formalismus zu erhalten werden in den Diagrammregeln des vorherigen Abschnittes die ungestörten Propagatoren $P_0^{(0)}(z)$ und $P_f^{(0)}(z)$ durch das volle $P_0(z)$ und $P_f(z)$ ersetzt. Dieses Verfahren entspricht dem bekannten Vorgehen in der Vielteilchenphysik.

Als einfachste Näherung für Σ_0 und Σ_f betrachtet man die ersten beiden Diagramme der Selbstenergieentwicklung.

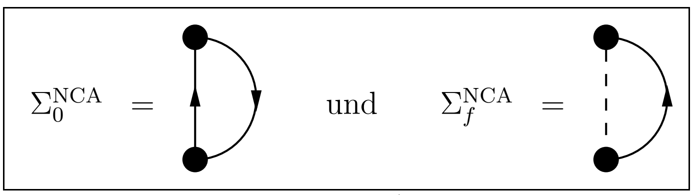


Abbildung 2.2 NCA-Selbstenergien

Diese Näherung, die Non-Crossing Approximation, beinhaltet alle Beiträge ohne sich überkreuzende Bandelektronenlinien und enthält somit eine unendliche Anzahl an Diagrammen. Dies führt auf folgendes Gleichungssystem.

$$\Sigma_0^{\mathrm{NCA}}(z) = N_f|\tilde{V}|^2 \sum_k f(\epsilon_k) P_f(z+\epsilon_k) \tag{2.40a}$$

$$\Sigma_f^{\mathrm{NCA}}(z) = |\tilde{V}|^2 \sum_k \big(1 - f(\epsilon_k)\big) P_0(z-\epsilon_k) \tag{2.40b}$$

Nach Umformen der k-Summation in Integrale über die Banddichte erhält man zwei gekoppelte nicht-lineare Integralgleichungen, die im allgemeinen nur numerisch behandelbar sind.

$$\Sigma_0^{\mathrm{NCA}}(z) = N_f\,|V|^2 \int d\epsilon\,\rho(\epsilon) f(\epsilon) P_f(z+\epsilon) \tag{2.41a}$$

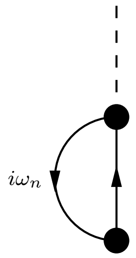
$$\Sigma_f^{\mathrm{NCA}}(z) = |V|^2 \int d\epsilon\,\rho(\epsilon)\big(1 - f(\epsilon)\big) P_0(z-\epsilon) \tag{2.41b}$$

Für ein kastenförmiges Leitungsband der Breite $2D$ können diese Gleichungen im Limes $T \to 0$ auf ein Differentialgleichungssystem mit den Anfangsbedingungen $\Sigma_0^{\mathrm{NCA}}(-D) = \Sigma_f^{\mathrm{NCA}}(-D) = 0$ zurückgeführt werden, das auch analytisch lösbar ist [Ina79, Mül84].

$$\frac{\partial \Sigma_0^{\mathrm{NCA}}(z)}{\partial z} = N_f \frac{|V|^2}{2D} P_f(z) \tag{2.42a}$$

$$\frac{\partial \Sigma_f^{\mathrm{NCA}}(z)}{\partial z} = \frac{|V|^2}{2D} P_0(z) \tag{2.42b}$$

Aus den Selbstenergien lässt sich ebenfalls die f-Green-Funktion in der NCA bestimmen. Dazu betrachtet man das nebenstehende Diagramm, das wiederum alle nicht-überkreuzenden Anteile berücksichtigt.



$$G_f^{\mathrm{NCA}}(i\omega_n) = \frac{1}{2\pi i \mathcal{Z}^{\mathrm{NCA}}} \oint dz\, e^{-\beta z} P_0(z) P_f(z+i\omega_n) \tag{2.43}$$

Die folgende Abbildung zeigt eine typische f-Zustandsdichte in dieser Näherung.

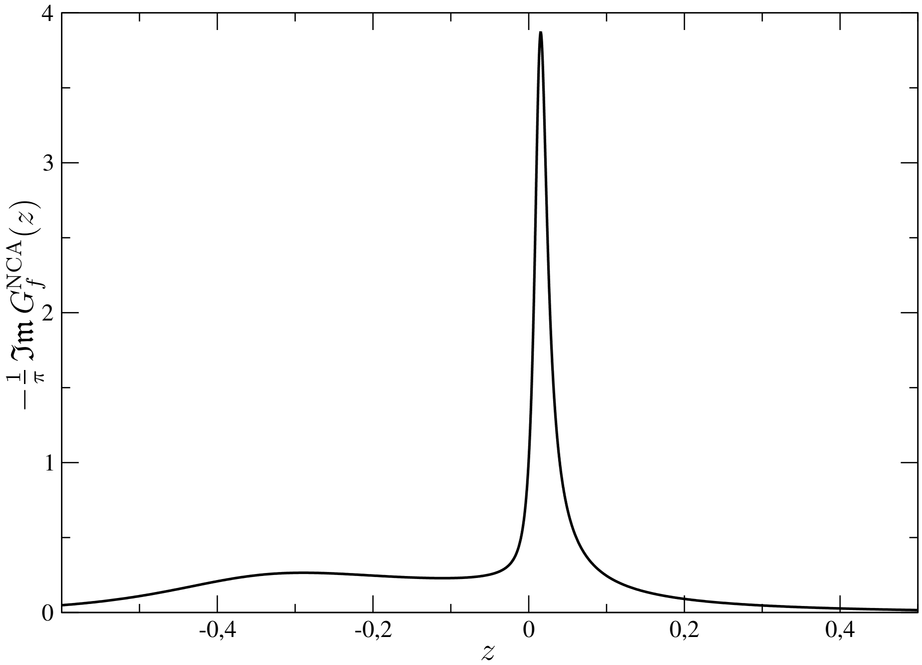


Abbildung 2.3 f-Zustandsdichte in der NCA für $T = 90\,\mathrm{K}$ und $t = 0.282\,\mathrm{eV}$, $\epsilon_f = -0.2\,\mathrm{eV}$, $N_f = 6$, $|V|^2 = 0.011\,(\mathrm{eV})^2$, $\mu = 0\,\mathrm{eV}$

Die Temperatur wurde so gewählt, dass sie deutlich unterhalb der Kondo-Temperatur T_K liegt (Anderson-Breite $W_0 = N_f\,|V|^2\,\rho(0)$, Bandbreite $D = \sqrt{\langle\epsilon_k^2\rangle} = \sqrt{\pi}\,t = 0.4\,\mathrm{eV}$).

$$k_B T_K = D\left(\frac{W_0}{D}\right)^{\frac{1}{N_f}} \exp\left(\frac{\epsilon_f}{W_0}\right) \quad \Rightarrow \quad T_K = 166\ \mathrm{K} \tag{2.44}$$

Man erkennt einen scharfen Peak etwas oberhalb der Fermi-Kante $\epsilon_{\mathrm{Fermi}} = 0$, der als Abrikosov-Suhl-Resonanz bezeichnet wird und ein echtes Vielteilchen-phänomen darstellt. Ein weiteres Maximum, deutlich breiter und schwächer als das erste, zeigt sich in der Nähe der Onsite-Energie ϵ_f der f-Elektronen.

2.4 Periodisches Anderson-Modell

Die Störungstheorie des vorherigen Abschnittes lässt sich auf das periodische Anderson-Modell verallgemeinern und es können wie für das Ein-Störstellen-Modell Diagrammregeln angegeben werden, mit denen die Zustandssumme und die f-Green-Funktion in beliebiger Ordnung prinzipiell berechnet werden können [GreKei81]. Leider entsteht durch die zusätzlichen Intersite-Beiträge schon in niedriger Ordnung eine große Zahl an Diagrammen, so dass für die Bestimmung der oben genannten Größen andere Methoden verwendet werden müssen. Dies rechtfertigt die nur kurze Vorstellung der störungstheoretischen Behandlung des PAMs und zeigt die Notwendigkeit der Approximation von Gittermodellen, die im weiteren Verlauf dieser Arbeit ausführlich vorgestellt und erweitert wird.

2.4.1 Störungstheorie für die Zustandssumme

Im Gegensatz zum Ein-Störstellen-Modell wird in der störungstheoretischen Behandlung des PAMs die Zustandssumme nicht nach der Ordnung $2n$ der Hybridisierungsstärke $|V|^{2n}$, sondern nach der Zahl p der beteiligten Gitterplätze entwickelt und dadurch eine Aufspaltung in On- und Intersite-Anteile erreicht.
In der Darstellung der Zustandssumme als iteriertes Zeitintegral, die aus der Standard-Vielteilchenphysik folgt [FetWal71], ist bereits berücksichtigt, dass aufgrund der Teilchenzahlerhaltung nur Terme gerader Potenz in V beitragen.

$$\frac{\mathcal{Z}}{\mathcal{Z}_0} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\beta} [d\tau_{2n}] \, \langle H_V(\tau_1) \cdots H_V(\tau_{2n}) \rangle_0 \tag{2.45}$$

Das umklammerte Differential $[d\tau_{2n}]$ beschreibt hierbei die Zeitordnung des Integranden, die durch die Einführung eines kombinatorischen Faktors $\frac{1}{(2n)!}$ umgangen werden kann.

$$\int_0^{\beta} [d\tau_{2n}] = \int_0^{\beta} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \cdots \int_0^{\tau_{2n-2}} d\tau_{2n-1} \int_0^{\tau_{2n-1}} d\tau_{2n} \tag{2.46a}$$

$$= \frac{1}{(2n)!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \int_0^{\beta} d\tau_2 \cdots \int_0^{\beta} d\tau_{2n-1} \int_0^{\beta} d\tau_{2n} \tag{2.46b}$$

Die im PAM hinzugekommenden Summationen über die Störstellen $R_1, \ldots, R_n$ lassen sich aus dem Erwartungswert herausziehen und können in jeder Ordnung $|V|^{2n}$ in eine Summe über die $1 \leq p \leq n$ beteiligten Sites zerlegt werden. Auf diesen p Gitterplätzen finden jeweils $2 \leq 2m_p \leq 2(n-(p-1))$ Wechselwirkungen mit dem lokalen f-Niveaus statt, wobei es insgesamt genau $\sum_j 2m_j = 2n$ Prozesse gibt. Anschließend muss noch über die beteiligten Gitterplätze $R_1, \ldots, R_p$ summiert werden, die zur Vermeidung von Überzählungen paarweise verschieden sein müssen, was durch das Ungleichheitszeichen symbolisiert wird.

$$\sum_{R_1,\ldots,R_n} \longrightarrow \sum_{p=1}^{n} \sum_{\substack{m_1,\ldots,m_p=1 \\ \sum_j m_j=n}}^{n} \sum_{R_1,\ldots,R_p}^{\neq} \tag{2.47}$$

Die lokalen Hybridisierungsprozesse $H_V^{(R_i)}$ in den Erwartungswerten von (2.45) werden nach den Sites R_i geordnet. Zudem lassen sich alle Anteile mit gleichem Beitrag zusammenfassen, wodurch sich folgender kombinatorischer Faktor ergibt.

$$\binom{2n}{2m_1}\binom{2n-2m_1}{2m_2}\cdots\binom{2n-2m_1-\cdots-2m_{p-1}}{2m_p} = (2n)!\prod_{j=1}^{p}\frac{1}{(2m_j)!} \tag{2.48}$$

Wegen (2.46b) kürzt sich in der Bestimmung der Zustandssumme der Faktor $(2n)!$ heraus und mithilfe der übrig bleibenden $\frac{1}{(2m_j)!}$ lässt sich eine Zeitordnung auf den einzelnen Gitterplätzen einführen. Weiterhin entfallen die Summationsbeschränkung $\sum_j m_j = n$ und die Summation über die Ordnung $\sum_{n=1}^{\infty}$, falls die Summen über p und $m_1, \ldots, m_p$ bis unendlich ausgeweitet werden.

$$\begin{aligned}\frac{\mathcal{Z}}{\mathcal{Z}_0} = 1 + \sum_{p=1}^{\infty} \sum_{m_1,\ldots,m_p=1}^{\infty} \sum_{R_1,\ldots,R_p}^{\neq} \int_0^\beta [d\tau_{2m_1}^{(R_1)}] \cdots \int_0^\beta [d\tau_{2m_p}^{(R_p)}] \\ \times \langle \mathcal{T}\big(H_V^{(R_1)}(\tau_1^{(R_1)}) \cdots H_V^{(R_1)}(\tau_{2m_1}^{(R_1)}) \cdots H_V^{(R_p)}(\tau_1^{(R_p)}) \cdots H_V^{(R_p)}(\tau_{2m_p}^{(R_p)})\big)\rangle_0\end{aligned} \tag{2.49}$$

Die Zeitabhängigkeit der Erzeuger und Vernichter wird im Wechselwirkungsbild dargestellt.

$$\bar{f}_{i\sigma}(\tau) = e^{-\tau\epsilon_f}\bar{f}_{i\sigma} \qquad \bar{f}_{i\sigma}^\dagger(\tau) = e^{\tau\epsilon_f}\bar{f}_{i\sigma}^\dagger \tag{2.50a}$$

$$c_{k\sigma}(\tau) = e^{-\tau\epsilon_k}c_{k\sigma} \qquad c_{k\sigma}^\dagger(\tau) = e^{\tau\epsilon_k}c_{k\sigma}^\dagger \tag{2.50b}$$

Der ungestörte Erwartungswert $\langle\cdots\rangle_0$ in (2.49) faktorisiert in einen Band- und einen f-Elektronenanteil. Letzterer ergibt die Besetzungswahrscheinlichkeiten der jeweiligen Sites am Anfang.

$$P_0 = \frac{1}{1+N_f e^{-\beta\epsilon_f}} \quad \text{und} \quad P_f = \frac{e^{-\beta\epsilon_f}}{1+N_f e^{-\beta\epsilon_f}} \tag{2.51}$$

Die Erwartungswerte der c-Operatoren werden mit dem Wick-Theorem ausgewertet, wobei bei der Berechnung der Zweierkontraktionen unterschieden werden muss, ob sich beide Operatoren auf denselben oder auf zwei verschiedene Sites beziehen. Im ersten Fall ergeben sich wie im SIAM Fermi-Funktionen.

$$\langle c^\dagger_{k\sigma}(\tau_1^{(R_i)}) c_{k'\sigma'}(\tau_2^{(R_i)})\rangle_0 = \delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'}\, e^{\epsilon_k(\tau_1^{(R_i)}-\tau_2^{(R_i)})} f(\epsilon_k) \tag{2.52a}$$

$$\langle c_{k'\sigma'}(\tau_2^{(R_i)}) c^\dagger_{k\sigma}(\tau_1^{(R_i)})\rangle_0 = \delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'}\, e^{\epsilon_k(\tau_1^{(R_i)}-\tau_2^{(R_i)})} \big(1 - f(\epsilon_k)\big) \tag{2.52b}$$

Sind zwei Gitterplätze beteiligt, so wird ein echter Intersite-Prozess beschrieben und man erhält eine Band-Green-Funktion des ungestörten Systems.

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{T}\big(c^\dagger_{k\sigma}(\tau^{(R_i)}) c_{k'\sigma'}(\tau^{(R_j)})\big)\rangle_0 &= \delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'}\, g_k(\tau^{(R_j)} - \tau^{(R_i)}) &(2.52c)\\ &= \delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'}\, \frac{1}{\beta}\sum_n e^{i\omega_n(\tau^{(R_i)}-\tau^{(R_j)})} g_k(i\omega_n) &(2.52d)\end{aligned}$$

Zur vollständigen Analogie mit dem SIAM müssen die Zeitintegrale in ein Konturintegral umgeschrieben werden. Ein solches Verfahren stellte C. Bloch 1965 vor [Blo65].

$$\int_0^\beta [d\tau_n] \exp\Big(\sum_{j=1}^n \tau_j E_j\Big) = \frac{(-1)^n}{2\pi i} \oint dz\, e^{-\beta z} \frac{1}{(z-\Delta_0)\cdots(z-\Delta_n)} \tag{2.53}$$

Die Hilfsgrößen Δ_j berechnen sich aus den Energien E_j in einfacher Weise.

$$\Delta_0 = 0 \quad \text{und} \quad \Delta_l = -\sum_{j=1}^{l} E_j \tag{2.54}$$

Für das PAM lässt sich ebenfalls eine diagrammatische Beschreibung einführen, die den Ein-Störstellen-Formalismus durch die Hinzunahme von Intersite-Prozessen erweitert. Die vollständigen Diagrammregeln und eine ausführliche Darstellung der Störungstheorie findet man in [GreKei81].

2.4.2 Single-Site-Näherungen für das PAM

Wie in der NCA für das SIAM lässt sich auch für das Gittermodell eine selbstkonsistente Näherung formulieren, die Anteile jeder Ordnung in V aufsummiert. Diese Extended Non-Crossing Approximation wurde zuerst 1985 von Y. Kuramoto eingeführt [Kur85] und ist äquivalent mit dem Hilfsfeldformalismus von G. Hülsenbeck und Q. Qin [HülQin94]. N. Grewe stellte 1987 mit der Lattice Non-Crossing Approximation eine weitere Näherung für das PAM vor [Gre87], die durch Parameterintegration aus der XNCA folgt [KeiLeuMelSch95]. Im Unterschied zu den beiden anderen Single-Site-Näherungen behandeltet die LNCA das renormierte Band nicht selbstkonsistent. Daher wird auf sie im weiteren Verlauf der Arbeit nicht eingegangen und stattdessen auf die Originalarbeit verwiesen.

Extended Non-Crossing Approximation

In der XNCA wird das periodische System auf ein Modell mit nur einer Störstelle abgebildet, bei dem ein effektives Leitungsband den Einfluss der anderen Störstellen beschreibt. Das korrespondierende Ein-Störstellen-Problem lässt sich z. B. mit der NCA behandeln. Ein solches Verfahren, das in ähnlicher Weise auf viele Modelle der Festkörperphysik angewendet werden kann, bezeichnet man als Dynamische-Mean-Field-Theorie, auf die detailliert in Kapitel 5 eingegangen wird. Die wichtigsten Gleichungen und Näherungen, die die XNCA für das PAM beinhaltet, sollen jedoch an dieser Stelle kurz aufgeführt werden.

Zu der Lösung des Ein-Störstellen-Modells kommt in der DMFT als weitere Schwierigkeit die Bestimmung des effektiven Bandes $\mathcal{G}$ hinzu. Hierzu wählt man für $\mathcal{G}$ einen Self-Avoiding Walk durch das zugrunde liegende Gitter, wobei das Elektron an jeder besuchten Site mit einer lokalen Streumatrix t gestreut wird. Aus der Bewegungsgleichung (2.22) ergibt sich t als proportional zur f-Green-Funktion.

$$t(z) = |V|^2 \, G_f(z) \tag{2.55}$$

Leider kann der Propagator $\mathcal{G}$ eines SAWs nur näherungsweise z. B. mit der Lace-Entwicklung bestimmt werden. In einer diagrammatischen Darstellung des SAWs wie in Kapitel 4 lassen sich alle Anteile ohne Überkreuzungen aufsummieren und man erhält eine Selbstkonsistenzgleichung für den Diagonalteil $\mathcal{G}_0$.

$$\mathcal{G}_0 = \Big\langle \frac{g}{1 - t(g - \mathcal{G}_0)} \Big\rangle \tag{2.56}$$

Aufgrund des dimensionalen Skalierungsverhaltens der g_{xy} löst diese Gleichung den SAW exakt im Limes unendlicher Raumdimensionen.

Die Näherungen, die bei der Berechnung des SAWs gemacht wurden, sind nicht die einzigen in der XNCA. Durch die Abbildung auf ein Ein-Störstellen-System mit einer lokalen Streumatrix werden Streuprozesse zwischen mehreren Sites, die im echten Gittermodell auftreten, völlig vernachlässigt. Außerdem entstehen durch das Einsetzen des effektiven Bandes in die NCA-Gleichungen für die f-Green-Funktion unphysikalische Prozesse, da Gitterplätze, die bereits durch die effektive Dichte in der Berechnung der Streumatrix besucht wurden, auch nochmals im zu bestimmenden SAW vorkommen können. Diese Überzählungen verschwinden jedoch genau wie die nicht berücksichtigten zusätzlichen Multi-Site-Streuungen wegen der dimensionalen Abhängigkeit der ungestörten Propagatoren im Grenzfall $d \to \infty$. Die XNCA löst das PAM in diesem Limes daher exakt.

Hilfsfeldformalismus

G. Hülsenbeck und Q. Qin bildeten mit einem zeitabhängigen Hilfsfeld λ das PAM auf ein Ein-Störstellen-Problem mit effektiven Band ab [HülQin94]. Dieser Formalismus wurde von P. C. Martin und J. Schwinger von der Quantenfeldtheorie auf die Vielteilchenphysik übertragen [MarSch59]. Aus den Bewegungsgleichungen für das verallgemeinerte Anderson-Modell erhält man

$$\tilde{G}_c(z) = \frac{1}{z-\lambda} \qquad \tilde{G}_f(z) = \frac{1}{z-\epsilon_f-\Sigma_f} \tag{2.57a}$$

$$G_c(z) = \frac{1}{z-\lambda-|V|^2\,\tilde{G}_f(z)} \qquad G_f(z) = \frac{1}{z-\epsilon_f-\Sigma_f-|V|^2\,\tilde{G}_c(z)} \tag{2.57b}$$

Hierbei beschreibt $\tilde{G}_c$ die effektive und G_c die wahre Band-Green-Funktion. Die lokale f-Green-Funktion G_f wird über die NCA-Gleichungen bestimmt, das effektive $\tilde{G}_f$ stellt nur eine zusätzliche Hilfsgröße dar, die zwar die analytischen Eigenschaften einer Green-Funktion, aber keine physikalische Interpretation besitzt.
In unendlichen Raumdimensionen wird die f-Selbstenergie Σ_f lokal [BraMie89] und es ergibt sich folgende Selbstkonsistenzgleichung für G_c.

$$G_c = \langle \frac{g}{1-|V|^2\,\tilde{G}_f\,g} \rangle \tag{2.58}$$

Nach Elimination der zwei Hilfsgrößen λ und Σ_f in (2.57) lassen sich die Bewegungsgleichungen für die wahren Green-Funktionen angeben, die dieselbe Struktur wie in der DMFT besitzen (5.32).

$$G_c = \tilde{G}_c + \tilde{G}_c\,|V|^2\,G_f\,\tilde{G}_c \qquad G_c = \tilde{G}_c + \tilde{G}_c\,|V|^2\,\tilde{G}_f\,G_c \tag{2.59a}$$

$$G_f = \tilde{G}_f + \tilde{G}_f\,|V|^2\,G_c\,\tilde{G}_f \qquad G_f = \tilde{G}_f + \tilde{G}_f\,|V|^2\,\tilde{G}_c\,G_f \tag{2.59b}$$

Durch Einsetzen von (2.58) in die obige Gleichung lässt sich die Selbstkonsistenzbedingung der XNCA (2.56) aus der Hilfsfeldformulierung gewinnen und die Äquivalenz beider Ansätze ist gezeigt.

$$\tilde{G}_c = \langle \frac{g}{1-|V|^2\,G_f(g-\tilde{G}_c)} \rangle \tag{2.60}$$

Kapitel 3

Erweiterung der Non-Crossing Approximation

Die Non-Crossing Approximation, die im vorherigen Kapitel eingeführt wurde, gehört zu den am weitesten verbreiteten Näherungen für das Ein-Störstellen-Anderson-Modell. Mit ihr lässt sich das Ausbilden der charakteristischen Abrikosov-Suhl-Resonanz an der Fermi-Kante unterhalb der Kondo-Temperatur T_K erklären, deren Peak in der NCA allerdings ein wenig überschätzt wird [Hew93]. Bei noch tieferen Temperaturen $T \ll T_K$ ergibt sich jedoch aus der NCA nicht das erwartete Fermi-Flüssigkeits-Verhalten. Insbesondere werden die dort geltenden Summenregeln nicht erfüllt [Bic87, BicCoxWil87], z. B. die Friedel-Summenregel für die f-Besetzung n_f an der Fermi-Kante bei $T = 0$ [LanAmb61, Lan66].

$$\rho_f(\epsilon_{\text{Fermi}})\big|_{T=0} = \frac{1}{\pi\Gamma}\sin^2\big(\frac{\pi n_f}{N_f}\big)\Big|_{T=0} \quad \text{mit } \Gamma = \pi\rho(\epsilon_{\text{Fermi}})\,|V|^2 \tag{3.1}$$

Die Schwellenexponenten α_0 und α_f, die die Divergenz der Propagatoren

$$P_0(z) \sim A_0|z - E_0|^{-\alpha_0} \quad \text{und} \quad P_f(z) \sim A_f|z - E_0|^{-\alpha_f} \tag{3.2}$$

an einer Schwellenenergie E_0 beschreiben, werden in der NCA ebenfalls nicht korrekt reproduziert [KroWölCos97].

In den letzten Jahren wurden daher einige Versuche unternommen die NCA zu verbessern, die zumeist auf dem Slave-Boson-Formalismus basieren [KroWölCos97, HauKirKroWöl01].

Die Verallgemeinerung in dieser Arbeit geht wie die ursprüngliche NCA von einer Darstellung des Anderson-Modells mit Hubbard-Operatoren aus und verwendet die diagrammatische Störungstheorie aus Abschnitt 2.3. Hierbei wird die NCA um eine unendliche Zahl an Crossing-Beiträgen erweitert, wobei die Herleitung aus einem erzeugenden Funktional die Erfüllung der Erhaltungssätze in dieser Näherung sicherstellt.

3.1 Erzeugendes Funktional der Erweiterung

Eine Verallgemeinerung der NCA wird in diesem Kapitel aus dem erzeugenden Funktional Φ des Anderson-Modells hergeleitet, dessen unterschiedliche Darstellungen in Anhang B beschrieben werden. Dieser Formalismus, der auch als erhaltende Näherung bezeichnet wird, geht auf G. Baym und L. P. Kadanoff zurück [BayKad61, Bay62].
In einer diagrammatischen Beschreibung besteht Φ aus allen irreduziblen Anteilen mit renormalisierten Green-Funktionen $P_0(z)$ und $P_f(z)$. Die gesuchten Selbstenergien $\Sigma_0(z)$ und $\Sigma_f(z)$ lassen sich daraus durch Funktionalableitung bestimmen, das in einem Diagramm dem Aufschneiden der verschiedenen f-Niveau-Zustände entspricht.

$$\frac{\delta\Phi}{\delta P_0(z)} = \frac{e^{-\beta z}}{2\pi i}\Sigma_0(z) \quad \text{und} \quad \frac{\delta\Phi}{\delta P_f(z)} = \frac{e^{-\beta z}}{2\pi i}N_f\Sigma_f(z) \tag{3.3}$$

In der hier vorgestellten Erweiterung der NCA berücksichtigt man alle erzeugenden Funktionale, bei denen jeweils zwei drittnächste Vertices mit einer Bandelektronenlinie verbunden werden. Außer in $\mathcal{O}(|V|^2)$ und $\mathcal{O}(|V|^6)$ gibt es in jeder Ordnung zwei Funktionale dieser Art, eines mit gegen den (Typ a) und eines mit im (Typ b) Uhrzeigersinn laufenden Bandelektronenlinien.

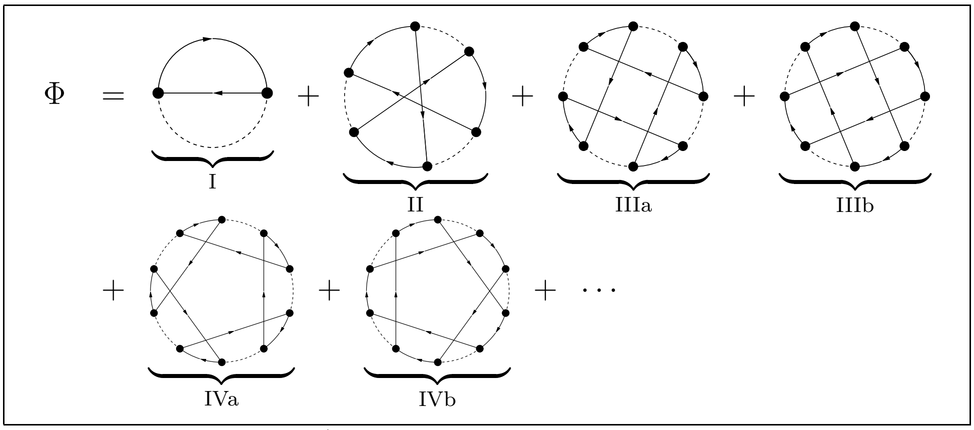


Abbildung 3.1 Approximation des erzeugenden Funktionals

3.2 Selbstenergieerweiterung

Aufgrund der hohen Symmetrie entstehen aus jedem Funktional genau zwei Selbstenergiediagramme, jeweils ein Beitrag zu $\Sigma_0(z)$ und einer zu $\Sigma_f(z)$. Aus (I) folgt direkt die aus Abschnitt 2.3.3 bekannte NCA mit ihrem gekoppelten

Integralgleichungssystem.

$$\Sigma_0^{\mathrm{NCA}}(z) = N_f\,|V|^2 \int d\epsilon\,\rho(\epsilon) f(\epsilon) P_f(z+\epsilon) \tag{3.4a}$$

$$\Sigma_f^{\mathrm{NCA}}(z) = |V|^2 \int d\epsilon\,\rho(\epsilon)\big(1-f(\epsilon)\big) P_0(z-\epsilon) \tag{3.4b}$$

Durch Funktionalableitung nach $P_0(z)$ erhält man aus II, IIIa, IVa usw. folgenden Anteil zu $\Sigma_0(z)$.

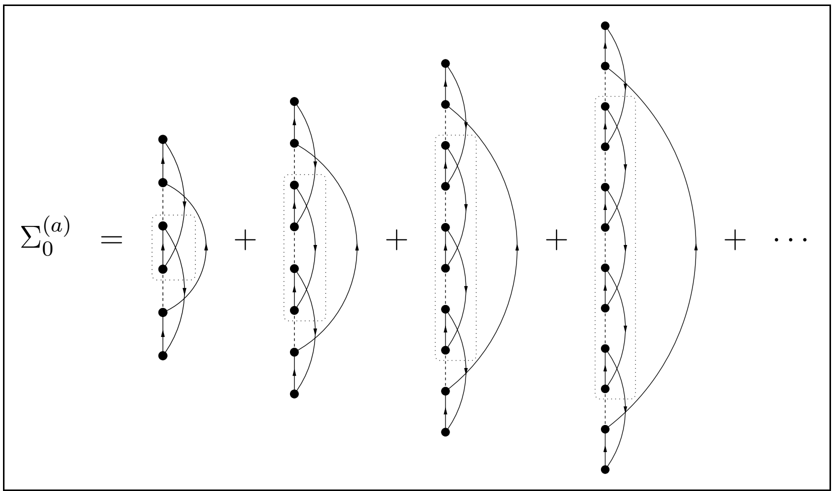


Abbildung 3.2 Selbstenergieanteil $\Sigma_0^{(a)}(z)$

Differenziert man die Typ-b-Diagramme nach $P_0(z)$, so ergibt sich

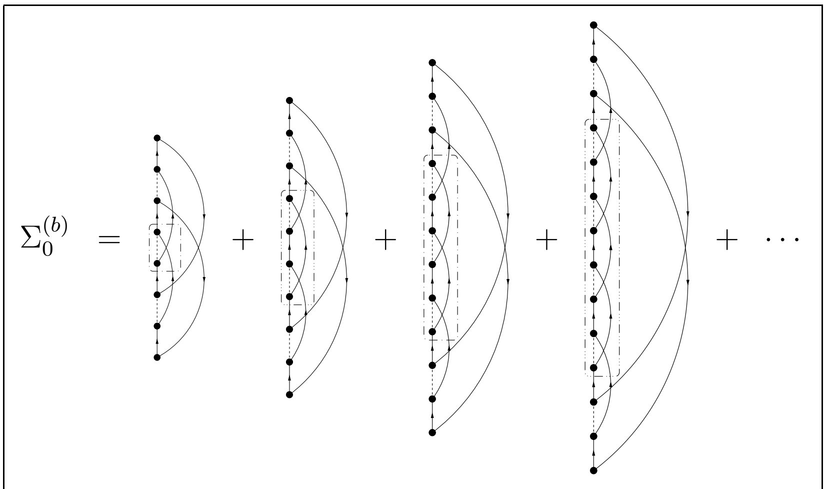


Abbildung 3.3 Selbstenergieanteil $\Sigma_0^{(b)}(z)$

In analoger Weise können die Selbstenergieprozesse für $\Sigma_f(z)$ bestimmt werden.

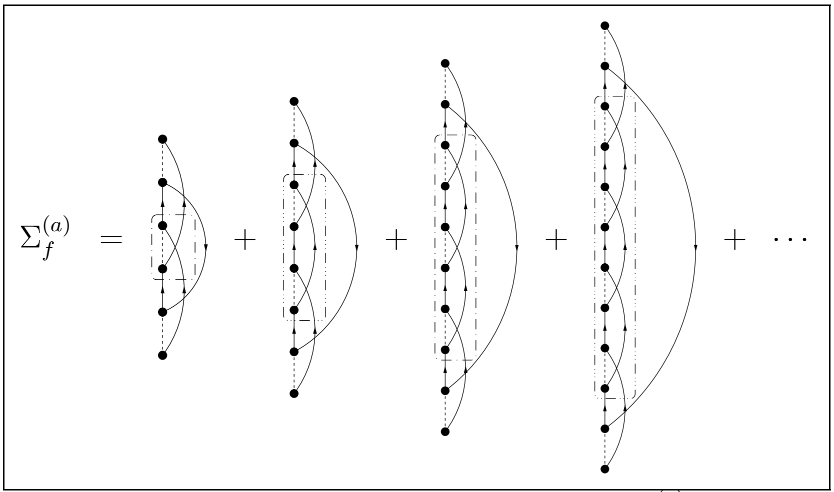


Abbildung 3.4 Selbstenergieanteil $\Sigma_f^{(a)}(z)$

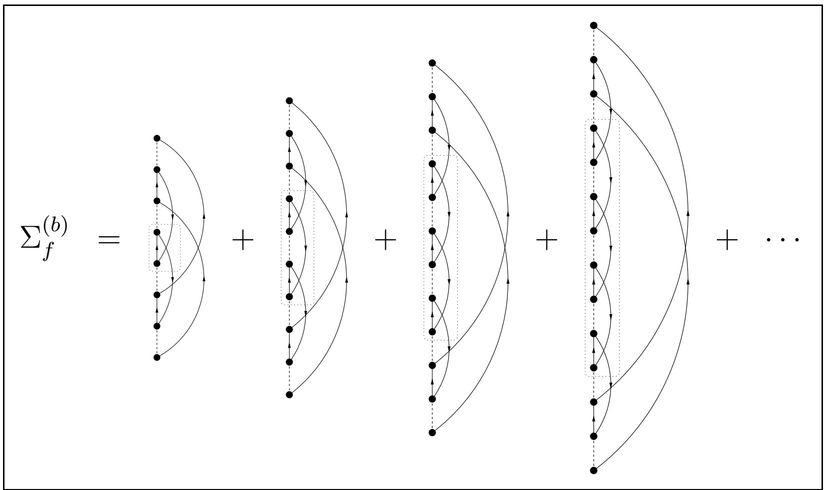


Abbildung 3.5 Selbstenergieanteil $\Sigma_f^{(b)}(z)$

$\Sigma_0^{(a)}(z)$ und $\Sigma_f^{(b)}(z)$ besitzen Anteile gleicher Struktur, die mit der Streumatrix $T_1(z, \epsilon_1, \epsilon_2)$ beschrieben und wie folgt diagrammatisch dargestellt werden.

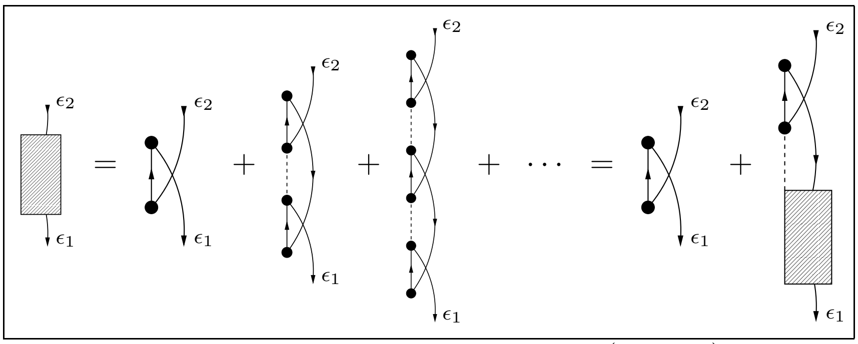


Abbildung 3.6 Streumatrix $T_1(z, \epsilon_1, \epsilon_2)$

$T_1(z, \epsilon_1, \epsilon_2)$ lässt sich über eine eindimensionale Integralgleichung bestimmen, hierbei geschieht die Auswertung der Diagramme über die Regeln aus Abschnitt 2.3.

$$\begin{aligned} T_1(z, \epsilon_1, \epsilon_2) = &- |V|^2 \, P_f(z + \epsilon_1 + \epsilon_2) \\ &- |V|^2 \int d\epsilon_3 \, \rho(\epsilon_3) f(\epsilon_3) \, T_1(z, \epsilon_1, \epsilon_3) P_0(z + \epsilon_3) P_f(z + \epsilon_2 + \epsilon_3) \end{aligned} \tag{3.5}$$

Die gesuchten Selbstenergien $\Sigma_0^{(a)}(z)$ und $\Sigma_f^{(b)}(z)$ erhält man direkt aus dieser Streumatrix.

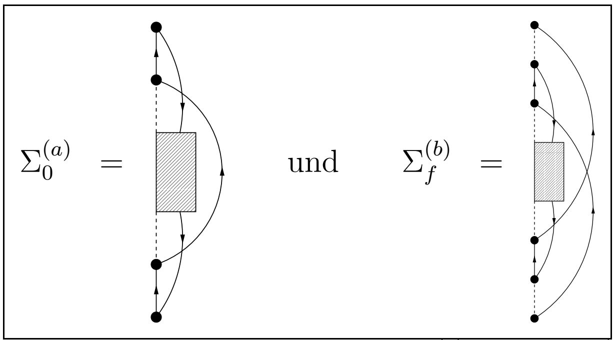


Abbildung 3.7 Selbstenergien $\Sigma_0^{(a)}(z)$ und $\Sigma_f^{(b)}(z)$

$\Sigma_0^{(a)}(z)$ besitzt weiterhin einen Spinfreiheitsgrad und ist daher $\mathcal{O}(N_f)$.

$$\begin{aligned} \Sigma_0^{(a)}(z) = N_f |V|^4 \int d\epsilon_1 d\epsilon_2 d\epsilon_3 \, \rho(\epsilon_1)\rho(\epsilon_2)\rho(\epsilon_3) f(\epsilon_1) f(\epsilon_2) \big(1 - f(\epsilon_3)\big) \\ \times P_f(z + \epsilon_1) P_0(z + \epsilon_1 - \epsilon_3) T_1(z - \epsilon_3, \epsilon_1, \epsilon_2) P_0(z + \epsilon_2 - \epsilon_3) P_f(z + \epsilon_2) \end{aligned} \tag{3.6}$$

Der zweite Selbstenergiebeitrag $\Sigma_f^{(b)}(z)$ beinhaltet keine Spinsummation und somit auch keinen Faktor N_f.

$$\begin{aligned} \Sigma_f^{(b)}(z) = -|V|^6 \int & d\epsilon_1 d\epsilon_2 d\epsilon_3 d\epsilon_4 \, \rho(\epsilon_1)\rho(\epsilon_2)\rho(\epsilon_3)\rho(\epsilon_4) \\ & \times f(\epsilon_1) f(\epsilon_2) \big(1 - f(\epsilon_3)\big)\big(1 - f(\epsilon_4)\big) \\ & \times P_0(z - \epsilon_3) P_f(z + \epsilon_1 - \epsilon_3) P_0(z + \epsilon_1 - \epsilon_3 - \epsilon_4) \\ & \times T_1(z - \epsilon_3 - \epsilon_4, \epsilon_1, \epsilon_2) \\ & \times P_0(z + \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4) P_f(z + \epsilon_2 - \epsilon_4) P_0(z - \epsilon_4) \end{aligned} \tag{3.7}$$

$\Sigma_0^{(b)}(z)$ und $\Sigma_f^{(a)}(z)$ bestehen ebenfalls aus Teilen gleicher Struktur, die allerdings nicht nur in einer, sondern in zwei Streumatrizen zusammengefasst werden, da die Diagramme eine unterschiedliche Spinabhängigkeit besitzen.

Z. B. enthält der erste Summand von $\Sigma_f^{(a)}(z)$ keine Spinsummation, also keinen Faktor N_f. Der zweite beinhaltet dagegen einen freien Spinindex, über den summiert werden muss, und ist daher $\mathcal{O}(N_f)$.

In der Streumatrix $T_2(z, \epsilon_1, \epsilon_2)$ besitzen die äußeren Bandelektronenlinien mit den Energien ϵ_1 und ϵ_2 unterschiedliche Spinindices, da ein Spin-Flip mit dem lokalen f-Niveau stattfindet.

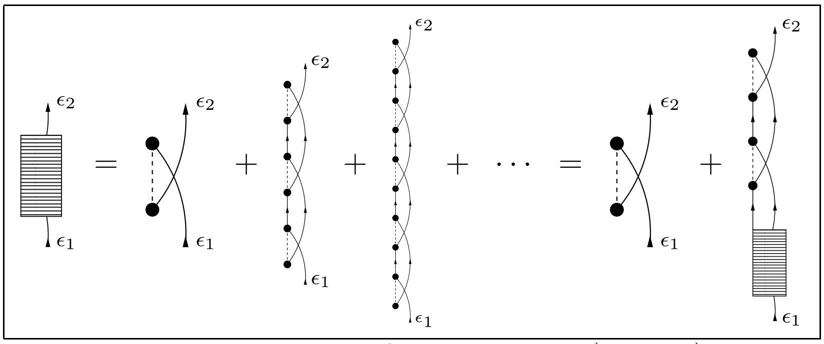


Abbildung 3.8 Streumatrix $T_2(z, \epsilon_1, \epsilon_2)$

Auch für $T_2(z, \epsilon_1, \epsilon_2)$ ergibt sich eine eindimensionale Integralgleichung.

$$\begin{aligned} T_2(z, \epsilon_1, \epsilon_2) = &- |V|^2 P_0(z - \epsilon_1 - \epsilon_2) \\ &+ |V|^4 \int d\epsilon_3 d\epsilon_4\, \rho(\epsilon_3)\rho(\epsilon_4)\big(1 - f(\epsilon_3)\big)\big(1 - f(\epsilon_4)\big)\, T_3(z, \epsilon_1, \epsilon_3) \\ &\times P_f(z - \epsilon_3) P_0(z - \epsilon_3 - \epsilon_4) P_f(z - \epsilon_4) P_0(z - \epsilon_2 - \epsilon_4) \end{aligned} \tag{3.8}$$

Für die Streumatrix $T_3(z, \epsilon_1, \epsilon_2)$ braucht keine weitere Integralgleichung gelöst zu werden, sie folgt durch einfache Integration aus $T_2(z, \epsilon_1, \epsilon_2)$. In $T_3(z, \epsilon_1, \epsilon_2)$ behalten das f- und Bandelektron ihre Spinorientierungen bei.

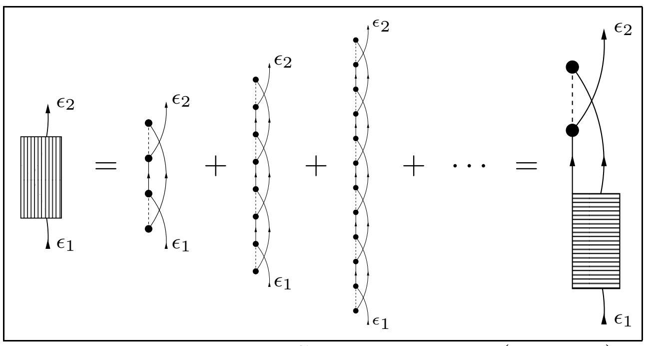


Abbildung 3.9 Streumatrix $T_3(z, \epsilon_1, \epsilon_2)$

$$T_3(z,\epsilon_1,\epsilon_2) = \\ -|V|^2 \int d\epsilon_3\, \rho(\epsilon_3)\big(1-f(\epsilon_3)\big)T_2(z,\epsilon_1,\epsilon_3)P_f(z-\epsilon_3)P_0(z-\epsilon_2-\epsilon_3) \quad (3.9)$$

Aus diesen beiden Streumatrizen lassen sich $\Sigma_f^{(a)}(z)$ und $\Sigma_0^{(b)}$ bestimmen.

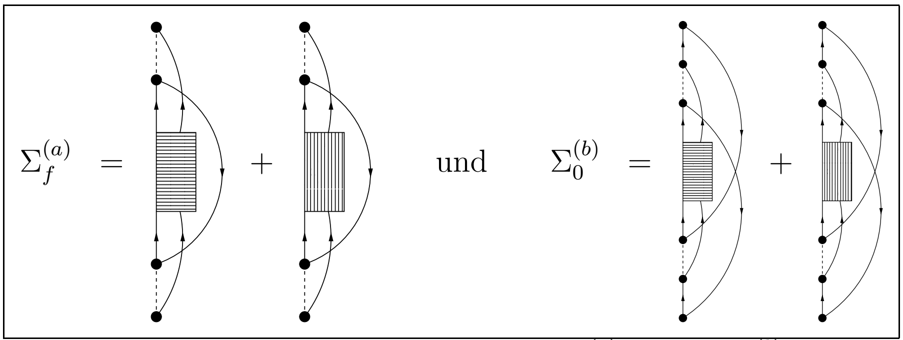


Abbildung 3.10 Selbstenergien $\Sigma_f^{(a)}(z)$ und $\Sigma_0^{(b)}(z)$

In $\Sigma_f^{(a)}(z)$ enthält nur der aus $T_3(z,\epsilon_1,\epsilon_2)$ gewonnene Anteil eine freie Spinsummation.

$$\begin{aligned}\Sigma_f^{(a)}(z) = |V|^4 \int & d\epsilon_1 d\epsilon_2 d\epsilon_3\, \rho(\epsilon_1)\rho(\epsilon_2)\rho(\epsilon_3) \\ & \times\big(1-f(\epsilon_1)\big)\big(1-f(\epsilon_2)\big)f(\epsilon_3) \\ & \times P_0(z-\epsilon_1)P_f(z-\epsilon_1+\epsilon_3) \\ & \times\big(T_2(z+\epsilon_3,\epsilon_1,\epsilon_2)+N_f T_3(z+\epsilon_3,\epsilon_1,\epsilon_2)\big) \\ & \times P_f(z-\epsilon_2+\epsilon_3)P_0(z-\epsilon_1)\end{aligned} \quad (3.10)$$

Dieses Verhalten ist gegensätzlich zu $\Sigma_0^{(b)}(z)$, hier besitzt $T_2(z,\epsilon_1,\epsilon_2)$ einen zusätzlichen Faktor N_f.

$$\begin{aligned}\Sigma_0^{(b)}(z) = N_f|V|^6 \int & d\epsilon_1 d\epsilon_2 d\epsilon_3 d\epsilon_4\, \rho(\epsilon_1)\rho(\epsilon_2)\rho(\epsilon_3)\rho(\epsilon_4) \\ & \times\big(1-f(\epsilon_1)\big)\big(1-f(\epsilon_2)\big)f(\epsilon_3)f(\epsilon_4) \\ & \times P_f(z+\epsilon_3)P_0(z-\epsilon_1+\epsilon_3)P_f(z-\epsilon_1+\epsilon_3+\epsilon_4) \\ & \times\big(N_f T_2(z+\epsilon_3+\epsilon_4,\epsilon_1,\epsilon_2)+T_3(z+\epsilon_3+\epsilon_4,\epsilon_1,\epsilon_2)\big) \\ & \times P_f(z-\epsilon_2+\epsilon_3+\epsilon_4)P_0(z-\epsilon_2+\epsilon_4)P_f(z+\epsilon_4)\end{aligned} \quad (3.11)$$

Die Selbstenergien $\Sigma_0(z)$ und $\Sigma_f(z)$ ergeben sich aus der Summe der Einzelbeiträge.

$$\Sigma_0(z) = \Sigma_0^{\mathrm{NCA}}(z) + \Sigma_0^{(a)}(z) + \Sigma_0^{(b)}(z) \tag{3.12a}$$

$$\Sigma_f(z) = \Sigma_f^{\mathrm{NCA}}(z) + \Sigma_f^{(a)}(z) + \Sigma_f^{(b)}(z) \tag{3.12b}$$

Das erzeugende Funktional (Abbildung 3.1) beinhaltet alle Diagramme bis $\mathcal{O}(|V|^8)$, die in diesem Kapitel vorgestellte Näherung ist daher bis zu dieser Ordnung exakt. In $\mathcal{O}(|V|^{10})$ gibt es je einen zusätzlichen Beitrag in den exakten $\Sigma_0(z)$ und $\Sigma_f(z)$, der nicht durch die hier definierten Streumatrizen beschrieben werden kann.

3.3 Erweiterung der f-Green-Funktion

Nach Einbeziehung von Crossing-Anteilen in die Selbstenergien $\Sigma_0(z)$ und $\Sigma_f(z)$ muss auch die NCA für die f-Green-Funktion konsistent erweitert werden. Zur Bestimmung der zu berücksichtigen Diagramme für $G_f(i\omega_n)$ betrachtet man die Darstellung

$$\Phi = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} F(i\omega_n) \mathcal{Z}_f G_f^{(2n)}(i\omega_n) \tag{3.13}$$

für das erzeugende Funktional des Anderson-Modells. An ihr ist zu erkennen, dass man aus Φ durch formale Funktionaldifferentiation nach dem Bandpropagator $F(i\omega_n)$ die f-Green-Funktion gewinnen kann. Dies entspricht in Abbildung 3.1 dem Aufschneiden einer Bandelektronenlinie. Es ergeben sich daraus zwei topologisch verschiedene Anteile $G_f^{(a)}(i\omega_n)$ und $G_f^{(b)}(i\omega_n)$, die durch die Streumatrizen $T_{1,2,3}(z, \epsilon_1, \epsilon_2)$ beschrieben werden können.

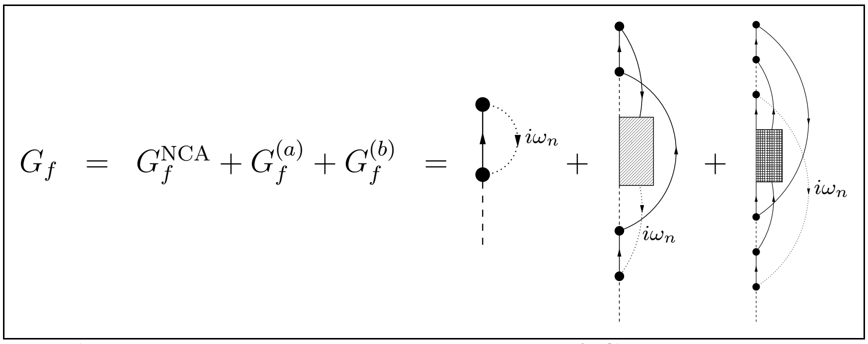


Abbildung 3.11 Erweiterung der f-Green-Funktion

Für den NCA-Beitrag erhält man das bekannte Ergebnis

$$G_f^{\mathrm{NCA}}(i\omega_n) = \frac{1}{\mathcal{Z}_f} \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} P_0(z) P_f(z + i\omega_n) \tag{3.14}$$

Die Auswertung des Diagramms für $G_f^{(a)}(i\omega_n)$ liefert

$$G_f^{(a)}(i\omega_n) = -\frac{|V|^2}{\mathcal{Z}_f} \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z} \int d\epsilon_2 d\epsilon_3\, \rho(\epsilon_2)\rho(\epsilon_3) f(\epsilon_2)\big(1 - f(\epsilon_3)\big)$$
$$\times P_0(z) P_f(z+i\omega_n) P_0(z+i\omega_n-\epsilon_3) T_1(z-\epsilon_3, i\omega_n, \epsilon_2) P_0(z+\epsilon_2-\epsilon_3) P_f(z+\epsilon_2) \tag{3.15}$$

Im letzten Term muss wiederum die unterschiedliche Spinabhängigkeit der Summanden berücksichtigt werden.

$$\begin{aligned} G_f^{(b)}(i\omega_n) = -\frac{|V|^4}{\mathcal{Z}_f} \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z} \int & d\epsilon_1 d\epsilon_2 d\epsilon_4\, \rho(\epsilon_1)\rho(\epsilon_2)\rho(\epsilon_4) \\ & \times \big(1 - f(\epsilon_1)\big)\big(1 - f(\epsilon_2)\big) f(\epsilon_4) \\ & \times P_0(z) P_f(z+i\omega_n) P_0(z+i\omega_n-\epsilon_1) P_f(z+i\omega_n-\epsilon_1+\epsilon_4) \\ & \times \big(N_f T_2(z+i\omega_n+\epsilon_4, \epsilon_1, \epsilon_2) + T_3(z+i\omega_n+\epsilon_4, \epsilon_1, \epsilon_2)\big) \\ & \times P_f(z+i\omega_n-\epsilon_2+\epsilon_4) P_0(z-\epsilon_2+\epsilon_4) P_f(z+\epsilon_4) \end{aligned} \tag{3.16}$$

Die numerische Behandlung der Gleichungen dieses Kapitels wird in [Bau03] durchgeführt. Hierbei werden zunächst die Integralgleichungen für $T_1(z,\epsilon_1,\epsilon_2)$ und $T_2(z,\epsilon_1,\epsilon_2)$ gelöst, aus letzterem kann auch $T_3(z,\epsilon_1,\epsilon_2)$ bestimmt werden. Anschließend lassen sich die Selbstenergiebeiträge $\Sigma_{0,f}^{\mathrm{NCA}}(z)$ und $\Sigma_{0,f}^{(a,b)}(z)$ berechnen, die wieder in die Gleichungen für $T_1(z,\epsilon_1,\epsilon_2)$ und $T_2(z,\epsilon_1,\epsilon_2)$ eingesetzt werden. Dieses Verfahren wird bis zur Selbstkonsistenz der Selbstenergien iteriert. Aus den so gewonnenen Größen lässt sich nun die f-Green-Funktion in der vorgestellten Näherung gewinnen.

Kapitel 4

Mathematischer Self-Avoiding Walk

In diesem Kapitel werden einige Ergebnisse zu mathematischen Self-Avoiding Walks vorgestellt. Dazu wird im ersten Abschnitt eine Einführung in die wichtigsten Grundlagen dieses seit vielen Jahren studierten Gebietes gegeben, eine ausführliche Darstellung findet man in [MadSla96]. Anschließend werden kurz die Eigenschaften des Random Walks dargestellt um zu einem späteren Zeitpunkt Unterschiede und Gemeinsamkeiten zum SAW aufzeigen zu können. Die Lace-Entwicklung, ein mächtiges Werkzeug zur Behandlung von SAWs, wird im nächsten Abschnitt erläutert und detailliert untersucht. Mit der Lace-Entwicklung lassen sich der Non-Crossing Walk, ein SAW ohne Überkreuzungen in der Selbstenergie, sowie ein Random Walk, bei dem nur direkte Rückkehrprozesse ausgeschlossen sind, d. h. ein Walk mit Gedächtnis 2, exakt lösen. Zum Abschluss werden die vorgestellten Näherungen zum SAW verglichen und bewertet, dabei wird besonderes Augenmerk auf den Unterschied zwischen genuin unendlichen und echt endlichen Raumdimensionen gelegt. Alle Ergebnisse werden hierbei für den mathematischen SAW gewonnen, der es ermöglicht die Zahl der Walks einer bestimmten Länge anzugeben. Die wesentlichen Eigenschaften sollten sich jedoch qualitativ direkt auf den physikalischen SAW übertragen lassen. Einiges dazu findet sich in den Abschnitten 5.2 und 7.3.

4.1 Einführung

In diesem Kapitel wird sich auf einen mathematischen SAW in einem d-dimensionalen hyperkubischen Gitter mit Gitterkonstante 1 beschränkt, bei dem ausschließlich eine Propagation zu einem nächsten Nachbarn erlaubt ist.

Im allgemeinen werden alle Einschritt-Propagatoren in der Menge Ω zusammengefasst.
Ein SAW der Länge n kann nun eindeutig durch ein n-Tupel $\omega = \big(\omega(1), \omega(2), \ldots, \omega(n)\big)$ mit $\omega(i) \in \mathbb{Z}^d$ beschrieben werden, wobei o. B. d. A. der Startpunkt mit dem Ursprung zusammenfällt $\omega(1) = 0$. Die einzelnen $\omega(i)$ werden in einem anschaulichen Bild auch als Stationen des Walks bezeichnet. Da nur ein Hopping auf einen nächsten Nachbarn erlaubt ist, gilt weiterhin $|\omega(i) - \omega(i+1)| = 1$. Die Vermeidung von Selbstüberschneidungen wird durch $\omega(i) \neq \omega(j)$ für $i \neq j$ sichergestellt und $|\omega| = n$ bezeichnet die Länge n eines SAWs ω.

In der Theorie des Self-Avoiding Walks stehen zwei fundamentale Fragestellungen im Mittelpunkt des Interesses.

- Man möchte zum einen wissen, wieviele SAWs c_n einer festen Länge n existieren.[1] In Analogie zu den klassischen statistischen Systemen charakterisiert man c_n im Limes $n \to \infty$ mit einem universellen kritischen Exponenten γ und einer Zusammenhangskonstanten μ.

$$c_n \sim \mu^n n^{\gamma-1} \tag{4.1}$$

- Weiterhin ist unter der Annahme, dass alle Walks der Länge n gleich wahrscheinlich sind, der mittlere quadratische Abstand $\rho(n)$ zwischen dem Ursprung als Startpunkt und dem Endpunkt $\omega(n)$ nach n Schritten von Bedeutung.

$$\rho(n) = \sqrt{\frac{1}{c_n} \sum_{|\omega|=n} |\omega(n)|^2} \tag{4.2}$$

Auf den zweiten Aspekt wird in dieser Arbeit nicht eingegangen, da zumeist SAWs mit einem festen Endpunkt r betrachtet werden. Die Anzahl solcher Walks mit festem Endpunkt $c_n(r)$ wird analog zu den c_n skaliert.

$$c_n(r) \sim \mu^n n^{\alpha-2} \tag{4.3}$$

Dabei besitzen c_n und $c_n(r)$ dieselbe Zusammenhangskonstante μ, einen Beweis für dieses auf den ersten Blick überraschende Ergebnis findet man in [MadSla96]. Aufgrund der Universalitätshypothese hängen die kritischen Exponenten γ und α nur von der Raumdimension d und nicht vom zugrunde liegenden Gitter ab. μ wird jedoch sowohl durch d als auch durch den speziellen Gittertyp bestimmt.

[1] Per Definition wird $c_0 = 1$ gesetzt.

Die erzeugende Funktion für c_n bezeichnet man in Analogie zum ($N \to 0$)-Grenzfall des N-Vektor-Modells als Suszeptibilität $\chi(z)$, dabei erstreckt sich die Summe über alle SAWs.

$$\chi(z) = \sum_{\omega} z^{|\omega|} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n = \sum_{r} G_r(z) \tag{4.4}$$

Auch für die Koeffizienten $c_n(r)$ eines SAWs mit festem Endpunkt r lässt sich eine erzeugende Funktion $G_r(z)$ definieren. Die Summation wird in diesem Fall nur über alle SAWs von 0 nach r ausgeführt.

$$G_r(z) = \sum_{\omega:0\to r} z^{|\omega|} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(r) z^n \tag{4.5}$$

4.2 Random Walk

Für einen Random Walk lassen sich die in dem vorherigen Abschnitt definierten Größen exakt berechnen. Dabei wird die Suszeptibilität mit $C(z)$ bzw. $C_r(z)$ und die Zahl der RWs mit r_n bzw. $r_n(r)$ bezeichnet.

$$C(z) = \sum_{n=0}^{\infty} r_n z^n = \sum_{r} C_r(z) \tag{4.6}$$

Zur Bestimmung von $C_r(z)$ spaltet man den ersten Schritt des RWs nach a ab. Aufgrund der Translationsinvarianz des Gitters kann der entstandene Ausdruck als eine Faltung interpretiert werden.

$$C_r(z) = \delta_{0r} + \sum_{a\in\Omega} z \sum_{\omega:a\to r} z^{|\omega|} \tag{4.7a}$$

$$= \delta_{0r} + z \sum_{a} D_a \, C_{r-a}(z) \tag{4.7b}$$

Der erste Schritt des RWs nach a wird in (4.7b) durch die Funktion D_a beschrieben.

$$D_a = \begin{cases} 1 & a \in \Omega \\ 0 & a \notin \Omega \end{cases} \tag{4.8}$$

Nach einer Fourier-Transformation

$$f_k = \sum_{r} f_r \, e^{ikr} \quad \text{und} \quad f_r = \int_{[-\pi,\pi]^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \, f_k \, e^{-ikr} \tag{4.9}$$

erhält man für den hier betrachteten Fall Nächster-Nachbar-Propagationen

$$D_k = \sum_{a\in\Omega} e^{ika} = 2\sum_{j=1}^{d} \cos k_j \tag{4.10}$$

Die Faltung in (4.7b) geht nach einer Fourier-Transformation in ein Produkt über und die Gleichung lässt sich nach dem gesuchten $C_k(z)$ auflösen.

$$C_k(z) = \frac{1}{1 - zD_k} = \frac{1}{1 - 2z\sum_{j=1}^{d} \cos k_j} \tag{4.11}$$

Daraus kann auch die Suszeptibilität im Ortsraum $C_r(z)$ gewonnen werden.

$$C_r(z) = \int\limits_{[-\pi,\pi]^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d}\, e^{-ikr}\, C_k(z) \tag{4.12}$$

Mithilfe von

$$J_n(z) = \frac{i^{-n}}{\pi} \int\limits_{-\pi}^{\pi} dt\, e^{i(nt+z\cos t)} \tag{4.13}$$

[AbrSte72] vereinfacht sich das d-dimensionale Integral in ein einfaches über ein Produkt von Bessel-Funktionen J_n.

$$C_r(z) = (-i)^{1+\sum_{j=1}^{d}|r_j|} \int\limits_{0}^{\infty} ds\, e^{is} \prod_{j=1}^{d} J_{|r_j|}(2sz) \tag{4.14}$$

Die erzeugende Funktion für die Zahl r_n aller RWs lässt sich direkt angeben. In einem d-dimensionalen hyperkubischen Gitter besitzt eine Site $2d$ nächste Nachbarn, daher gilt $r_n = (2d)^n$. Dasselbe Ergebnis ergibt sich formal, indem man in (4.11) $k = 0$ setzt.

$$C(z) = \sum_{r} C_r(z) = \frac{1}{1 - 2dz} = \sum_{n=0}^{\infty} (2d)^n\, z^n \tag{4.15}$$

Man erhält somit eine Zusammenhangskonstante $\mu^{\mathrm{RW}} = 2d$ und einen dimensionsunabhängigen kritischen Exponenten $\gamma^{\mathrm{RW}} = 1$.

Am Ende dieses Abschnittes wird noch auf den Random Loop (RL) eingegangen. Ein RL ergibt sich offensichtlich aus einem RW zu einem nächsten

Nachbarn des Startpunktes (hier: Ursprung) und einem weiteren Schritt zurück zum Ausgangspunkt. $C^{\mathrm{RL}}(z)$ lässt sich nach dieser Überlegung wie folgt schreiben.

$$C^{\mathrm{RL}}(z) = 1 + 2dz\, C_{\vec{e}_1}(z) = -i \int_0^\infty ds\, e^{is} J_0^d(2sz) \tag{4.16}$$

Zur Bestimmung der Zahl $r_n^{\mathrm{RL}\,(d)}$ an RLs einer Länge n in d Dimensionen entwickelt man die Bessel-Funktion in eine Potenzreihe [AbrSte72].

$$J_n(2x) = x^n \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-x^2)^l}{l!\,(n+l)!} \tag{4.17}$$

Die Integration über s kann in (4.16) durchgeführt werden und das anschaulich klare Ergebnis, dass in einem hyperkubischen Gitter nur Loops mit einer geraden Anzahl an Schritten existieren, folgt unmittelbar. Es lässt sich weiterhin eine Rekursionsvorschrift für $r_{2n}^{\mathrm{RL}\,(d)}$ angeben.

$$\begin{aligned} r_{2n}^{\mathrm{RL}\,(2)} &= \frac{\big((2n)!\big)^2}{(n!)^4} = \binom{2n}{n}^2 \\ r_{2n}^{\mathrm{RL}\,(d+1)} &= (2n)! \sum_{l=0}^{n} \frac{r_{2l}^{\mathrm{RL}\,(d)}}{\big((n-l)!\big)^2 (2l)!} = \sum_{l=0}^{n} \binom{2n}{2l} \binom{2(n-l)}{n-l} r_{2l}^{\mathrm{RL}\,(d)} \end{aligned} \tag{4.18}$$

Aus dieser Rekursionsgleichung lassen sich die Zusammenhangskonstante sowie der kritische Exponent α^{RL} für den RL bestimmen und das allgemeine Ergebnis $\mu^{\mathrm{Walk}} = \mu^{\mathrm{Loop}}$ kann im Spezialfall des Random Walks bzw. Loops direkt bewiesen werden. Dazu wird der Binomialkoeffizient für große n mit der Stirling-Formel approximiert.

$$\binom{2n}{n} = \frac{2^{2n}}{\sqrt{\pi n}}\big(1 + \mathcal{O}(n^{-1})\big) \tag{4.19}$$

Mit dieser Näherung erhält man für den zweidimensionalen Fall unmittelbar $\mu = 4$ und $\alpha = 1$.

$$r_{2n}^{\mathrm{RL}\,(2)} \sim (2n)^{-1} 4^{2n} \tag{4.20}$$

Für höhere Dimensionen kann das erwartete Verhalten $\mu^{\mathrm{RL}} = 2d$ und $\alpha^{\mathrm{RL}} - 2 = -\frac{d}{2}$ durch eine vollständige Induktion über d gezeigt werden. Im Induktionsschritt entwickelt man den zweiten Binomialkoeffizienten wiederum nach der Stirling-Formel und die entstandene Summe lässt sich, da

$r^{\text{RL}}_{2l+1} = 0$ für $l \in \mathbb{N}$, nach dem Binomischen Satz als eine Potenz von $2(d+1)$ schreiben.

$$\begin{aligned} r_{2n}^{\text{RL}\,(d+1)} &\sim \sum_{l=0}^{n} \binom{2n}{2l} \frac{2^{2n-2l}}{\sqrt{2(n-l)}} \frac{(2d)^{(2l)}}{(2n)^{\frac{d}{2}}} \\ &= (2n)^{-\frac{d+1}{2}} \big(2(d+1)\big)^{2n} \end{aligned} \tag{4.21}$$

Die Zusammenhangskonstante und der kritische Exponent können für einen RL somit aus der Darstellung (4.16) explizit bestimmt werden.

$$\mu^{\text{RL}} = 2d \quad \text{und} \quad \alpha^{\text{RL}} - 2 = -\frac{d}{2} \tag{4.22}$$

4.3 Konvergenzradius des Self-Avoiding Walks

Im folgenden wird gezeigt, dass die Potenzreihe

$$\chi(z) = \sum_{\omega} z^{|\omega|} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n = \sum_{r} G_r(z) \tag{4.23}$$

einen endlichen Konvergenzradius

$$0 \leq z_c = \Big(\lim_{n\to\infty} \sqrt[n]{c_n}\Big)^{-1} = \frac{1}{\mu} < \infty \tag{4.24}$$

besitzt.

Beweis:
Der durch das Zusammenfügen eines SAWs der Länge m mit einem SAW der Länge n entstehende Walk ist im allgemeinen nicht überschneidungsfrei, daher gilt diese Ungleichung für die Koeffizienten c_n.

$$c_{m+n} \leq c_m c_n \tag{4.25}$$

Die Folge $\{\log c_n\} = \{a_n\}$ ist somit subadditiv.

$$\log c_{m+n} \leq \log c_m + \log c_n \tag{4.26}$$

Für eine solche subadditive Folge $\{a_n\}$ existiert $\lim\limits_{n\to\infty} \frac{a_n}{n}$ in $[-\infty, \infty[$ und ist gleich

$$\lim_{n\to\infty} \frac{a_n}{n} = \inf_{n\geq 1} \frac{a_n}{n} \tag{4.27}$$

Zum Beweis von (4.27) bezeichne A_k das Maximum der Folgeglieder $a_1, \dots, a_n$. j sei die kleinste ganze Zahl, die noch echt kleiner als $\frac{n}{k}$ ist. Dann gilt $n = jk + r$ mit $1 \leq r \leq k$. Aufgrund der Subadditivität der $\{a_n\}$ und der Definition von A_k kann folgende Ungleichheitskette aufgestellt werden.

$$a_n \leq a_{jk} + a_r \leq j a_k + A_k \leq \frac{n}{k} a_k + A_k \tag{4.28}$$

Nach Division durch n und Bildung des $\limsup_{n\to\infty}$ ergibt sich

$$\limsup_{n\to\infty} \frac{a_n}{n} \leq \frac{a_k}{k} \tag{4.29}$$

Die Existenz des Grenzwertes der linken Seite von (4.27) lässt sich durch Anwenden von $\liminf_{k\to\infty}$ auf die obige Gleichung beweisen.

$$\limsup_{n\to\infty} \frac{a_n}{n} \leq \liminf_{k\to\infty} \frac{a_k}{k} \quad \Rightarrow \quad \limsup_{n\to\infty} \frac{a_n}{n} = \liminf_{n\to\infty} \frac{a_n}{n} = \lim_{n\to\infty} \frac{a_n}{n} \tag{4.30}$$

Bildet man statt des lim inf das Infimum der Gleichung, so erhält man (4.27). Diese Gleichung zeigt insbesondere, dass der Grenzwert echt kleiner als unendlich ist. Der Grenzwert $-\infty$ ist hingegen nicht ausgeschlossen, entfällt hier jedoch, da gilt $c_n \geq 1$.
Setzt man in (4.27) das Skalierungsverhalten der c_n (4.1) ein, so ergibt sich der endliche Konvergenzradius z_c (4.24) von χ. □

Es kann weiter gezeigt werden, dass die Propagatoren G_r, die einen SAW mit festem Endpunkt r beschreiben, denselben Konvergenzradius $z_c = \mu^{-1}$ besitzen [MadSla96].

4.4 Konvergenzradius im Limes $d \to \infty$

Bei der Bestimmung des Konvergenzradius von (4.4) in hohen Raumdimensionen muss berücksichtigt werden, dass das Argument z der Potenzreihe mit $\sqrt{d}^{-1}$ skaliert wird. Hierzu betrachte man z. B. das Tight-Binding-Band in d Raumdimensionen, dessen Eigenschaften in Anhang A erläutert werden. Dieses Skalierungsverhalten wird durch die Substitution

$$z \to \frac{z}{\sqrt{d}} \tag{4.31}$$

in Gleichung (4.4) übertragen. Dadurch hängt das Argument z nicht mehr von der Dimension ab und man erhält für die Suszeptibilität

$$\chi(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_n}{\sqrt{d}^n} z^n \tag{4.32}$$

Der Konvergenzradius dieser Potenzreihe lässt sich analog zu dem vorherigen Abschnitt bestimmen.

$$z_c = \left(\lim_{n\to\infty} \sqrt[n]{\frac{c_n(r)}{\sqrt{d}^n}} \right)^{-1} = \frac{\sqrt{d}}{\mu} \tag{4.33}$$

Eine obere Schranke für die Zusammenhangskonstante folgt aus der Tatsache, dass weniger echte SAWs als Walks mit Gedächtnis 2 (Abschnitt 4.7) existieren. Da zudem ein Walk, der sich nur in einer Richtung der d Koordinatenachsen bewegt, offensichtlich überschneidungsfrei ist, lässt sich folgende Abschätzung für μ angeben.

$$d < \mu < 2d-1 \quad \Rightarrow \quad \frac{\sqrt{d}}{d} > z_c = \frac{\sqrt{d}}{\mu} > \frac{\sqrt{d}}{2d-1} \tag{4.34}$$

Mit dieser Ungleichung lässt sich direkt zeigen, dass der Propagator eines mathematischen SAWs in unendlichen Raumdimensionen einen verschwindenden Konvergenzradius besitzt.

$$\lim_{d\to\infty} z_c = \lim_{d\to\infty} \frac{\sqrt{d}}{\mu} = 0 \tag{4.35}$$

4.5 Lace-Entwicklung

In diesem Abschnitt wird mit der Lace-Entwicklung eine Methode zur Behandlung von SAWs vorgestellt, mit der das Problem mit einer Diagrammtechnik exakt gelöst wird. Leider lässt sich das diagrammatische Ergebnis aufgrund zusätzlicher Korrelationen zwischen den einzelnen SAWs nicht analytisch oder zumindest numerisch auswerten. Daher ist man weiterhin auf Näherungen bei der Berechnung von SAWs angewiesen.

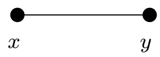
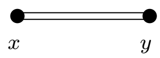
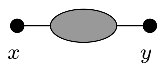
Ausgangspunkt für die Lace-Entwicklung ist Gleichung (4.7a), die einen RW mit festem Endpunkt in den ersten Schritt zum Gitterplatz a und einem RW von a nach r aufteilt, hierbei bezeichnet $[x \to y]$ im weiteren einen Weg von x nach y. (4.7a) wird für den SAW durch einen Selbstenergieanteil $\Sigma(z)$ erweitert, der den Unterschied zwischen einem Random und einem Self-Avoiding Walk beinhaltet.

$$G_{xy}(z) = \delta_{xy} + \sum_{a\in\Omega} zG_{ay}(z) + \sum_{a} \Sigma_{xa}(z)G_{ay}(z) \tag{4.36}$$

Für den RW gilt offensichtlich $\Sigma(z) = 0$. Obiger Ausdruck lässt sich mit einer Fourier-Transformation nach dem gesuchten $G_k(z)$ auflösen.

$$G_k(z) = \frac{1}{1 - zD_k - \Sigma_k(z)} \tag{4.37}$$

An dieser Stelle wird eine diagrammatische Beschreibung eingeführt.

Beschreibung	**analytischer Ausdruck**	**Symbol**
Gitterplatz	δ_{xy}	
Einschritt-Propagator	$g_{xy}(z) = \begin{cases} z & y-x \in \Omega \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$	
Propagator des SAWs	$G_{xy}(z)$	
Propagator des SAWs mit mind. 1 Schritt	$\bar{G}_{xy}(z) = G_{xy}(z) - \delta_{xy}$	
Selbstenergie	$\Sigma_{xy}(z)$	

Mit diesen Symbolen schreibt sich die Dyson-Gleichung (4.36) wie folgt.

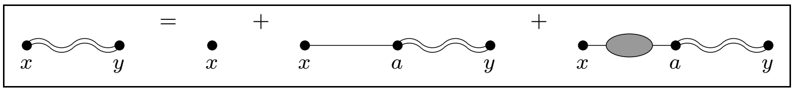


Abbildung 4.1 Diagrammatische Darstellung der Dyson-Gleichung

Zur Herleitung der Selbstenergie Σ wird der erste Schritt des SAWs von x nach a abgespalten. Im Gegensatz zum RW ist der restliche SAW $[a \to y]$ hier mit dem ersten Teil korreliert, der Gitterplatz x darf in $[a \to y]$ zur Vermeidung aller Selbstüberschneidungen nicht mehr besucht werden. Solche Korrelationen zwischen Teilwegen, die untereinander keine Gitterpunkte gemeinsam haben dürfen, werden durch gestrichelte Linien veranschaulicht.

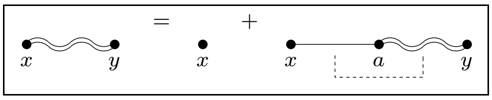


Abbildung 4.2 Herleitung der Lace-Entwicklung I

Für eine Bestimmung von Σ müssen diese zusätzlichen Einschränkungen an die Propagation zum vorgegebenen Endpunkt y wieder aufgelöst werden. Dazu zerlegt man den zweiten Summanden in einen Anteil ohne zusätzliche Einschränkungen und in einen, in dem die Site x auf $[a \to y]$ besucht wird. Diese Gleichheit zweier Gitterplätze wird durch einen Kreisbogen illustriert.

Allerdings dürfen die beiden Teilwege $[a \to x]$ und $[x \to y]$ außer x keine weiteren Sites gemeinsam haben, da sie aus einem einzigen SAW entstanden sind. Wegen des ersten Schrittes von x nach a gilt hierbei $x \neq a$, weshalb auch wieder mindestens ein Schritt benötigt wird um von a zurück nach x zu gelangen.

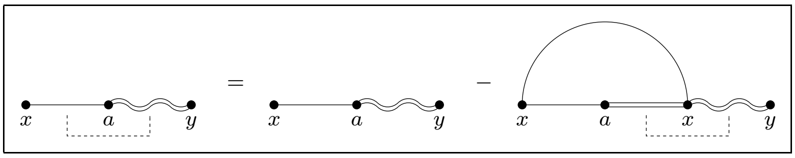


Abbildung 4.3 Herleitung der Lace-Entwicklung II

Anschließend wird in analoger Weise die Korrelationslinie zwischen $[a \to x]$ und $[x \to y]$ aufgelöst. b bezeichnet weiterhin den ersten Gitterplatz in $[x \to y]$, der bereits in $[a \to x]$ besucht wurde, dieses b kann nicht mit x zusammenfallen. Die Wege $[a \to b]$, $[b \to x]$ und $[x \to b]$ dürfen hierbei keine gemeinsamen Gitterplätze besuchen, weiterhin darf keine Site in $[b \to y]$ schon in $[x \to b]$ aufgetreten sein. Wegen der speziellen Wahl von b ist $[b \to y]$ jedoch mit keinem anderen Teilweg mehr korreliert.

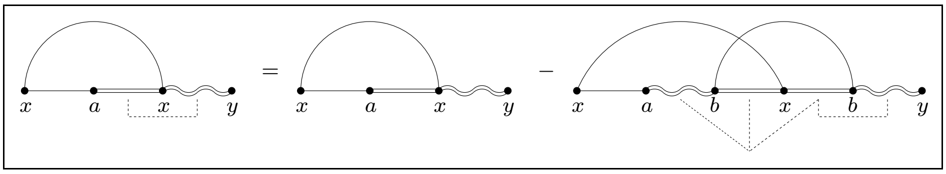


Abbildung 4.4 Herleitung der Lace-Entwicklung III

Eine Vereinfachung des rechten Diagramms ergibt sich daraus, dass die Ungleichheit zwischen x und a bereits durch den Einschritt-Propagator von x nach a gegeben ist und dieser zusammen mit G_{ab} somit durch $\bar{G}_{xb}$ ersetzt werden kann.

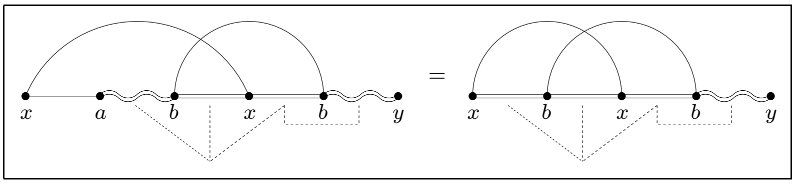


Abbildung 4.5 Herleitung der Lace-Entwicklung IV

Die Restriktionen zwischen $[x \to b]$ und $[b \to y]$ lassen sich nach demselben Schema auflösen. c sei nun die erste Site in $[b \to y]$, die schon in $[x \to b]$ auftritt. Dabei ist ein Zusammenfallen von c mit x durchaus möglich, eines mit b jedoch nicht, dies erklärt die Wahl von G_{xc} bzw. $\bar{G}_{cb} = \bar{G}_{bc}$.

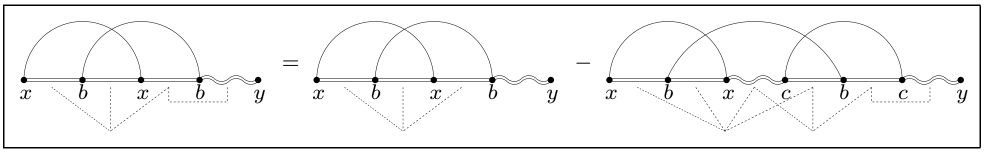


Abbildung 4.6 Herleitung der Lace-Entwicklung V

Dieses Verfahren lässt sich weiter fortsetzen und es ergibt sich durch Vergleich mit der Dyson-Gleichung folgende diagrammatische Darstellung der exakten Selbstenergie des SAWs.

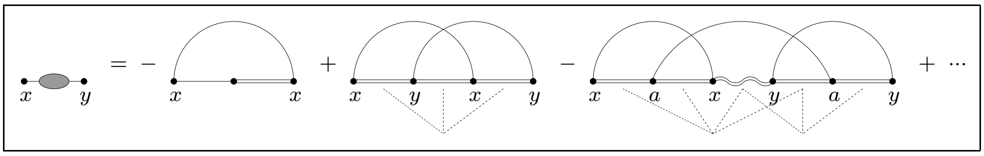


Abbildung 4.7 Exakte Selbstenergie des SAWs

Leider lässt sich obiger exakter Ausdruck wegen der zusätzlichen Korrelationen zwischen den SAWs, die nicht nur jeder für sich selbstüberschneidungsfrei sein müssen, sondern auch mit anderen SAWs keine Gitterplätze gemeinsam haben dürfen, weder analytisch noch numerisch exakt auswerten.

4.6 Non-Crossing Walk

Die einfachste Näherung für die exakte Selbstenergie, die analytisch und numerisch behandelbar ist, berücksichtigt lediglich den ersten Summanden in Abbildung 4.7.

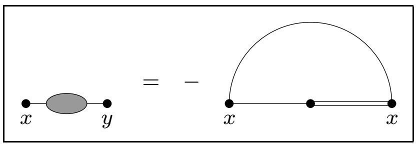


Abbildung 4.8 Selbstenergie $\Sigma_k^{\mathrm{NCW}}(z)$ des NCWs

Dieses Diagramm beschreibt einen Self-Avoiding Loop (SAL) mit mindestens einem Schritt und ist diagonal im Ortsraum. Da die Diagonalelemente von Σ_{xy} nach einer Fourier-Transformation nicht von k abhängig sind, erhält man

$$\Sigma_k^{\mathrm{NCW}}(z) = -G^{\mathrm{NCL}}(z) + 1 \tag{4.38}$$

In einem diagrammatischen Bild beinhaltet dieser Selbstenergiebeitrag alle Anteile ohne sich überkreuzende Kreisbögen, die die Gleichheit zweier Gitterplätze beschreiben. Daher wird ein Walk mit dieser Selbstenergie als

Non-Crossing Walk bezeichnet.

Die erzeugende Funktion für den Non-Crossing Loop (NCL) kann analog zu der des RLs bestimmt werden. Dazu wird ein NCL als NCW zu einem nächsten Nachbarn plus einem zusätzlichen Schritt zurück zum Startpunkt betrachtet. Das d-dimensionale Integral lässt sich wiederum in ein eindimensionales über Bessel-Funktionen vereinfachen.

$$G^{\mathrm{NCL}}(z) = -i\int\limits_0^\infty ds\, e^{is} J_0^d\big(\frac{2sz}{G^{\mathrm{NCL}}(z)}\big) \tag{4.39a}$$

$$= C^{\mathrm{RL}}\big(\frac{z}{G^{\mathrm{NCL}}(z)}\big) \tag{4.39b}$$

Im Gegensatz zum RL erhält man jedoch keinen direkten Ausdruck für $G^{\mathrm{NCL}}(z)$, sondern eine Gleichung, die noch selbstkonsistent gelöst werden muss.

Mit einer Reihenentwicklung ist es jedoch auch in diesem Fall möglich Rekursionsgleichungen zur Bestimmung der Zahl der NCLs aufzustellen. Zu diesem Zweck wählt man für $G(z)$ und seine inverse Potenzen folgende Ansätze.

$$G(z) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} c_{2n} z^{2n} \tag{4.40a}$$

$$\frac{1}{G(z)} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} a_{2n} z^{2n} \tag{4.40b}$$

$$\Big(\frac{1}{G(z)}\Big)^{2m} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} b_{2n}^{(m)} z^{2n} \tag{4.40c}$$

Nach einem Koeffizientenvergleich ergibt sich ein nicht-lineares Gleichungssystem für a_{2n}, $b_{2n}^{(m)}$ und c_{2n}.

$$a_{2n} = -c_{2n} - \sum_{l=1}^{n-1} c_{2l} a_{2(n-l)} \tag{4.41a}$$

$$b_{2n}^{(1)} = 2a_{2n} + \sum_{l=1}^{n-1} a_{2l} a_{2(n-l)} \tag{4.41b}$$

$$b_{2n}^{(m)} = b_{2n}^{(1)} + b_{2n}^{(m-1)} + \sum_{l=1}^{n-1} b_{2l}^{(1)} b_{2(n-l)}^{(m-1)} \tag{4.41c}$$

$$c_{2(n+1)} = r_{2(n+1)} + \sum_{l=0}^{n-1} r_{2(n-l)} b_{2(l+1)}^{(n-l)} \tag{4.41d}$$

Diese Gleichungen lassen sich iterativ mit dem Startwert $c_2 = r_2 = 2d$ lösen. Sind alle a_{2i} und c_{2i} für $i = 1, \ldots, n-1$ sowie c_{2n} bekannt, so kann aus der ersten Gleichung a_{2n} berechnet werden. Mit a_{2n} ergibt sich aus (4.41b) $b_{2n}^{(1)}$ und damit aus (4.41c) alle $b_{2n}^{(m)}$. Mit den so gewonnenen Koeffizienten kann zuletzt aus (4.41d) $c_{2(n+1)}$ bestimmt werden und die Iteration kann erneut beginnen.

In Kapitel 4.8 werden die Koeffizienten c_{2n} explizit angegeben und mit dem exakten Ergebnis sowie der im nächsten Abschnitt beschriebenen Memory-2-Näherung verglichen.

4.7 Memory-2 Walk

Als Walk mit Gedächtnis m oder Memory-m Walk (MmW) bezeichnet man einen RW, der bei jedem weiteren Schritt nicht zu den m zuletzt besuchten Gitterplätzen zurückkehren darf. Ein SAW kann nach dieser Definition als Walk mit $m \to \infty$ angesehen werden, während der RW ein verschwindendes Gedächtnis $m = 0$ besitzt. In diesem Abschnitt wird mithilfe der Lace-Entwicklung die Selbstenergie für einen M2W hergeleitet.

Die Selbstenergie eines M2Ws beinhaltet alle Anteile mit Indexgleichheiten zwischen übernächsten Stationen des Walks. Dies sind nur die in der folgenden Abbildung dargestellten Prozesse. Weitere existieren nicht, da in allen anderen Diagrammen mindestens einmal zwei oder mehr Schritte zwischen identischen Gitterplätzen auftreten müssen.

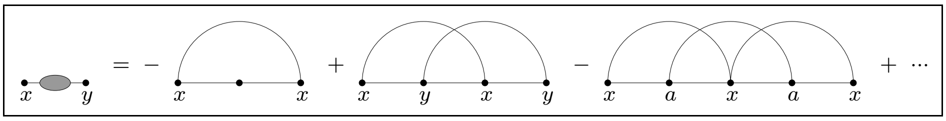


Abbildung 4.9 Selbstenergie des Memory-2 Walks

Im Ortsraum besitzt die Selbstenergie des M2Ws folgende analytische Form.

$$\Sigma_{xy}^{\mathrm{M2W}}(z) = \frac{z^2}{z^2-1}\big(2d - zD_{y-x}\big) \tag{4.42}$$

Dabei beschreibt der erste Summand die ein- oder mehrfache Propagation zu einem der $2d$ nächsten Nachbarn und wieder zurück, dieser Anteil ist wie $\Sigma^{\mathrm{NCW}}(z)$ rein lokal. Im zweiten Term endet die Bewegung nach einer ungeradzahligen Anzahl von Schritten auf einer Nächsten-Nachbar-Site, dieser Anteil ist aufgrund der Nicht-Lokalität der Funktion D_{y-x} k-abhängig. Dies kann auch an der Fourier-Darstellung $\Sigma_k^{\mathrm{M2W}}(z)$ abgelesen werden.

$$\Sigma_k^{\mathrm{M2W}}(z) = \frac{z^2}{z^2-1}\big(2d - zD_k\big) \tag{4.43}$$

Nach Einsetzen in die Dyson-Gleichung (4.36) erhält man für den Propagator

$$G_k^{\mathrm{M2W}}(z) = \frac{1-z^2}{1+(2d-1)z^2 - 2z\sum_{j=1}^d \cos k_j} \tag{4.44}$$

Die Ortsdarstellung für einen Loop mit Gedächtnis 2 (M2L) lässt sich wiederum als ein Integral über Bessel-Funktionen darstellen, auf diese Weise wird auch der Zusammenhang mit einem RL deutlich.

$$G^{\mathrm{M2L}}(z) = z^2 - i(1-z^2)\int\limits_0^\infty ds\, e^{is} J_0^d\Big(\frac{2sz}{1+(2d-1)z^2}\Big) \tag{4.45a}$$

$$= z^2 + (1-z^2)C^{\mathrm{RL}}\Big(\frac{z}{1+(2d-1)z^2}\Big) \tag{4.45b}$$

Nach einer Reihenentwicklung kann ein expliziter Ausdruck für die Zahl aller M2Ls mit fester Länge $2n$ angegeben werden.

$$c_{2n}^{\mathrm{M2L}} = \sum_{l=0}^{n-1} (-1)^l\,(2d-1)^l \binom{2n-l-1}{l} \Big(1 + \frac{l}{(2d-1)(2n-l-1)}\Big)\, r_{2(n-l)}^{\mathrm{RL}} \tag{4.46}$$

Zur Bestimmung der Zusammenhangskonstanten mache man sich klar, dass ein M2W ohne festen Endpunkt in einem neuen Schritt zu jedem seiner $2d$ nächsten Nachbarn außer zu dem zuletzt besuchten propagieren kann. Da

Walks mit freien oder festen Endpunkt dasselbe μ besitzen, gilt für alle Walks mit Gedächtnis 2

$$\mu^{\mathrm{M2W}} = 2d - 1 \tag{4.47}$$

4.8 Vergleich und Bewertung

Zum Abschluss dieses Kapitels werden die beiden vorgestellten Näherungen mit dem exakten SAL verglichen und ihre Vor- bzw. Nachteile aufgezeigt.
Exakte Resultate für Self-Avoiding Walks gibt es im Gegensatz zu Random Walks aufgrund der Komplexität des Problems leider nur sehr wenige. Die meisten Ergebnisse wurden numerisch mit Monte-Carlo-Verfahren ermittelt. Ein ausführliche Einführung in die konkrete Umsetzung dieser Methode für SALs findet man in [Sok95]. Die exakte Zahl der SALs, die für kleine Kettenlängen mittels exakter Aufzählung gewonnen wird, wurde [MadSla96] entnommen, dort findet man auch weitergehende Referenzen auf die Originalarbeiten.

4.8.1 Endliche Raumdimensionen

Die folgende Tabelle enthält die Anzahl der Loops der Länge $2n$ auf dem zweidimensionalen kubischen Gitter.

$\boldsymbol{2n}$	$\boldsymbol{r_{2n}^{\mathrm{RL}}}$	$\boldsymbol{c_{2n}^{\mathrm{SAL}}}$	$\boldsymbol{c_{2n}^{\mathrm{NCL}}}$	$\boldsymbol{c_{2n}^{\mathrm{M2L}}}$
2	4	4	4	4
4	36	8	4	8
6	400	24	-16	64
8	4900	112	-28	432
10	63504	560	176	3176
12	853776	2976	336	24000
14	11778624	16464	-2496	186408
16	165636900	94016	-4956	1474704
18	2363904400	549648	40112	11840872
20	34134779536	3273040	81488	96186504

Man erkennt, dass der Non-Crossing Loop keine gute Approximation des exakten SALs in $d = 2$ darstellt, da sich zum Teil eine unphysikalische negative Zahl an Wegen durch das Gitter ergibt. Dies macht die Überkorrektur dieser Approximation zum RL deutlich.
Die Zahl der Memory-2 Loops liegt erwarteterweise zwischen dem Random und Self-Avoiding Loop.

Die Ergebnisse für $d = 3$ sind in der nächsten Tabelle aufgeführt.

$2n$	r_{2n}^{RL}	c_{2n}^{SAL}	c_{2n}^{NCL}	c_{2n}^{M2L}
2	6	6	6	6
4	90	24	18	24
6	1860	264	132	480
8	44730	3312	810	7920
10	1172556	48240	5724	145176
12	32496156	762096	42156	2808000
14	936369720	12673920	323352	56334504
16	27770358330	218904768	2550042	1162583520
18	842090474940	3891176352	20559660	24518777160
20	25989269017140	70742410800	168680196	526122369000

Auch hier zeigt sich, dass der NCL die exakte Zahl der SALs unterschätzt. Eine negative Anzahl an Loops tritt jedoch für $d \geq 3$ nicht mehr auf.

Die folgende Abbildung stellt das Verhältnis $\frac{c_{2n}}{r_{2n}^{\mathrm{RL}}}$ für den NCL und den M2L dar.

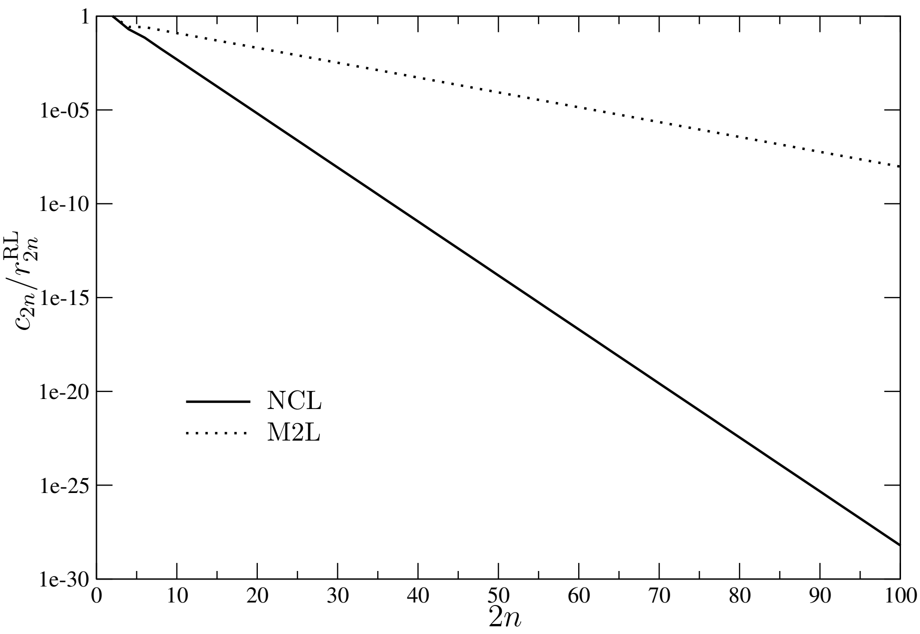


Abbildung 4.10 $\frac{c_{2n}}{r_{2n}^{\mathrm{RL}}}$ für den NCL und M2L in $d = 3$

Im Gegensatz zum NCL in unendlichen Raumdimensionen, bei dem dieses Verhältnis im Limes $n \to \infty$ gegen die Konstante e^{-1} konvergiert [Leu98], verschwindet der Quotient in drei Dimensionen. Die restringierten Loops mit großer Kettenlänge stellen also nur einen infinitesimal kleinen Bruchteil aller RLs dar.

Auch für M2Ls gilt $\frac{c_{2n}}{r_{2n}} \to 0$ für $n \to \infty$. Der Quotient fällt jedoch wesentlich langsamer ab als für den NCL, das sich wiederum durch dessen Überkorrektur erklären lässt.

Zur Untersuchung des Verhaltens eines NCLs in hohen, aber endlichen Raumdimensionen ist im nächsten Graphen $\frac{c_{2n}^{\mathrm{NCL}}}{r_{2n}^{\mathrm{RL}}}$ in verschiedenen d aufgetragen.

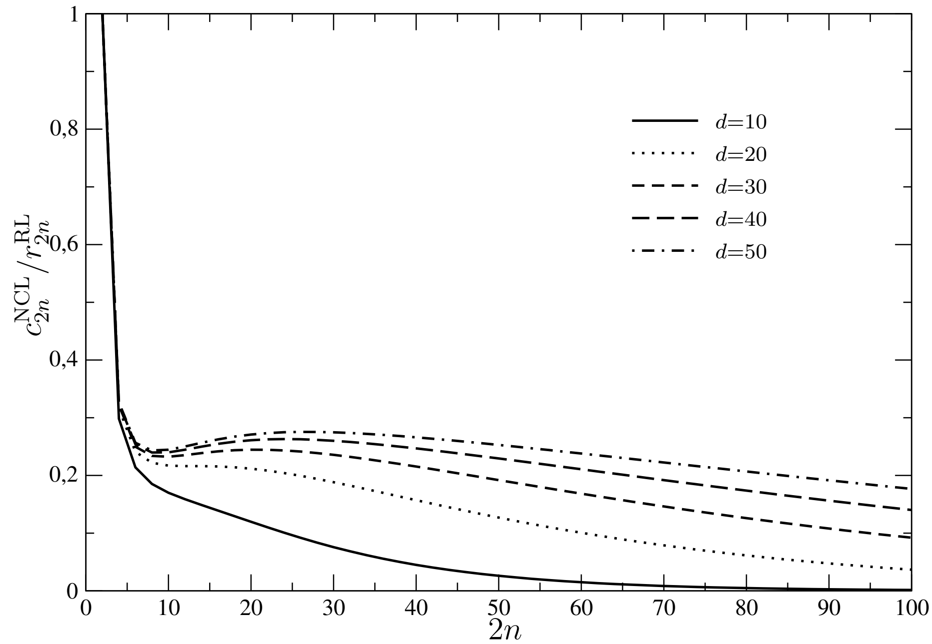


Abbildung 4.11 $\frac{c_{2n}^{\mathrm{NCL}}}{r_{2n}^{\mathrm{RL}}}$ in verschiedenen d

Mit größer werdender Raumdimension bildet sich ein Maximum in $\frac{c_{2n}^{\mathrm{NCL}}}{r_{2n}^{\mathrm{RL}}}$ aus, das sich mit wachsendem d zu höherer Kettenlänge verschiebt. Für $n \to \infty$ konvergiert das Verhältnis jedoch stets gegen 0, wenn auch immer langsamer. Es gilt daher für den NCL

$$\lim_{n\to\infty} \frac{c_{2n}^{\mathrm{NCL}}}{r_{2n}^{\mathrm{RL}}} = 0 \qquad \text{für } d < \infty \tag{4.48}$$

Im nächsten Schritt wird die Zusammenhangskonstante μ eines NCLs bestimmt. Dazu werden für die verschiedenen Raumdimensionen die Zahl der Loops jeweils bis zu einer Kettenlänge $2n = 1000$ exakt berechnet und im Intervall $2n \in [100, 1000]$ an das Skalierungsverhalten $c_n \sim \mu^n n^{\alpha-2}$ gefittet. Aus diesem Grund werden auch nur Daten für $d \leq 30$ präsentiert. Bei höheren Raumdimensionen reicht dieser Fitbereich nicht aus, der aufgrund des hohen Speicherbedarfs bei der Berechnung der c_{2n} nicht mehr erweitert werden kann. Zum besseren Vergleich der Daten wird in der folgenden Abbildung der dominierende Anteil $2d-1$ von μ subtrahiert. Die ausgefüllten Kreise zeigen die exakten Ergebnisse für $d = 2, \ldots, 8$, die für große d sehr gut durch die $\frac{1}{d}$-Entwicklung

$$\mu = 2d - 1 - \frac{1}{2d} - \frac{3}{(2d)^2} - \frac{16}{(2d)^3} - \frac{102}{(2d)^4} - \cdots \tag{4.49}$$

beschrieben werden.

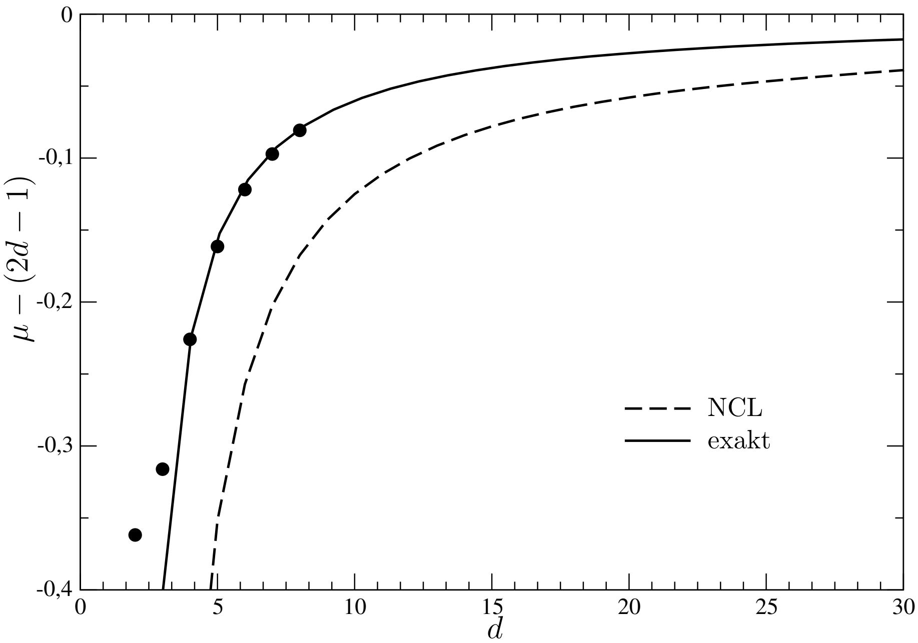


Abbildung 4.12 Zusammenhangskonstante μ in verschiedenen d

Man stellt fest, dass in endlichen Raumdimensionen der NCL das asymptotische Verhalten der c_{2n}^{SAL} nicht korrekt wiedergibt, durch die Überkorrektur zum RL erhält man stets ein etwas zu kleines μ. Die Koeffizienten wachsen also nicht so stark an wie beim exakten SAL.
Bei dem M2L liegt die Zusammenhangskonstante $\mu = 2d-1$ oberhalb des exakten Ergebnisses. Da jedoch nicht alle Rückkehrprozesse ausgeschlossen werden, ergibt sich ein stärkerer Anstieg der c_{2n}^{M2L} verglichen mit dem SAL.

Der kritische Exponent $\alpha - 2$ wird in der nächsten Abbildung genauer betrachtet. Da für den RL $\alpha - 2 = -\frac{d}{2}$ gilt, trägt man zur Vereinfachung $\frac{\alpha-2}{d}$ auf.

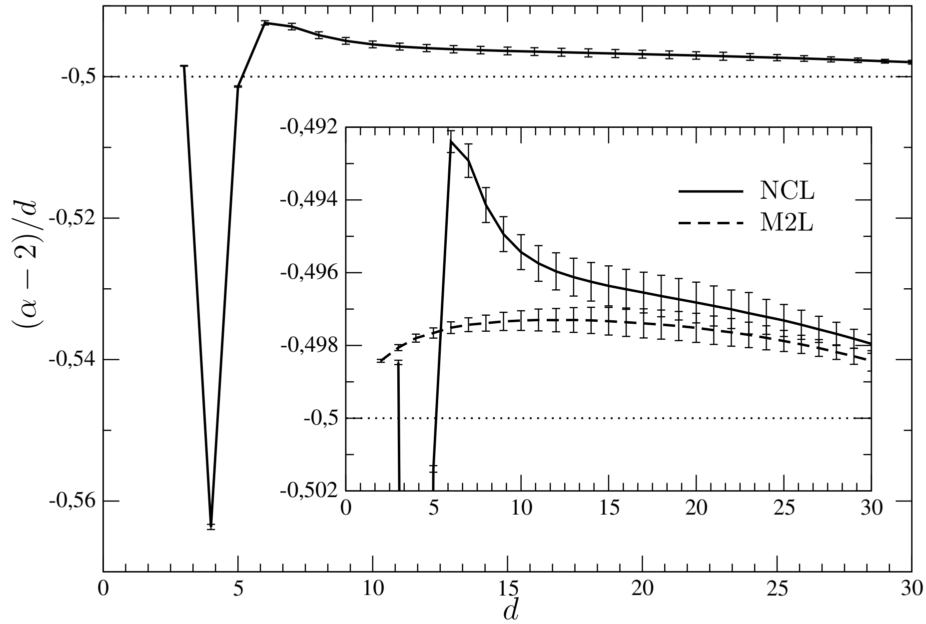


Abbildung 4.13 Kritischer Exponent $\alpha - 2$ in verschiedenen d

Der Inset zeigt eine Vergrößerung des Bereiches um $\frac{\alpha-2}{d} = -\frac{1}{2}$, außerdem ist hier ein Vergleich mit dem M2L dargestellt. Die angegebenen Fehlerbalken ergeben sich ausschließlich aus dem Fit der Skalierungsfunktion. Da jedoch nur im Bereich bis $2n = 1000$ gefittet wurde, wird sich der tatsächliche Fehler des kritischen Exponenten vergrößern.
Man sieht, dass für den NCL und den M2L der kritische Exponent für $d \to \infty$ gegen das Mean-Field-Ergebnis $\alpha - 2 = -\frac{d}{2}$ konvergiert.

4.8.2 Limes $d \to \infty$

In diesem Abschnitt wird das Verhalten des Non-Crossing und Memory-2 Loops im Limes unendlicher Raumdimensionen untersucht. Für den RL in $d \to \infty$ gilt

$$r_{2n}^{\mathrm{RL}\,(\infty)} = \frac{(2n)!}{n!} \tag{4.50}$$

Um dies mit dem Verhalten in endlichen Raumdimensionen vergleichen zu können müssen für $d < \infty$ die Koeffizienten c_{2n} mit d^{-n} skaliert werden.

$$\tilde{c}_{2n}^{(d)} = \frac{c_{2n}^{(d)}}{d^n} \tag{4.51}$$

Bereits für den RL zeigt sich ein Unterschied im asymptotischen Verhalten in $d \to \infty$ zum Fall mit endlichem d. Für $d < \infty$ erhält man direkt einen exponentiellen Anstieg der $\tilde{r}_{2n}^{(d)}$.

$$r_{2n}^{\mathrm{RL}\,(d)} \sim \frac{(2d)^{2n}}{(2n)^{d/2}} \quad \Rightarrow \quad \tilde{r}_{2n}^{\mathrm{RL}\,(d)} \sim \frac{(4d)^{n}}{(2n)^{d/2}} \tag{4.52}$$

Für $d \to \infty$ wachsen die Koeffizienten dagegen überexponentiell an.

$$r_{2n}^{\mathrm{RL}\,(\infty)} \sim \left(\frac{2n}{e}\right)^{\frac{n}{2}} \tag{4.53}$$

Das unterschiedliche Skalierungsverhalten des NCLs verdeutlicht die nächste Abbildung.

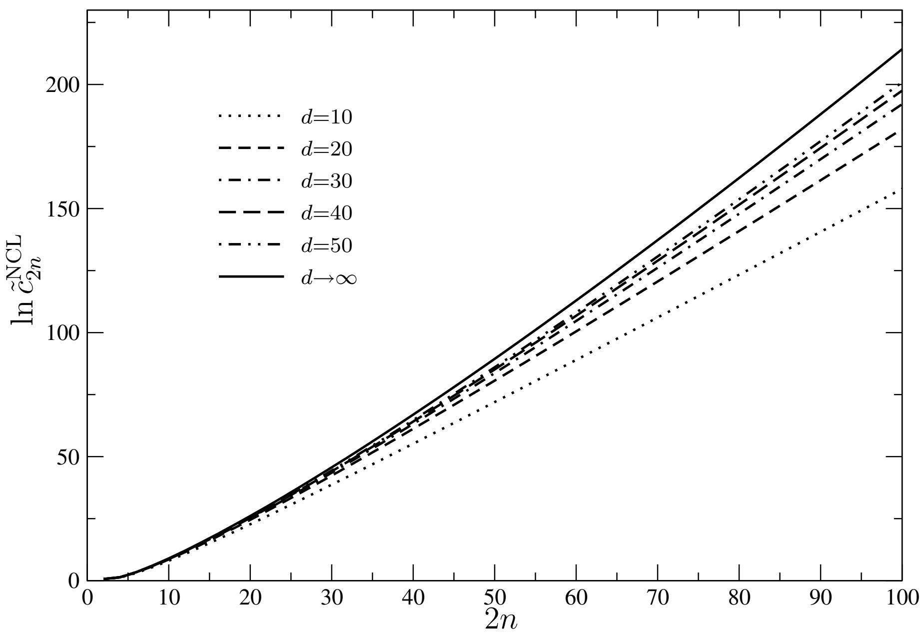


Abbildung 4.14 $\ln \tilde{c}_{2n}^{\mathrm{NCL}}$ in verschiedenen d

Man erkennt, dass die Kurven für $d < \infty$ langsam gegen den Grenzfall $d \to \infty$ konvergieren. Für endliche Raumdimensionen besitzt $\ln \tilde{c}_{2n}^{\mathrm{NCL}}$ im Limes $n \to \infty$ die konstante Steigung $\ln\left(2\sqrt{d} - \frac{1}{\sqrt{d}}\right)$, während diese für $d \to \infty$ wie $\ln\sqrt{2n}$, also logarithmisch divergiert.
Ein NCL besitzt daher ebenfalls ein unterschiedliches Skalierungsverhalten für endliche bzw. unendliche Raumdimensionen.

In [Leu98] wurde gezeigt, dass in $d \to \infty$ die NCLs einen endlichen Bruchteil aller RLs darstellen.

$$\lim_{l\to\infty} \frac{c_{2l}^{\mathrm{NCL}}}{r_{2l}^{\mathrm{RL}}} = \frac{1}{e} \tag{4.54}$$

Wie man an dem folgenden Graphen sieht, gilt diese Beziehung nicht nur für einen NCL, sondern auch für Loops mit Gedächtnis 2.

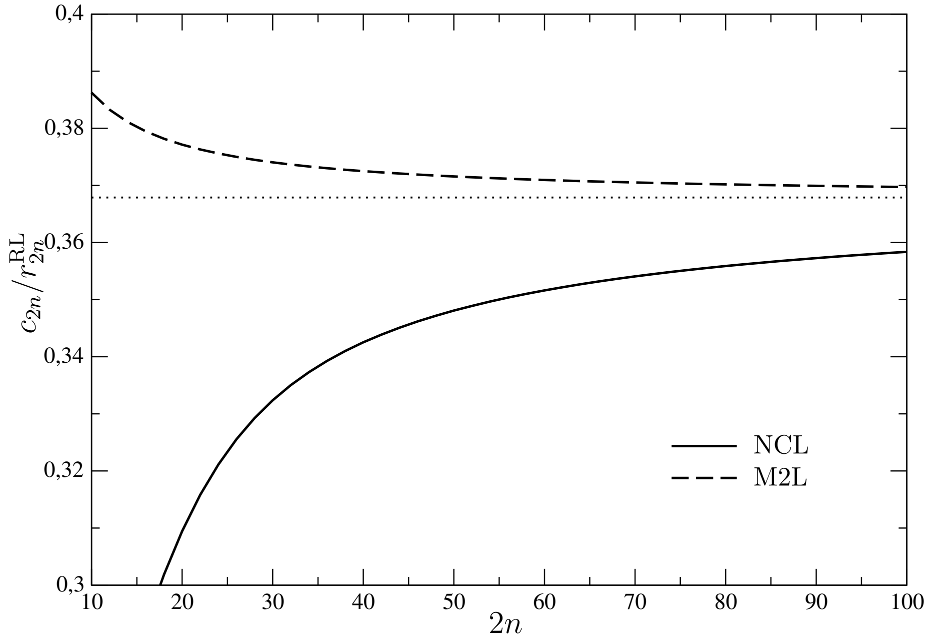


Abbildung 4.15 $\frac{c_{2n}}{r_{2n}^{\mathrm{RL}}}$ für einen NCL und einen M2L in $d \to \infty$

Ein Beweis lässt sich leicht mit (4.46) führen. Für $d \to \infty$ geht diese Gleichung über in

$$c_{2l}^{\mathrm{M2L}} = \sum_{n}^{l-1} (-)^n 2^n \binom{2l-n-1}{n} r_{2(l-n)}^{\mathrm{RL}} \tag{4.55}$$

Für das gesuchte Verhältnis erhält man daraus unmittelbar

$$\begin{aligned} \frac{c_{2l}^{\mathrm{M2L}}}{r_{2l}^{\mathrm{RL}}} &= \sum_{n}^{l-1} (-)^n 2^n \underbrace{\binom{2l-n-1}{n}}_{\sim \frac{(2l-n-1)^n}{n!}} \underbrace{\frac{r_{2(l-n)}^{\mathrm{RL}}}{r_{2l}^{\mathrm{RL}}}}_{\sim \frac{1}{2^{2n} l^n}} \\ &= \sum_{n}^{l-1} \frac{(-)^n}{n!} \Big(1 - \frac{n+1}{2l}\Big)^n \\ &\xrightarrow{l\to\infty} \sum_{n}^{\infty} \frac{(-)^n}{n!} = \frac{1}{e} \end{aligned} \tag{4.56}$$

Diese Ergebnisse legen nahe, dass auch der physikalische NCL und M2L zu einem endlichen Verhältnis führen [KeiLeu00].

Kapitel 5

Vergleich von CPA und DMFT

Nachdem im letzten Abschnitt der mathematische Self-Avoiding Walk im Mittelpunkt der Untersuchungen stand, wird nun ein Vergleich zwischen der Coherent Potential Approximation und der Dynamischen-Mean-Field-Theorie angestellt. Hierbei wird zunächst die CPA als Näherung für ein System mit diagonaler Substitutionsunordnung erläutert. Eine Beschreibung der DMFT als allgemeiner Ansatz zur Lösung von Gittermodellen in der Vielteilchenphysik erfolgt im nächsten Teil dieses Kapitels. Nach diesen einführenden Betrachtungen lässt sich die Äquivalenz beider Näherungen zeigen, die man aufgrund der gleichen formalen Struktur der Selbstkonsistenzgleichungen und ihrer ähnlichen Herleitung bereits seit längerem vermutet. Die CPA-Gleichungen ergeben sich aus der Spezialisierung der DMFT auf ungeordnete Systeme.

5.1 Coherent Potential Approximation

An dieser Stelle wird eine kurze Einleitung in die Streutheorie ungeordneter Systeme gegeben. Eine ausführliche Darstellung dieser Grundlagen findet man in vielen Büchern der Vielteilchenphysik [FetWal71, Ric80, Eco90]. Anschließend wird die Coherent Potential Approximation hergeleitet, die 1967 von P. Soven entwickelt wurde [Sov67, VelKirEhr68, Sov69, EllKruLea74].

5.1.1 Grundlagen der Streutheorie

Einen Hamilton-Operator für einen Festkörper, dessen Atome einem zusätzlichen Störpotential ausgesetzt sind, führte zuerst P. W. Anderson im Jahr

1958 ein [And58].

$$H = H_0 + H_V = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c^\dagger_{k\sigma} c_{k\sigma} + \sum_{i,j,\sigma} V_{ij} c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma} \tag{5.1}$$

Hierbei beschreibt H_0 das ungestörte Leitungsband mit der Dispersionsrelation ϵ_k. H_V beinhaltet die Störung durch die Potentiale V_{ij}, die auch nichtdiagonale Anteile enthalten können.
Zur Herleitung der CPA spezialisiert man diesen allgemeinen Ansatz zumeist auf den Fall der diagonalen Substitutionsunordnung, es gilt $V_{ij} = \delta_{ij} V_i$.

$$H_V = \sum_{i,\sigma} V_i c^\dagger_{i\sigma} c_{i\sigma} \tag{5.2}$$

Für einen Hamilton-Operator mit zeitunabhängiger Störung lässt sich ein einfacher Zusammenhang zwischen der ungestörten Green-Funktion

$$g(z) = (z - H_0)^{-1} \tag{5.3}$$

und der Green-Funktion des wechselwirkenden Systems

$$G(z) = (z - H)^{-1} = (z - H_0)^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} \left(H_V (z - H_0)^{-1}\right)^n = g(z) + g(z) H_V G(z) \tag{5.4}$$

angeben. Diese Gleichung kann formal nach dem gesuchten $G(z)$ aufgelöst werden und bietet den Ausgangspunkt für eine störungstheoretische Lösung des Problems.

$$G(z) = \left(1 - g(z) H_V\right)^{-1} g(z) \tag{5.5}$$

Ein anderer Lösungsansatz ergibt sich aus der Definition einer Streumatrix $T(z)$, die die Streuung der Bandelektronen aufgrund des Störpotentials H_V beschreibt.

$$G(z) = g(z) + g(z) T(z) g(z) \tag{5.6}$$

Die Streumatrix lässt sich eindeutig aus H_V berechnen. Mit dem folgenden Ausdruck wird in Abschnitt 6.2 die Streumatrix des Anderson-Modells im Schrieffer-Wolff-Limes mit einem klassischen Impurity-Spin berechnet.

$$T(z) = \left(1 - H_V g(z)\right)^{-1} H_V \quad \Leftrightarrow \quad H_V = T(z)\left(1 + g(z) T(z)\right)^{-1} \tag{5.7}$$

In einem ungeordneten System sind die Potentialstärken V_i nicht a priori vorgegeben, sondern zufällig verteilt. Zur Bestimmung der makroskopischen Eigenschaften eines solchen Systems braucht aber auch nicht die exakte mikroskopische Konfiguration bekannt zu sein. Stattdessen ist man an über alle Konfigurationen gemittelte Größen interessiert. Dazu mache man sich klar, dass die Leitfähigkeit einer Kupfer-Eisen-Legierung nicht von den exakten Positionen der Kupfer- und Eisen-Atome abhängt, sondern nur von deren Konzentration.

Hängt eine Observable X von N Zufallsvariablen $\alpha_1, \ldots, \alpha_N$ ab, die gemäß $P(\alpha_1, \ldots, \alpha_N)$ verteilt sind, so wird ihr Konfigurationsmittel mit $\overline{X}^{\mathrm{conf}}$ bezeichnet.

$$\overline{X(\alpha_1, \ldots, \alpha_N)}^{\mathrm{conf}} = \int d\alpha_1 \cdots d\alpha_N \, P(\alpha_1, \ldots, \alpha_N) X(\alpha_1, \ldots, \alpha_N) \tag{5.8}$$

Bei statistisch unabhängigen α_j faktorisiert die Gesamtwahrscheinlichkeit $P(\alpha_1, \ldots, \alpha_N)$ in das Produkt der Einzelwahrscheinlichkeiten $p(\alpha_j)$.

$$P(\alpha_1, \ldots, \alpha_N) = \prod_{j=1}^{N} p(\alpha_j) \tag{5.9}$$

Die Integration in der Konfigurationsmittelung lässt sich dadurch vereinfachen.

$$\overline{X(\alpha_1, \ldots, \alpha_N)}^{\mathrm{conf}} = \prod_{j=1}^{N} \int d\alpha_j \, p(\alpha_j) X(\alpha_1, \ldots, \alpha_N) \tag{5.10}$$

Diese wenigen allgemeinen Betrachtungen werden nun auf den Hamilton-Operator (5.1) angewendet, der mit dem Störpotential V nur eine Zufallsvariable besitzt. Bei der Bestimmung der gemittelten Green-Funktion $\overline{G(z)}^{\mathrm{conf}}$ aus der Streumatrix nach (5.6) hängen die ungestörten Propagatoren $g(z)$ nicht von V_i ab, daher braucht die Mittelung ausschließlich über die Streumatrix durchgeführt zu werden.

$$\overline{G(z)}^{\mathrm{conf}} = g(z) + g(z)\overline{T(z)}^{\mathrm{conf}} g(z) \tag{5.11}$$

Eine alternative Berechnung von $\overline{G(z)}^{\mathrm{conf}}$ kann mithilfe einer Selbstenergie $\Sigma(z)$ geschehen, die über die Dyson-Gleichung definiert wird.

$$\overline{G(z)}^{\mathrm{conf}} = g(z) + g(z)\Sigma(z)\overline{G(z)}^{\mathrm{conf}} \tag{5.12}$$

Über eine geometrische Reihe lässt sich aus der Selbstenergie eindeutig die Streumatrix gewinnen und vice versa.

$$\overline{T(z)}^{\mathrm{conf}} = \big(1 - \Sigma(z)g(z)\big)^{-1}\Sigma(z) \quad \Leftrightarrow \quad \Sigma(z) = \overline{T(z)}^{\mathrm{conf}}\big(1 + g(z)\overline{T(z)}^{\mathrm{conf}}\big)^{-1} \tag{5.13}$$

Am Ende dieses Abschnittes sollte einmal explizit erwähnt werden, dass alle hier auftretenden Gleichungen echte Matrixgleichungen sind, wobei die Produkte als Matrixprodukte zu interpretieren sind. Z. B. gilt für die Dyson-Gleichung die Komponentenschreibweise

$$\overline{G_{ij}(z)}^{\mathrm{conf}} = g_{ij}(z) + \sum_{k,l} g_{ik}(z)\Sigma_{kl}(z)\overline{G_{lj}(z)}^{\mathrm{conf}} \tag{5.14}$$

Ist die Selbstenergie jedoch ein Vielfaches der Einheitsmatrix, also eine skalare Größe, so lässt sich das gesuchte $\overline{G(z)}^{\mathrm{conf}}$ aus einer Verschiebung des Arguments der ungestörten Green-Funktion $g(z)$ um die Selbstenergie $\Sigma(z)$ berechnen.

$$\overline{G(z)}^{\mathrm{conf}} = \big(1 - g(z)\Sigma(z)\big)^{-1} g(z) = g\big(z - \Sigma(z)\big) \tag{5.15}$$

5.1.2 Herleitung der CPA

Zur Bestimmung der Green-Funktion des Hamilton-Operators (5.1) muss wie im vorherigen Abschnitt erläutert entweder die Streumatrix T oder die Selbstenergie Σ bestimmt werden. Dies ist im allgemeinen nicht exakt möglich, daher wird an dieser Stelle die sehr häufig verwendete Coherent Potential Approximation hergeleitet.

Dazu betrachtet man zunächst den Fall eines Störpotentials V_i am Gitterplatz i. In dieser Situation lässt sich die lokale Streumatrix t_i aus den Bewegungsgleichungen für die Green-Funktion exakt bestimmten.[1]

$$t_i = \frac{V_i}{1 - V_i g_0} = V_i + V_i\, g_0\, V_i + V_i\, g_0\, V_i\, g_0\, V_i + \cdots \tag{5.16}$$

Das Elektron kann ein- oder mehrmals am Site i gestreut werden, dabei durchläuft es zwischen den einzelnen Streuprozessen einen Loop durch das ungestörte Gitter, welcher mit g_0 bezeichnet wird.

$$g_0 = g_{00} = \langle g \rangle = \frac{1}{N} \sum_k g_k \tag{5.17}$$

Für mehrere Störstellen setzt sich die Streumatrix T aus den atomaren t_i zusammen.

$$T_{ij} = t_i\, \delta_{ij} + t_i\, \bar{g}_{ij}\, t_j + \sum_l t_i\, \bar{g}_{il}\, t_l\, \bar{g}_{lj}\, t_j + \cdots \tag{5.18}$$

[1] Im folgenden wird zur besseren Lesbarkeit häufig das Argument der Green-Funktionen etc. weggelassen, solange es zu keinen Missverständnissen führen kann. Aus demselben Grund verwendet man sowohl für $A\,B^{-1}$ als auch für $B^{-1}A$ mit zwei Matrizen oder Operatoren A, B die Quotientenschreibweise $\frac{A}{B}$, dies ist eindeutig für $[A, B] = 0$.

Das Elektron wird zunächst am Gitterplatz i ein- oder mehrfach gestreut und propagiert anschließend durch das ungestörte Band zur nächsten Site $j \neq i$. Diese Bewegung durch das Gitter wird durch $\bar{g}_{ij} = g_{ij}(1 - \delta_{ij})$ beschrieben. In der Average T-Matrix Approximation (ATA) nimmt man an, dass in (5.18) jeder Gitterplatz nur einmal besucht wird, somit faktorisieren die einzelnen Mittelungen der t_i wegen der statistischen Unabhängigkeit der lokalen Streupotentiale. Weiterhin werden die $\overline{t_i}^{\text{conf}}$ gitterplatzunabhängig.

$$\overline{t}^{\text{conf}} = \overline{t_i}^{\text{conf}} = \overline{\frac{V}{1 - V g_0}}^{\text{conf}} \tag{5.19}$$

Durch Einsetzen in (5.18) und Ausnutzen der Summenformel für die geometrische Reihe erhält man die konfigurationsgemittelte Streumatrix in der ATA.

$$\overline{T}^{\text{conf}} = \frac{\overline{t}^{\text{conf}}}{1 - \overline{t}^{\text{conf}}(g - g_0)} \tag{5.20}$$

Aus (5.13) lässt sich daraus unmittelbar die Selbstenergie in dieser Näherung angeben, diese ist rein lokal, d. h. k-unabhängig.

$$\Sigma = \frac{\overline{t}^{\text{conf}}}{1 + \overline{t}^{\text{conf}} g_0} \tag{5.21}$$

Die bis jetzt gewählte Aufteilung des Hamilton-Operators in einen ungestörten und einen Wechselwirkungsanteil ist keineswegs zwingend, solange das ungestörte Problem weiterhin exakt lösbar bleibt. Daher ist es möglich in einem effektiven ungestörten Hamilton-Operator $H_{0,\text{eff}}$ jedem Gitterplatz ein zusätzliches komplexes Potential Σ zuzuordnen, das die Rolle eines effektiven Mediums einnimmt und durch einen analogen Summanden in $H_{V,\text{eff}}$ wieder kompensiert werden muss.

$$H_{\text{eff}} = H_{0,\text{eff}} + H_{V,\text{eff}} = \sum_{k,\sigma} (\epsilon_k + \Sigma) c^\dagger_{k\sigma} c_{k\sigma} + \sum_{i,\sigma} (V_i - \Sigma) c^\dagger_{i\sigma} c_{i\sigma} \tag{5.22}$$

Nach den Ersetzungen $H_0 \rightarrow H_{0,\text{eff}}$ und $H_V \rightarrow H_{V,\text{eff}}$ in den Gleichungen aus Kapitel 5.1.1 gelten diese in gleicher Form auch hier, dabei ergibt sich die ungestörte Green-Funktion $g_{\text{eff}}(z)$ von $H_{0,\text{eff}}$ aus einer Verschiebung des Arguments von $g(z)$ um Σ.

$$g_{\text{eff}}(z) = g(z - \Sigma) \tag{5.23}$$

Das zusätzliche Potential wurde bis jetzt noch gar nicht konkret spezifiziert. Es wird so gewählt, dass die gemittelte Streumatrix der effektiven Störung $H_{V,\text{eff}}$ verschwindet $\overline{T}^{\text{conf}} = 0$, dann gilt nach (5.11) und (5.23)

$$\overline{G(z)}^{\text{conf}} = g_{\text{eff}}(z) = g(z - \Sigma) \tag{5.24}$$

Diese Darstellung der Lösung rechtfertigt es im Nachhinein das effektive Medium als eine skalare Selbstenergie Σ zu bezeichnen.
Leider kann die Bedingung $\overline{T}^{\text{conf}} = 0$ nicht exakt erfüllt werden, man greift daher auf eine Näherung für die Streumatrix zurück. Hierzu wird eine durch die Substitution $g_0 \rightarrow \overline{G_0}^{\text{conf}}$ selbstkonsistent gemachte ATA (5.20) verwendet, bei der das Potential V durch das effektive Potential $V - \Sigma$ ersetzt werden muss. Nach wenigen Umformungen erhält man daraus die Selbstkonsistenzgleichung für die Selbstenergie in der Coherent Potential Approximation.

$$\Sigma = \overline{\frac{V}{1 - \overline{G_0}^{\text{conf}}(V - \Sigma)}}^{\text{conf}} \tag{5.25}$$

Im Falle eines Störpotentials V, das in einer Konzentration c_{imp} vorliegt, ist die CPA exakt in den Limites $c_{\text{imp}} = 0$ und $c_{\text{imp}} = 1$. Für $c_{\text{imp}} = 0$ gilt sofort $\Sigma = 0$, während für $c_{\text{imp}} = 1$ das aus den Bewegungsgleichungen berechenbare $\Sigma = V$ die CPA-Gleichung löst.

Eine diagrammatische Herleitung der ATA und CPA ist ebenfalls möglich und findet sich in vielen Lehrbüchern [Nol02]. Hierbei wird deutlich, dass die CPA unter allen Single-Site-Näherungen die mit Abstand beste ist. Sie berücksichtigt ähnlich dem ersten Summanden in der Lace-Entwicklung für den Self-Avoiding Walk in Kapitel 4.5 alle Anteile ohne Überkreuzungen. Wie beim SAW lässt sich aus dem dimensionalen Verhalten der g_{xy} auch für die CPA zeigen, dass eine solche Näherung im Limes $d \rightarrow \infty$ exakt wird. Diese Gemeinsamkeiten legen einen engen Zusammenhang zwischen beiden Approximationen nahe, der in Abschnitt 5.3 detailliert untersucht wird.

5.2 Dynamische-Mean-Field-Theorie

Die Dynamische-Mean-Field-Theorie stellt eine weit verbreitete Methode in der Festkörperphysik dar, die nach einer geeigneten Skalierung des Hopping-Matrixelements in unendlichen Raumdimensionen ein Gittermodell exakt auf ein effektives Ein-Störstellen-Modell abbildet. Einen Überblick über dieses sehr mächtige Verfahren, das manchmal auch als Local Impurity Self-Consistent Approximation bezeichnet wird, findet man in [GeoKotKraRoz96].
W. Metzner und D. Vollhardt konnten mit der DMFT das Hubbard-Modell in $d \rightarrow \infty$ lösen und wiesen darauf hin, dass ihr Ergebnis die physikalisch relevanten Dimensionen $d = 2, 3$ besser approximiert als der ebenfalls exakt lösbare ($d = 1$)-Grenzfall [MetVol89]. In der Folge wurden die

Vereinfachungen, die sich im Limes unendlicher Raumdimensionen ergeben, von verschiedenen Autoren untersucht. Z. B. konnte E. Müller-Hartmann zeigen, dass die Selbstenergie in $d \to \infty$ rein lokal und nur durch die Onsite-Wechselwirkungen bestimmt wird [Mül89]. U. Brandt und Ch. Mielsch bildeten mit dieser Näherung das Falicov-Kimball-Modell [FalKim69] auf ein atomares Problem mit zeitabhängigem Hilfsfeld ab und lösten es so [BraMie89, BraMie90, BraMie91].

Ausgangspunkt für die DMFT ist die offensichtliche Tatsache, dass ein Modell mit nur einer Störstelle wesentlich einfacher zu behandeln ist als das entsprechende Gittermodell. In der DMFT führt man daher das Gittermodell mit einem effektiven Medium auf ein selbstkonsistent zu berechnendes Ein-Störstellen-Problem zurück, bei dem der Einfluss aller anderen Störstellen durch ein effektives Leitungsband beschrieben wird. Dieses Verfahren erweitert die bekannte Mean-Field-Näherung z. B. für das Ising-Modell, bei der ein ausgewählter Spin nur ein gemitteltes Magnetfeld der anderen „sieht".

Die Green-Funktion $\mathcal{G}$ dieses effektiven Bandes wird als Self-Avoiding Walk durch das Gitter mit einer sich aus dem Single-Impurity-Modell ergebenden lokalen Streumatrix t angesetzt.

$$\mathcal{G}_{xy} = g_{xy} + \sum_{i_1}^{\neq} g_{xi_1}\, t\, g_{i_1 y} + \sum_{i_1,i_2}^{\neq} g_{xi_1}\, t\, g_{i_1 i_2}\, t\, g_{i_2 y} + \cdots \tag{5.26}$$

Die ungestörte Propagation vom Gitterplatz x nach y bezeichnet man hierbei mit g_{xy}, dessen Eigenschaften in Anhang A erläutert werden. Das Verbot von Mehrfachbesuchen einer Site, d. h. die paarweise Ungleichheit der Summationsindices $i_1, \ldots, i_n$ untereinander sowie mit dem Anfangs- und Endgitterplatz x bzw. y, symbolisiert das Ungleichheitszeichen über dem Summensymbol.

Dieser Ansatz stellt bereits die erste Näherung der DMFT dar, da in dem vollen Gittermodell auch Streuprozesse auftreten, in denen derselbe Site mehrfach besucht wird. Diese Anteile kann ein SAW natürlich nicht beinhalten.

Das lokale t wird in der DMFT selbstkonsistent aus $\mathcal{G}$ berechnet, daher entstehen auch einige unphysikalische Prozesse, bei denen in der Streumatrix besuchte Gitterplätze ebenfalls in der Ortssummation des SAWs vorkommen. Sowohl die nicht berücksichtigten Mehrfach-Streuungen als auch die Überzählungen in der lokalen Streumatrix verbinden die beteiligten Gitterplätze mit mindestens vier Propagatoren g_{xy}. Aufgrund des dimensionalen Skalierungsverhaltens $g_{xy} \sim \sqrt{d}^{\,-\Delta(x,y)}$ mit $\Delta(x,y) = \sum_{j=1}^{d} |x_i - y_i|$ verschwinden diese Anteile jedoch im Limes $d \to \infty$ und die Abbildung wird in diesem

Grenzfall exakt.

Im nächsten Schritt muss der Ausdruck für den SAW (5.26) ausgewertet werden, dieses kann ebenso wie für den mathematischen SAW in Kapitel 4 nicht analytisch geschehen. Eine Rekursionsformel zur Bestimmung einer exakten Lösung des Diagonalteils $\mathcal{G}_{00} = \mathcal{G}_0$ von (5.26) konnte in [Ott98] zwar hergeleitet werden, aber leider verhindert ihre hohe Komplexität eine weitergehende Behandlung. Eine sehr gute Approximation ergibt sich wiederum aus der Lace-Entwicklung, die direkt auf den physikalischen SAW mit Einzelschritten beliebiger Länge übertragen werden kann. Da der ungestörte Propagator g_{xy} und damit auch das gesuchte $\mathcal{G}_{xy}$ in diesem Fall auch selber einen Loop beinhalten, wird die Lace-Entwicklung nicht direkt auf $\mathcal{G}_{xy}$, sondern auf

$$\breve{\mathcal{G}} = \mathcal{G} - \mathcal{G}_0 + \frac{1}{t} \tag{5.27}$$

angewendet. $\breve{\mathcal{G}}$ mit Diagonalanteil $\langle\breve{\mathcal{G}}\rangle = \frac{1}{t}$ beschreibt eine Propagation von der Site x nach $y \neq x$ oder ein Stehenbleiben bei $x = y$, bei dem kein weiterer Streuprozess mehr stattfindet. Die diagrammatische Bestimmung der Selbstenergie für $\breve{\mathcal{G}}$ verläuft analog zu der des mathematischen SAWs in Abschnitt 4.5 und ist in [Leu98] ausführlich erläutert. In der Näherung eines Non-Crossing Walks (Abschnitt 4.6) erhält man für den Diagonalteil der effektiven Green-Funktion folgende Selbstkonsistenzgleichung.

$$\mathcal{G}_0 = \left\langle \frac{g}{1 - t(g - \mathcal{G}_0)} \right\rangle \tag{5.28}$$

Diese Gleichung kann auf eine Auswertung des ungestörten $g_0(z)$ bei verschobenem Argument zurückgeführt werden, wodurch sich eine numerische Auswertung wesentlich vereinfacht.

$$\mathcal{G}_0(z) = \frac{1}{1 + t\mathcal{G}_0}\, g_0\Big(z - \frac{t}{1 + t\mathcal{G}_0(z)}\Big) \tag{5.29}$$

Der obige Ausdruck wurde für die XNCA-Ergebnisse in [Leu98] benutzt. Wie sich bei den numerischen Berechnungen im Verlauf dieser Arbeit herausgestellt hat, besitzt (5.28) jedoch deutlich schlechtere Konvergenzeigenschaften als eine weitere Form der Selbstkonsistenzbedingung, die nicht die asymptotische Lösung $\mathcal{G}_0(z) = \frac{1}{t}$ besitzt.

$$\mathcal{G}_0^{-1}(z) = g_0^{-1}\Big(z - \frac{t}{1 + t\mathcal{G}_0(z)}\Big) + \frac{t}{1 + t\mathcal{G}_0(z)} \tag{5.30}$$

Nach Multiplikation von (5.28) mit $(1 + t\mathcal{G}_0)$ und einigen Umformungen lässt sich ein Zusammenhang zwischen der DMFT und den Gleichungen aus der

Standard-Streutheorie erkennen, der die zugrunde liegende Idee des effektiven Mediums nochmals veranschaulicht.

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_0 + \mathcal{G}_0\, t\, \mathcal{G}_0 &= \Big\langle \frac{g(1+t\mathcal{G}_0)}{1-t(g-\mathcal{G}_0)} \Big\rangle = \Big\langle \frac{g}{1-\frac{t}{1+t\mathcal{G}_0} g} \Big\rangle \\ &= \Big\langle \frac{g}{1-\Sigma g} \Big\rangle = g_0(z-\Sigma) = G_0(z)\end{aligned} \tag{5.31}$$

Zu Beginn der zweiten Zeile wurde die Definition der Selbstenergie Σ ausgenutzt. Aufgrund der Lokalität der Streumatrix t wird auch Σ zu einer skalaren Größe und die gesuchte volle Green-Funktion $G_0(z)$ ergibt sich aus dem ungestörten $g_0(z)$ mit verschobenem Argument. Die DMFT lässt sich daher auch wie folgt formulieren und die Äquivalenz zu (2.59) aus dem Hilfsfeldformalismus wird deutlich.

$$G_0 = \mathcal{G}_0 + \mathcal{G}_0\, t\, \mathcal{G}_0 \qquad\qquad G_0 = \mathcal{G}_0 + \mathcal{G}_0\, \Sigma\, G_0 \tag{5.32a}$$

$$t = \frac{\Sigma}{1-\Sigma\mathcal{G}_0} \qquad\qquad \Sigma = \frac{t}{1+t\mathcal{G}_0} \tag{5.32b}$$

Diese Gleichungen sind rein skalar und aus ihnen lässt sich nur der Diagonalteil G_0 bestimmen, aus dem jedoch die wichtigsten physikalischen Informationen gewonnen werden. Dies verdeutlicht den wesentlichen Unterschied zu den Matrixgleichungen aus der Standard-Streutheorie, deren grundlegenden Beziehungen zwischen gesuchter Green-Funktion G, Streumatrix T und Selbstenergie Σ aus Abschnitt 5.1.1 für einen besseren Vergleich noch einmal wiederholt werden.

$$G = g + g\, T\, g \qquad\qquad G = g + g\, \Sigma\, G \tag{5.33a}$$

$$T = \frac{\Sigma}{1-\Sigma g} \qquad\qquad \Sigma = \frac{T}{1+Tg} \tag{5.33b}$$

An dieser Stelle zeigen sich die Methode des effektiven Mediums und die sich daraus ergebenden Vereinfachungen. Zum einen wird die volle Streumatrix T durch das lokale t, zum anderen der ungestörte Propagator g durch das effektive $\mathcal{G}_0$ ersetzt. Da in der DMFT ein Ein-Störstellen-Modell zu behandeln ist, gehen die Matrixgleichungen weiterhin in skalare über, die nur noch die Diagonalanteile der Green-Funktionen beinhalten. Die Struktur der Gleichungen bleibt in der DMFT jedoch erhalten, obwohl sie nicht aus einer Störungstheorie, sondern aus einem Non-Crossing Walk als Ansatz für das effektive Band folgen.

5.3 Äquivalenz von CPA und DMFT

Die vielen Gemeinsamkeiten im Laufe der Herleitung von CPA und DMFT in den vorherigen Abschnitten legen einen engen Zusammenhang zwischen beiden Näherungen nahe. Mithilfe eines effektiven Mediums wird in beiden Fällen ein Gitterproblem auf ein einfacher zu behandelndes Ein-Störstellen-Modell abgebildet. Die daraus resultierenden Selbstkonsistenzgleichungen für die Selbstenergie Σ in der CPA bzw. für den effektiven Propagator $\mathcal{G}_0$ in der DMFT besitzen dieselbe Struktur.

$$\Sigma = \overline{\frac{V}{1 - \overline{G_0}^{\text{conf}}(V - \Sigma)}}^{\text{conf}} \qquad \text{bzw.} \quad \mathcal{G}_0 = \left\langle \frac{g}{1 - t(g - \mathcal{G}_0)} \right\rangle \tag{5.34}$$

Die Übereinstimmung lässt sich durch die analoge diagrammatische Herleitung erklären, in der jeweils alle Anteile ohne Überkreuzungen aufsummiert werden. Die nicht berücksichtigten Terme verschwinden im Grenzfall unendlicher Raumdimensionen, daher werden die CPA und DMFT in diesem Limes exakt.

Neben diesen Gemeinsamkeiten gibt es jedoch auch einige Unterschiede, die einen direkten Vergleich von CPA und DMFT verhindern. Zunächst ist zu beachten, dass die Gleichungen (5.34) zwar formal sehr ähnlich sind, aber völlig verschiedene physikalische Größen beinhalten, z. B. entspricht dem Störstellenpotential V in der CPA die ungestörte Green-Funkion g in der DMFT. Dabei werden auch zwei unterschiedliche Mittelungsprozesse durchgeführt, zum einen eine Konfigurationsmittelung und zum anderen eine Mittelung aller Impulse k über die erste Brillouin-Zone. Eine weitere Schwierigkeit ergibt sich daraus, dass es keine CPA-Gleichung für die Streumatrix $\overline{T}^{\text{conf}}$ gibt, deren Nicht-Lokalität sich mit einer Reihenentwicklung zeigen lässt. Im Gegensatz dazu basiert die DMFT jedoch auf der lokalen Streumatrix t eines Single-Site-Modells.

Zur Herleitung des Zusammenhangs zwischen CPA und DMFT geht man von der Streumatrix t eines Ein-Störstellen-Modells mit zufälligem Störpotential aus, die direkt aus der Konfigurationsmittelung von (5.16) folgt. In der DMFT wird t nun nicht mit dem ungestörten Propagator g_0, sondern mit dem effektiven $\mathcal{G}_0$ berechnet, das den Einfluss der anderen Störstellen beschreibt.

$$t = \overline{\frac{V}{1 - \mathcal{G}_0 V}}^{\text{conf}} \tag{5.35}$$

Aus dem lokalen t lässt sich mit (5.32b) die Selbstenergie Σ gewinnen.

$$\Sigma = \frac{t}{1 + t\mathcal{G}_0} = \overline{\frac{V}{1 - V(\mathcal{G}_0 + \mathcal{G}_0\, t\, \mathcal{G}_0) + t\mathcal{G}_0}}^{\text{conf}} \tag{5.36}$$

Nach (5.32b) gilt weiterhin $\mathcal{G}_0 + \mathcal{G}_0\, t\, \mathcal{G}_0 = \overline{G_0}^{\text{conf}}$ und $t\mathcal{G}_0 = \Sigma\, \overline{G_0}^{\text{conf}}$. Man erhält somit aus der DMFT folgende Selbstkonsistenzbedingung für Σ.

$$\Sigma = \overline{\frac{V}{1 - \overline{G_0}^{\text{conf}}(V - \Sigma)}}^{\text{conf}} \tag{5.37}$$

Diese Gleichung ist äquivalent zu der CPA-Gleichung (5.25) aus der Theorie ungeordneter Systeme, die auf einem vollkommen anderen Wege hergeleitet wurde. Die CPA kann somit als Spezialisierung der DMFT auf ungeordnete Systeme interpretiert werden und der anfangs vermutete Zusammenhang zwischen beiden Näherung bestätigt sich voll und ganz. Aus (5.32b) und (5.33b) lässt sich erstmals auch die nicht-lokale Streumatrix $\overline{T}^{\text{conf}}$ in der CPA angeben, die sich bisher nur durch eine Reihenentwicklung bestimmen ließ.

$$\overline{T}^{\text{conf}} = \frac{t}{1 - t(g - \mathcal{G}_0)} \tag{5.38}$$

Kapitel 6

Klassischer Schrieffer-Wolff-Limes des Anderson-Modells

Eine exakte Lösung des Ein-Störstellen-Problems ist nicht nur für ein System mit diagonaler Substitutionsunordnung möglich, sondern auch für eine vereinfachte Form des Anderson-Modells. Dies lässt eine detaillierte Untersuchung der Lösungseigenschaften der Selbstkonsistenzschleife zu, da eventuelle Artefakte aus einer approximativen Lösung des Single-Site-Modells ausgeschlossen werden können. Dazu betrachtet man dieses Modell nach einer Schrieffer-Wolff-Transformation, die auf ein *sd*-Modell mit zusätzlicher Potentialstreuung führt [SchWol66, KeiKim71, Hew93]. Weiterhin werden im folgenden die Quanteneigenschaften des Störstellen-Spins vollständig vernachlässigt und die in diesem Fall, der als klassischer Schrieffer-Wolff-Limes bezeichnet wird, exakt berechenbare Streumatrix wird bei festem Spinbetrag $|\vec{S}| = \frac{1}{2}$ in einem äußeren Magnetfeld klassisch gemittelt.
Die Streumatrix kann bei der Bestimmung des effektiven Bandes voll selbstkonsistent in die Rechnung einbezogen werden. Dies unterscheidet dieses Modell grundlegend von der Behandlung der Selbstkonsistenzbedingung mit einer a priori vorgegebenen Modellzustandsdichte für die f-Green-Funktion des Anderson-Modells in [Leu98, KeiLeu00], in der die Streumatrix während der Iteration konstant bleibt.

6.1 Schrieffer-Wolff-Transformation

Ausgangspunkt der Schrieffer-Wolff-Transformation ist das SIAM mit nur zwei Spinorientierungen $\sigma = \uparrow, \downarrow$, das hier im Limes $U \to \infty$ betrachtet wird.

$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c^\dagger_{k\sigma} c_{k\sigma} + \sum_\sigma \epsilon_f \bar{f}^\dagger_\sigma \bar{f}_\sigma + V \sum_{k,\sigma} \left(\bar{f}^\dagger_\sigma c_{k\sigma} + c^\dagger_{k\sigma} \bar{f}_\sigma \right) \tag{6.1}$$

Liegt die Onsite-Energie der Störstelle weit unterhalb der Fermi-Energie $\epsilon_f < \epsilon_{\text{Fermi}}$, so besitzt der Grundzustand bei verschwindender Hybridisierung $V = 0$ genau ein f-Elektron. Für $V \neq 0$ können Elektronen aus dem lokalisierten f-Niveau ins Leitungsband und vice versa übergehen. Es entsteht eine Mischung zwischen dem einfach-besetzten Grundzustand $|\Psi_1\rangle$ und einem Zustand mit leerem f-Niveau $|\Psi_0\rangle$. Mithilfe der Schrieffer-Wolff-Transformation, mit der 1966 von J. R. Schrieffer und P. A. Wolff der Zusammenhang zwischen dem Anderson- und sd-Modell gefunden wurde [SchWol66], wird ein effektiver Hamilton-Operator bestimmt, der virtuelle Anregungen des einfach-besetzten $|\Psi_1\rangle$ in den angeregten Zustand $|\Psi_0\rangle$ in niedrigster Ordnung Störungstheorie berücksichtigt. Anregungen in ein doppelt-besetztes f-Niveau entfallen für $U \to \infty$. Die gesuchte Wellenfunktion $|\Psi\rangle$ ergibt sich somit aus einer Linearkombination der $|\Psi_n\rangle$. Nach diesen Vorüberlegungen schreibt sich die Schrödinger-Gleichung $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ wie folgt.

$$\begin{pmatrix} H_{00} & H_{01} \\ H_{10} & H_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\Psi_0\rangle \\ |\Psi_1\rangle \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} |\Psi_0\rangle \\ |\Psi_1\rangle \end{pmatrix} \tag{6.2}$$

Dabei gilt $H_{mn} = P_m H P_n$. Die P_n beschreiben Projektoren auf denjenigen Unterraum, der mit genau n f-Elektronen besetzt ist. Eine explizite Darstellung lautet

$$P_0 = (1 - \bar{f}^\dagger_\uparrow \bar{f}_\uparrow)(1 - \bar{f}^\dagger_\downarrow \bar{f}_\downarrow) \quad \text{und} \quad P_1 = \bar{f}^\dagger_\uparrow \bar{f}_\uparrow + \bar{f}^\dagger_\downarrow \bar{f}_\downarrow \tag{6.3}$$

Eine Änderung der Besetzung des f-Niveaus ist in (6.2) nur durch die Hybridisierungsanteile möglich. Somit gehen lediglich diese in die Nebendiagonalelemente der H_{mn} ein, die Diagonalanteile werden durch die Energie der Leitungselektronen $H_0 = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c^\dagger_{k\sigma} c_{k\sigma}$ und das eventuell vorhandene f-Elektron bestimmt.

$$\begin{aligned} H_{00} &= \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c^\dagger_{k\sigma} c_{k\sigma} \quad & H_{01} &= V \sum_{k,\sigma} c^\dagger_{k\sigma} \bar{f}_\sigma \\ H_{10} &= V \sum_{k,\sigma} \bar{f}^\dagger_\sigma c_{k\sigma} \quad & H_{11} &= \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c^\dagger_{k\sigma} c_{k\sigma} + \epsilon_f \end{aligned} \tag{6.4}$$

Da der Grenzfall $V = 0$ mit dem Grundzustand eines einfach-besetzen f-Niveaus Ausgangspunkt dieser Überlegungen ist, wird $|\Psi_0\rangle$ im Gleichungssystem (6.2) eliminiert.

$$\left(H_0 + H_{10} (E + \epsilon_f - H_{00})^{-1} H_{01} \right) |\Psi_1\rangle = E |\Psi_1\rangle \tag{6.5}$$

Die entstandene Gleichung enthält an dieser Stelle noch keine Näherungen und ist eine exakte Lösung von (6.1). Den zweite Summanden kann man nach Einsetzen der Hamilton-Operatoren (6.4) weiter vereinfachen.

$$H_{10}(E+\epsilon_f-H_{00})^{-1}H_{01} = |V|^2 \sum_{\substack{k,k'\\ \sigma,\sigma'}} \bar{f}^\dagger_\sigma c_{k\sigma}(E+\epsilon_f-H_{00})^{-1}c^\dagger_{k'\sigma'}\bar{f}_{\sigma'} \tag{6.6a}$$

$$= \frac{|V|^2}{\epsilon_f}\sum_{\substack{k,k'\\ \sigma,\sigma'}} \bar{f}^\dagger_\sigma c_{k\sigma}\big(1+\frac{E-\epsilon_{k'}-H_0}{\epsilon_f}\big)^{-1}c^\dagger_{k'\sigma'}\bar{f}_{\sigma'} \tag{6.6b}$$

$$= \frac{|V|^2}{\epsilon_f}\sum_{\substack{k,k'\\ \sigma,\sigma'}} \bar{f}^\dagger_\sigma c_{k\sigma}c^\dagger_{k'\sigma'}\bar{f}_{\sigma'} \tag{6.6c}$$

Da nur Anteile der niedrigsten Ordnung in V berücksichtigt werden sollen, ist der zweite Term in der zweiten Zeile vernachlässigbar.
Bei der weiteren Behandlung unterscheidet man die Fälle $\sigma \neq \sigma'$ und $\sigma = \sigma'$.

- Für $\sigma \neq \sigma'$ antikommutieren alle Operatoren miteinander.

$$\frac{|V|^2}{\epsilon_f}\sum_{k,k'}\big(\underbrace{\bar{f}^\dagger_\uparrow\bar{f}_\downarrow}_{S^+}c_{k\uparrow}c^\dagger_{k'\downarrow}+\underbrace{\bar{f}^\dagger_\downarrow\bar{f}_\uparrow}_{S^-}c_{k\downarrow}c^\dagger_{k'\uparrow}\big) = -\frac{|V|^2}{\epsilon_f}\sum_{k,k'}\big(S^+c^\dagger_{k\uparrow}c_{k'\downarrow}+S^-c^\dagger_{k\downarrow}c_{k'\uparrow}\big) \tag{6.7}$$

  Das Produkt $\bar{f}^\dagger_\uparrow\bar{f}_\downarrow$ vernichtet auf einem f-Level einen $\downarrow$- und erzeugt einen $\uparrow$-Spin. Es lässt sich daher mit der Spin-Algebra für $S=\frac{1}{2}$ als Aufsteige-Operator S^+ interpretieren. Analog kann $\bar{f}^\dagger_\downarrow\bar{f}_\uparrow$ als Absteige-Operator S^- geschrieben werden.

- Im Falle $\sigma \neq \sigma'$ ergibt der Antikommutator zwischen den $c_{k\sigma}$ einen zusätzlichen Term.

$$\frac{|V|^2}{\epsilon_f}\sum_{k,k'}\big(\underbrace{\bar{f}^\dagger_\uparrow\bar{f}_\uparrow}_{n_\uparrow}c_{k\uparrow}c^\dagger_{k'\uparrow}+\underbrace{\bar{f}^\dagger_\downarrow\bar{f}_\downarrow}_{n_\downarrow}c_{k\downarrow}c^\dagger_{k'\downarrow}\big) =$$
$$-\frac{|V|^2}{\epsilon_f}\sum_{k,k'}S^z(c^\dagger_{k\uparrow}c_{k'\uparrow}-c^\dagger_{k\downarrow}c_{k'\downarrow})-\frac{|V|^2}{2\epsilon_f}\sum_{k,k',\sigma}c^\dagger_{k\sigma}c_{k'\sigma} \tag{6.8}$$

  Hierbei wird $\frac{1}{2}(n_\uparrow - n_\downarrow) = S^z$ und $n_\uparrow + n_\downarrow = 1$ verwendet, das im Unterraum eines einfach-besetzen f-Niveaus gilt.

Nach Zusammenfassen aller Terme besteht die Wechselwirkung im Schrieffer-Wolff-Limes somit aus zwei Termen.

- Der erste Teil beschreibt eine Potentialstreuung mit einer konstanten Kopplungskonstanten $-\frac{|V|^2}{2\epsilon_f}$.

$$H_{\text{Pot.-Str.}} = -\frac{|V|^2}{2\epsilon_f} \sum_{k,k',\sigma} c^\dagger_{k\sigma} c_{k'\sigma} \tag{6.9}$$

- Als zweiten Beitrag erhält man den Hamilton-Operator des sd-Modells [Zen51].

$$H_{sf} = -\frac{|V|^2}{\epsilon_f} \sum_{k,k'} \left(S^+ c^\dagger_{k\uparrow} c_{k'\downarrow} + S^- c^\dagger_{k\downarrow} c_{k'\uparrow} + S^z (c^\dagger_{k\uparrow} c_{k'\uparrow} - c^\dagger_{k\downarrow} c_{k'\downarrow}) \right) \tag{6.10}$$

Dieser Ausdruck kann mithilfe der Pauli-Spinmatrizen

$$s^x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s^y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad s^z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{6.11}$$

kompakter geschrieben werden.

$$H_{sf} = -\frac{2\,|V|^2}{\epsilon_f} \sum_{\substack{k,k' \\ \sigma,\sigma'}} \vec{s}_{\sigma\sigma'} \vec{S}\; c^\dagger_{k\sigma} c_{k'\sigma'} \tag{6.12}$$

Nach Einführung der Kopplungskonstanten $J = \frac{2|V|^2}{\epsilon_f}$ ergibt sich für das Anderson-Modell im Schrieffer-Wolff-Limes folgender Wechselwirkungsanteil, der ein Kondo-Modell mit zusätzlicher Potentialstreuung darstellt.

$$H_{\text{SW}} = -\frac{J}{4} \sum_{k,k',\sigma} c^\dagger_{k\sigma} c_{k'\sigma} - J \sum_{\substack{k,k' \\ \sigma,\sigma'}} \vec{s}_{\sigma\sigma'} \vec{S}\; c^\dagger_{k\sigma} c_{k'\sigma'} \tag{6.13}$$

6.2 Berechnung der Streumatrix

In der Standard-Ein-Teilchen-Streutheorie stellt die Streumatrix $T(z)$ einen Zusammenhang zwischen der Green-Funktion des ungestörten Systems $g(z)$ und der Green-Funktion $G(z)$ des mit einer Störung H_V wechselwirkenden Systems dar (Abschnitt 5.1).

$$G = g + gTg \quad \Rightarrow \quad T = H_V + H_V g H_V + H_V g H_V g H_V + \cdots = (1 - H_V g)^{-1} H_V \tag{6.14}$$

Für die Berechnung der Streumatrix in dem hier betrachteten Fall wird zunächst das Matrixelement der Wechselwirkung H_{SW} benötigt.

$$\langle k\sigma|H_{\mathrm{SW}}|k'\sigma'\rangle = \delta_{kk'}\langle\sigma| - \frac{J}{4} - J\vec{s}\vec{S}|\sigma'\rangle \tag{6.15}$$

Durch Einfügen von vollständigen Zwischenzuständen kann der zweite Summand von (6.14) ausgewertet werden. Dabei stellt sich heraus, dass das Ergebnis k-unabhängig ist und nur durch die beiden Spins σ und σ' bestimmt wird.

$$\langle k\sigma|H_{\mathrm{SW}}gH_{\mathrm{SW}}|k'\sigma'\rangle = \delta_{kk'}\langle\sigma|\big(-\frac{J}{4} - J\vec{s}\vec{S}\big)g_0\big(-\frac{J}{4} - J\vec{s}\vec{S}\big)|\sigma'\rangle \tag{6.16}$$

Die weiteren Summanden in (6.14) lassen sich in gleicher Weise bestimmen und man erhält für die Streumatrix mit einem klassischen Störstellen-Spin $\vec{S}$

$$\langle k\sigma|T|k'\sigma'\rangle = \delta_{kk'}\langle\sigma|\big(-\frac{J}{4} - J\vec{s}\vec{S}\big)\big(1 + g_0(\frac{J}{4} + J\vec{s}\vec{S})\big)^{-1}|\sigma'\rangle \tag{6.17}$$

Bei einer quantenmechanischen Behandlung von $\vec{S}$ kann die Streumatrix aufgrund der Nicht-Kommutativität der Spinvektoren nicht in eine geometrische Reihe zusammengefasst werden und eine exakte Lösung des Ein-Störstellen-Problems ist nicht möglich.

Nach einem bekannten Satz aus der Quantenmechanik kann eine Funktion, in der ein Spin $\vec{s}$ nur linear auftritt, als eine lineare Funktion in $\vec{s}$ geschrieben werden [LanLif88].

$$f(a + 2\vec{b}\vec{s}) = \frac{1}{2}\big(f(a+b) + f(a-b)\big) + \frac{\vec{b}\vec{s}}{b}\big(f(a+b) - f(a-b)\big) \tag{6.18}$$

Mit dieser Identität ist es möglich den zweiten Faktor der Streumatrix zu linearisieren. Hierbei gilt

$$f(x) = \frac{1}{x}, \quad a = 1 + \frac{J}{4}g_0, \quad \vec{b} = \frac{J}{2}g_0\vec{S}, \quad b = \frac{J}{4}g_0 \tag{6.19}$$

Ein Anwenden von (6.18) liefert

$$\big(1 - g_0(\frac{J}{4} + J\vec{s}\vec{S})\big)^{-1} = \frac{4 + Jg_0(1 - 4\vec{s}\vec{S})}{4 + 2Jg_0} \tag{6.20}$$

Durch diese Umformung enthält die Streumatrix nur noch Terme bis zur Ordnung $\mathcal{O}\big((\vec{s}\vec{S})^2\big)$.

$$\langle k\sigma|T|k'\sigma'\rangle = \delta_{kk'}\langle\sigma|\frac{-J}{4 + 2Jg_0}\big(1 + \frac{J}{4}g_0 + 4\vec{s}\vec{S} - 4Jg_0(\vec{s}\vec{S})^2\big)|\sigma'\rangle \tag{6.21}$$

6.3 Klassische Mittelung über den Impurity-Spin mit $|\vec{S}| = \frac{1}{2}$

In diesem Abschnitt wird die Streumatrix klassisch über den Impurity-Spin $\vec{S}$ bei festem Spinbetrag $|\vec{S}| = \frac{1}{2}$ in einem äußeren Magnetfeld gemittelt. Eine solche Mittelung trägt zwar den Quanteneigenschaften eines Spin-$\frac{1}{2}$-Systems in keiner Weise Rechnung, sollte aber dennoch einen guten Einblick in das Verhalten der DMFT-Selbstkonsistenzschleife für dieses vereinfachte Modell geben.

Für die klassische Mittelung einer Größe A gilt

$$\overline{A} = \frac{1}{\text{Norm}} \int d\Omega \, e^{-\beta E} A \tag{6.22}$$

mit der Normierungskonstanten

$$\text{Norm} = \int d\Omega \, e^{-\beta E} \tag{6.23}$$

Die Energie eines Spins $\vec{S}$ in einem homogenen Magnetfeld $\vec{B}$, das o. B. d. A. in z-Richtung gelegt werden kann, ist gegeben durch

$$E = -g\mu_B B\vec{S}\vec{e}_z = -2\omega_0\vec{S}\vec{e}_z \tag{6.24}$$

Zur Auswertung der zweidimensionalen Integrale in (6.22) und (6.23) über den vollen Raumwinkel Ω, $0 \leq \theta \leq \pi$ und $0 \leq \phi \leq 2\pi$, führt man Kugelkoordinaten bezüglich $\vec{S}$ ein.

$$S^x = S\sin\theta\cos\phi, \quad S^y = S\sin\theta\sin\phi, \quad S^z = S\cos\theta \tag{6.25}$$

Die Normierungskonstante berechnet sich zu

$$\text{Norm} = \frac{4\pi}{\beta\omega_0}\sinh\beta\omega_0 \tag{6.26}$$

Bei der Mittelung des linearen Anteils in $\vec{s}\vec{S}$ verschwinden die S^x- und S^y-Beiträge aufgrund der Rotationsinvarianz von $\vec{S}$.

$$\overline{S^x} = \overline{S^y} = 0 \quad \text{wegen} \quad \int_0^{2\pi} d\phi \begin{Bmatrix} \cos\phi \\ \sin\phi \end{Bmatrix} = 0 \tag{6.27}$$

Für die S^z-Komponente erhält man

$$\overline{S^z} = \frac{1}{2\,\mathrm{Norm}} \frac{\partial}{\partial(\beta\omega_0)} \mathrm{Norm} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial(\beta\omega_0)} \ln \mathrm{Norm} \tag{6.28}$$

Die Mittelung des quadratischen Terms in (6.21) ergibt wegen $(s^{x,y,z})^2 = \frac{1}{4}$ eine Konstante.

$$\overline{(\vec{s}\vec{S})^2} = (s^x)^2\,\overline{(S^x)^2} + (s^y)^2\,\overline{(S^y)^2} + (s^z)^2\,\overline{(S^z)^2} = \frac{1}{4} S^2 = \frac{1}{16} \tag{6.29}$$

Fasst man alle Summanden zusammen, so folgt für die gemittelte Streumatrix

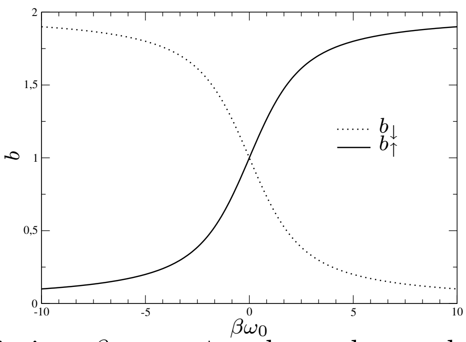
$$\overline{\langle k\sigma|T|k'\sigma'\rangle} = \delta_{kk'} \langle\sigma| \frac{-J}{4+2Jg_0} \big(1 + 2s^z \frac{\partial}{\partial(\beta\omega_0)} \ln \mathrm{Norm}\big) |\sigma'\rangle = \delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'} t_\sigma \tag{6.30}$$

Diese Streumatrix ist spinabhängig, hängt jedoch nicht vom Impuls k des streuenden Elektrons ab, sie ist also lokal.

$$t_{\uparrow,\downarrow}(z) = \frac{-J}{4+2Jg_0(z)} \big(1 \pm \frac{\partial}{\partial(\beta\omega_0)} \ln \mathrm{Norm}\big) = \frac{-J}{4+2Jg_0(z)}\, b_{\uparrow,\downarrow} \tag{6.31}$$

Die Aufspaltung im Magnetfeld wird dabei durch den Parameter $b_{\uparrow,\downarrow}$ beschrieben. Bei verschwindendem Magnetfeld $\omega_0 = 0$ gilt offensichtlich $b_\uparrow = b_\downarrow = 1$ und beide Spinkanäle sind entartet.

$$\begin{aligned} b_{\uparrow,\downarrow} &= 2 - b_{\downarrow,\uparrow} \\ &= 1 \pm \big(\coth\beta\omega_0 - \frac{1}{\beta\omega_0}\big) \in [0,2] \end{aligned} \tag{6.32}$$



Als weitere Spezialfälle kann man die Limites $\beta\omega_0 \to \pm\infty$ betrachten, also ein starkes Magnetfeld $B \to \pm\infty$ oder tiefe Temperaturen $\beta \to \infty$ bei $B \gtrless 0$.

$$\lim_{\beta\omega_0\to\infty} t_{\uparrow,\downarrow}(z) = \begin{cases} \dfrac{-J}{2+Jg_0(z)} & \text{für } \uparrow \\ 0 & \text{für } \downarrow \end{cases} \tag{6.33a}$$

$$\lim_{\beta\omega_0\to-\infty} t_{\uparrow,\downarrow}(z) = \begin{cases} 0 & \text{für } \uparrow \\ \dfrac{-J}{2+Jg_0(z)} & \text{für } \downarrow \end{cases} \tag{6.33b}$$

Für $\overline{T}_{\uparrow,\downarrow}(z) = 0$ ist die Green-Funktion des wechselwirkenden Systems mit der des ungestörten identisch. Dieser Fall lässt sich auch anschaulich interpretieren. In einem starken Magnetfeld sind alle f-Spins ausgerichtet, Leitungselektronen mit entgegengesetztem Spin finden nun kein entsprechendes Streuzentrum mehr, da die Spin-Flip-Anteile $S^{\pm} = S^x \pm iS^y$ im Hamilton-Operator durch die Mittelung herausgefallen sind.

6.4 Analytische Lösung der DMFT-Selbstkonsistenzbedingung

Für spezielle Fälle der ungestörten Green-Funktion $g_0(z)$ ist es möglich die DMFT-Selbstkonsistenzschleife für das Anderson-Modell im klassischen Schrieffer-Wolff-Limes analytisch exakt zu lösen.

$$\mathcal{G}_0^{-1}(z) - g_0^{-1}\left(z - \frac{t(z)}{1 + t(z)\mathcal{G}_0(z)}\right) - \frac{t(z)}{1 + t(z)\mathcal{G}_0(z)} = 0 \tag{6.34a}$$

$$t(z) = \frac{-J}{4 + 2J\mathcal{G}_0(z)}\, b \tag{6.34b}$$

Hierbei wird die Streumatrix, in der zur Behandlung eines Gittermodells mit der DMFT das ungestörte $g_0(z)$ durch das effektive Band $\mathcal{G}_0(z)$ ersetzt wird, ebenfalls voll selbstkonsistent berechnet, dies erweitert die Betrachtungen zum Lösungsverhalten der Selbstkonsistenzbedingung in [Leu98, KeiLeu00]. In diesen Arbeiten wurde eine konstante Modellstreumatrix vorgeben, die während der Iteration der Gleichungen konstant gehalten wurde.

In den folgenden Berechnungen werden wie in [Leu98, KeiLeu00] Potenzen der Lorentz-Dichte als ungestörte Bandzustandsdichten angesetzt.

$$g_0^{(n)}(z) = \sum_{m=0}^{n} (2i)^m \frac{n!(2n-m)!}{(n-m)!(2n)!} \frac{1}{(z+i)^{m+1}} \tag{6.35}$$

Die Lorentz-Dichten konvergieren nach geeigneter Skalierung im Limes $n \to \infty$ gegen die Gauß-Dichte des Tight-Binding-Bandes in $d \to \infty$.

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{2t\sqrt{n}} \rho^{(n)}\left(\frac{z}{2t}\right) = \frac{1}{2t\sqrt{\pi}} e^{-(\frac{z}{2t})^2} = \rho_{\text{Gauß}}(z) \tag{6.36}$$

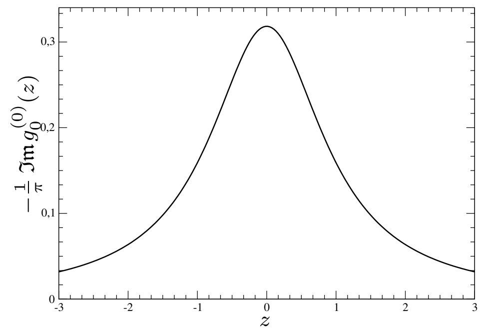
Daher werden in dieser Arbeit bei allen numerischen Berechnungen mit den Potenzen des Lorentz-Bandes die Energiegrößen auf die Zustandsdichte an der Fermi-Kante $\rho(\epsilon_{\text{Fermi}} = 0) = 1\ (\text{eV})^{-1}$ normiert.

Für $g_0^{(n)}(z)$ hat man bei der Lösung von (6.34) die Nullstellen eines Polynoms $(n+1)$-ten Grades in $\mathcal{G}_0(z)$ zu bestimmen, das für $n \leq 3$ noch analytisch möglich ist. Bei einer Gauß-Zustandsdichte im Limes $d \to \infty$ mit der dazugehörigen komplexen Fehler-Funktion als $g_0(z)$ lässt sich dagegen keine geschlossene Lösung der entstehenden transzendenten Gleichung mehr finden.

6.4.1 Lorentz-Band

Für das Lorentz-Band

$$g_0^{(0)}(z) = \frac{1}{z+i} \tag{6.37}$$



ist unabhängig von der Streumatrix $t(z)$ die effektive Green-Funktion mit der ungestörten identisch.

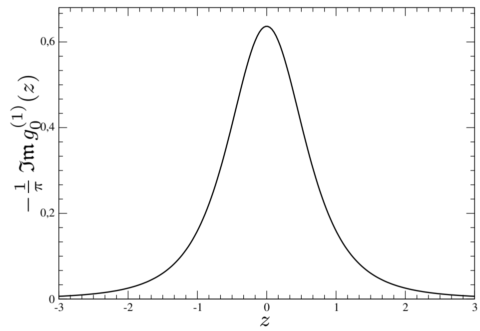
$$\mathcal{G}_0^{(0)}(z) = \frac{1}{z+i} \tag{6.38}$$

Die Leitungselektronen koppeln in diesem Fall gar nicht an die Streumatrix $t(z)$. Eine Untersuchung des Lösungsverhaltens der Selbstkonsistenzbedingung ist daher mit dem Lorentz-Band nicht möglich.

6.4.2 Quadriertes Lorentz-Band

Wie in [Leu98, KeiLeu00] gibt das quadrierte Lorentz-Band auch für den klassischen Schrieffer-Wolff-Limes einen genaueren Einblick in die Eigenschaften der DMFT-Gleichungen.

$$g_0^{(1)}(z) = \frac{z+2i}{(z+i)^2} \tag{6.39}$$



Man erhält hierbei eine quadratische Gleichung für $\mathcal{G}_0^{(1)}(z)$, deren beiden Lösungen elementar bestimmt werden können.

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_0^{(1,\pm)}(z) &= \frac{(1-b)z+(2-b)i}{(2-b)(z+i)^2} \\ &\quad + \frac{2}{(2-b)J}\left(-1 \pm \sqrt{\left(1+\frac{J}{2}\,\frac{z+(2-b)i}{(z+i)^2}\right)^2 - \frac{J^2}{4}\,\frac{b(2-b)}{(z+i)^4}}\right)\end{aligned} \tag{6.40}$$

Die folgenden Überlegungen werden zeigen, dass nur dem positiven Vorzeichen eine physikalisch interpretierbare Lösung entspricht. Die zweite Lösung $\mathcal{G}_0^{(1,-)}(z)$ besitzt zum einen nicht den notwendigen Abfall einer Green-Funktion für große Argumente zum anderen liegt ihr Imaginärteil in der unphysikalischen positiven Halbebene und wegen

$$\tilde{\rho}(z) = -\frac{1}{\pi}\,\mathfrak{Im}\,\mathcal{G}_0(z+i0^+) \tag{6.41}$$

muss stets $\mathfrak{Im}\,\mathcal{G}_0(z) \leq 0$ gelten. Daher wird zunächst das Verhalten von $\mathcal{G}_0^{(1,+)}(z)$ untersucht.

Die nachstehende Abbildung stellt einen Vergleich zwischen der ungestörten Zustandsdichte und der effektiven Zustandsdichte im klassischen Schrieffer-Wolff-Limes für verschiedene Parameter J bei verschwindendem Magnetfeld $b = 1$ dar.

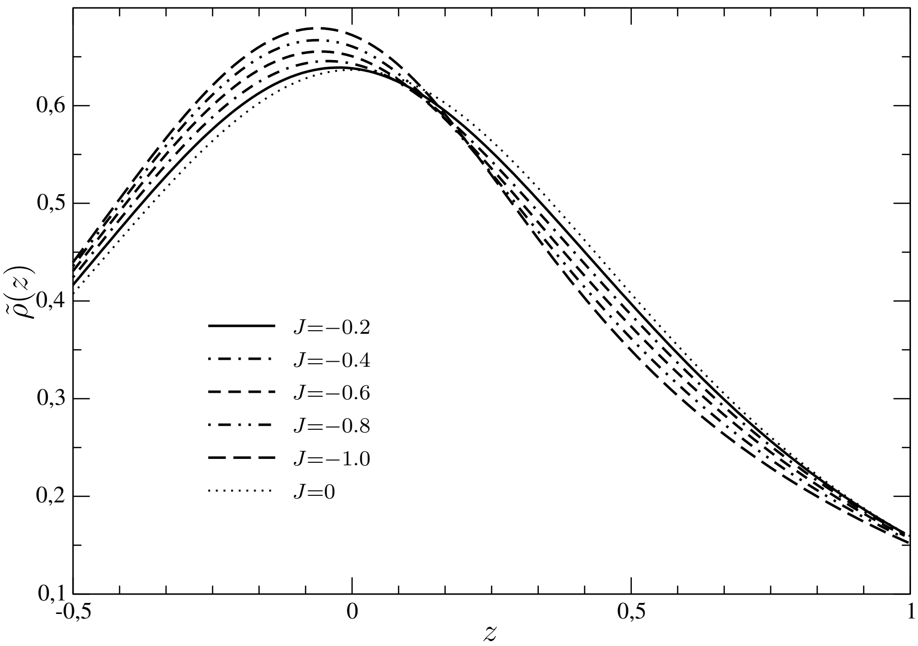


Abbildung 6.1 $-\frac{1}{\pi}\,\mathfrak{Im}\,\mathcal{G}_0^{(1,+)}(z)$ für $b = 1$ und ungestörte Dichte

Unterschiede zum ungestörten quadrierten Lorentz-Band stellt man für betragsmäßig kleine J nur im Bereich der Fermi-Kante fest, das Maximum wächst dabei mit $|J|$. Weiterhin zeigt sich, dass dieses bei $J < 0$ unter die Fermi-Kante wandert.

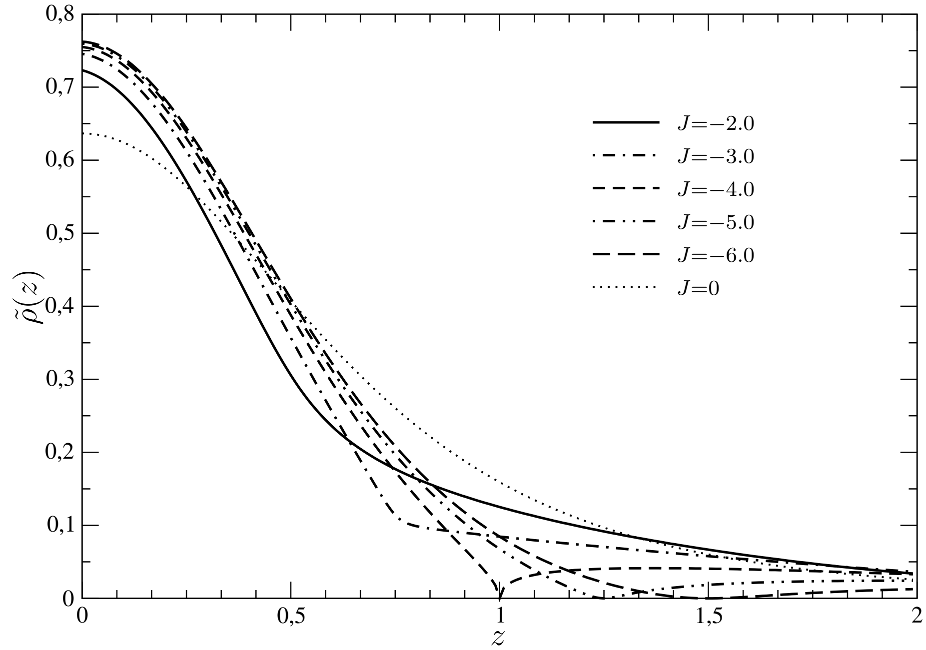


Abbildung 6.2 $-\frac{1}{\pi}\,\mathfrak{Im}\,\mathcal{G}_0^{(1,+)}(z)$ für $b = 1$ und ungestörte Dichte

Für größere $|J|$ verändern sich die Zustandsdichten in der Nähe der Fermi-Energie nur noch unwesentlich. Stattdessen bildet sich ein Minimum oberhalb von $\epsilon_{\mathrm{Fermi}}$ aus, das sich mit größerem $|J|$ verbreitert und sich zu einer höheren Energie verschiebt.
Auf die Nicht-Analytizität bei $z = 1$ für $J = 4$ wird in einem späteren Abschnitt nochmals im Detail eingegangen.

Zuvor sollen jedoch die Eigenschaften der unphysikalischen Lösung $\mathcal{G}_0^{(1,-)}(z)$ kurz untersucht werden. Auf der folgenden Abbildung erkennt man, dass der Imaginärteil der Funktion in der unphysikalischen Halbebene liegt. Weiterhin zeigt sich, dass das Maximum für größere $|J|$ immer schmaler wird, bis sich bei $J = -4$ eine Nicht-Analytizität ausbildet. Bei einem weiteren Anwachsen von $|J|$ prägt es sich dann wieder weniger stark aus und verschwindet schließlich ganz.

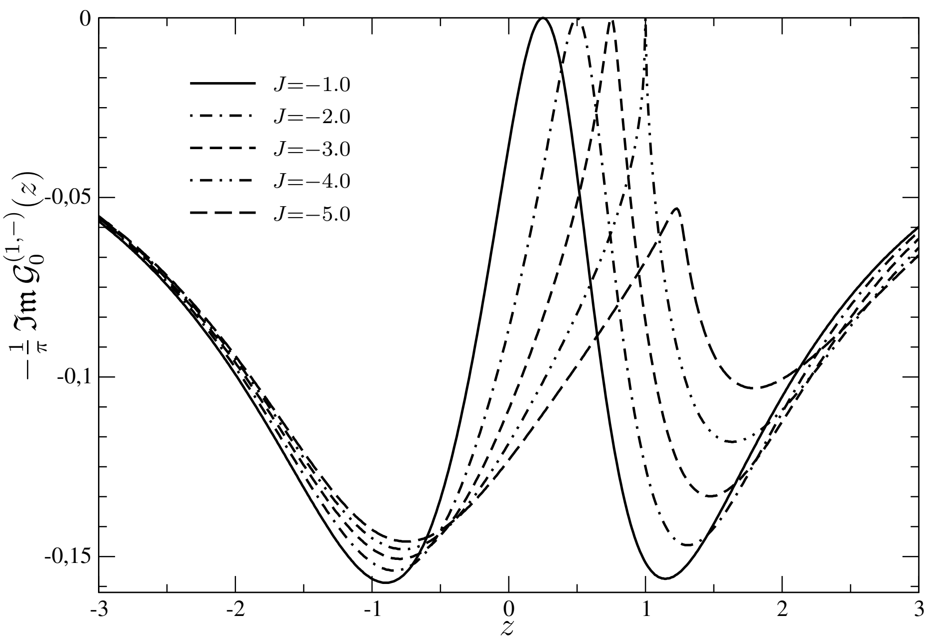


Abbildung 6.3 Nicht-physikalische Lösung $-\frac{1}{\pi}\,\mathfrak{Im}\,\mathcal{G}_0^{(1,-)}(z)$ für $b=1$

Das Verhalten der beiden Lösungszweige lässt sich auch analytisch verstehen. Dazu entwickelt man in (6.40) die Wurzel $\sqrt{1+x} \approx 1 + \frac{x}{2} - \frac{x^2}{8} + \cdots$ nach der Kopplungsstärke J.

$$\mathcal{G}_0^{(1,+)}(z) = \frac{z+2i}{(z+i)^2} - \frac{J}{4}\,\frac{b}{(z+i)^4} + \frac{J^2}{8}\,\frac{b(z+(2-b)i)}{(z+i)^6} + \mathcal{O}(J^3) \tag{6.42}$$

Diese Lösung $\mathcal{G}_0^{(1,+)}(z)$ beschreibt eine Korrektur zum quadrierten Lorentz-Band, so wie es auch erwartet wird. Im Grenzfall verschwindender Hybridisierung $J=0$ geht diese Lösung in die ungestörte Green-Funktion $g_0^{(1)}(z)$ über.

Die zweite Lösung $\mathcal{G}_0^{(1,-)}(z)$ lässt sich nicht physikalisch interpretieren, da sie für betragsmäßig große Argumente $|z| \to \infty$ nicht verschwindet, sondern gegen eine reelle Konstante $\frac{-4}{(2-b)J}$ konvergiert.

$$\mathcal{G}_0^{(1,-)}(z) = \frac{-4}{(2-b)J} - \frac{b}{2-b}\,\frac{z}{(z+i)^2} + \frac{J}{4}\,\frac{b}{(z+i)^4} - \frac{J^2}{8}\,\frac{b(z+(2-b)i)}{(z+i)^6} + \mathcal{O}(J^3) \tag{6.43}$$

Bei einer genaueren Untersuchung von (6.40) stellt man fest, dass ein Verzweigungspunkt erster Ordnung an den vier Nullstellen des Wurzelarguments entsteht.

$$z_0 = -\frac{1}{4}\Big(J + 4i \pm \sqrt{J^2 + 8J\big(\pm\sqrt{b(2-b)} + (b-1)i\big)}\,\Big) \tag{6.44}$$

Tritt dieser Verzweigungspunkt in die obere komplexe Halbebene ein, so lässt sich keine eindeutige analytische Funktion mehr für das gesuchte $\mathcal{G}_0^{(1)}(z)$ angeben.
Es lässt sich leicht zeigen, dass wegen $0 \leq b \leq 2$ in (6.44) stets gilt $\mathfrak{Im}\, z_0 \leq 0$, wobei die Gleichheit nur für $J = \pm \frac{4}{\sqrt{b(2-b)}}$ eintritt. Aufgrund dieser Eigenschaft ist kein Lösungszusammenbruch bei der Iteration der Selbstkonsistenzbedingung wegen einer Mehrdeutigkeit im effektiven Band für den klassischen Schrieffer-Wolff-Limes des Anderson-Modells zu erwarten.

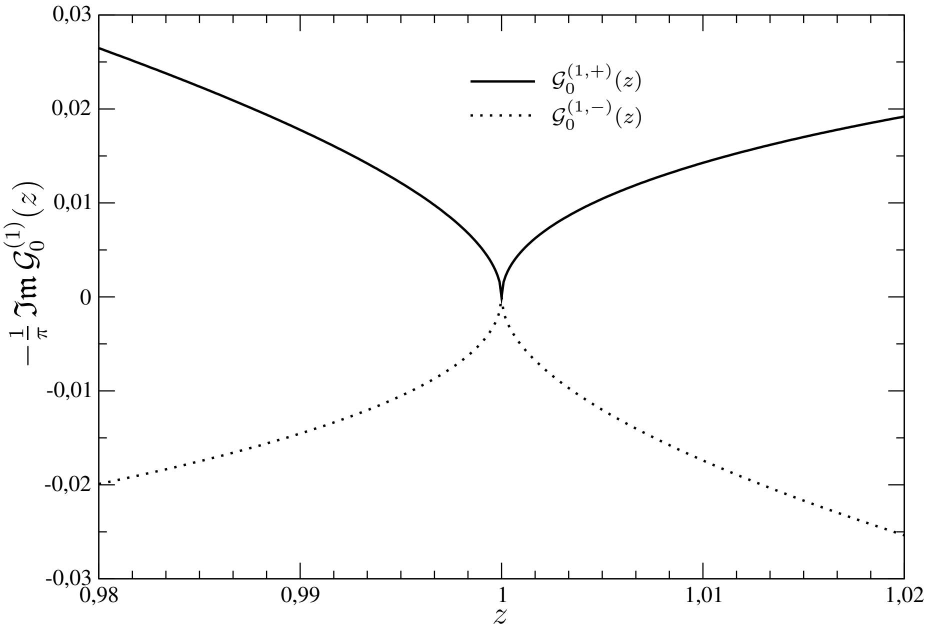


Abbildung 6.4 Verzweigungsschnitt für $J = -4$ und $b = 1$

Die obige Abbildung zeigt den Verzweigungsschnitt bei $z = 1$ für $J = -4$ und $b = 1$. Man erkennt, dass im Gegensatz zu [Leu98, KeiLeu00] die Nicht-Analytizität aufgrund ihrer Lage in der negativen Halbebene und des nicht-positiven Imaginärteils z im Argument zu keiner Mehrdeutigkeit in der effektiven Dichte führt. Eine mögliche Divergenz der Selbstkonsistenzschleife in diesem Modell kann daher nicht auf diese Weise begründet werden.

Die folgende Abbildung stellt die Zustandsdichten bei unterschiedlichen Parametern b, d. h. bei verschiedenem Magnetfeld bzw. Temperatur, dar.

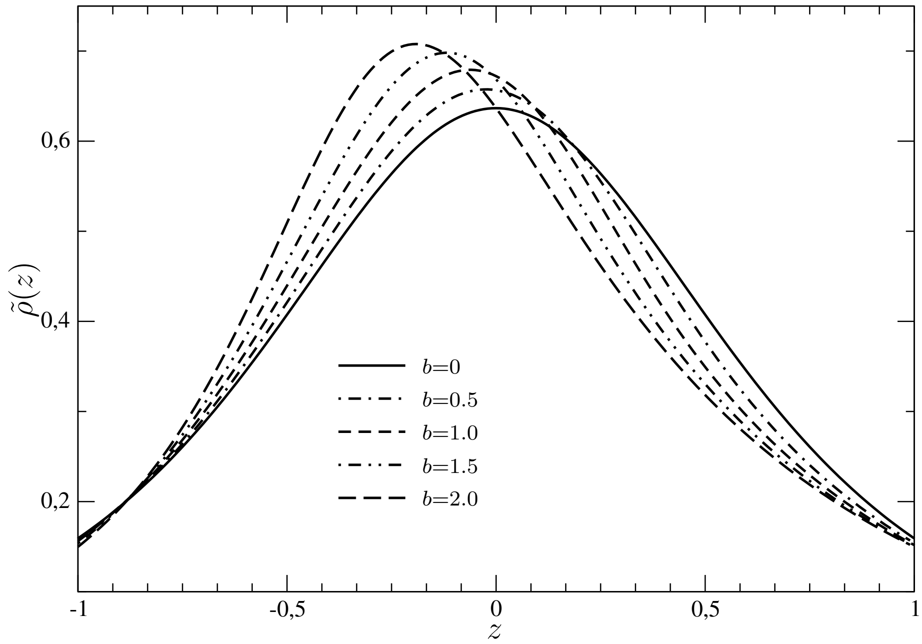


Abbildung 6.5 $-\frac{1}{\pi}\,\mathfrak{Im}\,\mathcal{G}_0^{(1,+)}(z)$ für $J = 1$

Als interessante Spezialfälle lassen dabei sich die Limites $b \to 2$ und $b \to 0$ (6.33) betrachten.

- Im Falle $b \to 2$ ergibt sich für $\mathcal{G}_0^{(1)}$ keine quadratische, sondern eine lineare Gleichung, die durch folgenden Ausdruck gelöst wird.

$$\mathcal{G}_0^{(1)} = \frac{2(z+2i)+J}{2(z+i)^2+Jz} = \frac{z+2i}{(z+i)^2} + \sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n\Big(\frac{J}{2}\Big)^n\frac{z^{n-1}}{(z+i)^{n+1}} \quad (6.45)$$

  An der Reihenentwicklung sieht man, dass auch diese Lösung eine Korrektur zum ungestörten quadrierten Lorentz-Band darstellt.

- Für eine verschwindende Streumatrix $b \to 0$ erhält man wiederum zwei Lösungen, wobei eine das erwartete Ergebnis der ungestörten Green-Funktion beschreibt.

$$\mathcal{G}_0^{(1,+)}(z) = \frac{z+2i}{(z+i)^2} = g_0^{(1)}(z) \quad (6.46)$$

6.4.3 Höhere Potenzen des Lorentz-Bandes

In diesem Abschnitt werden exakte Lösungen der DMFT-Gleichungen (6.34) für die beiden nächsthöheren Potenzen des Lorentz-Bandes präsentiert.

$$g_0^{(2)}(z) = \frac{3z^2-8+9iz}{3(z+i)^3} \qquad g_0^{(3)}(z) = \frac{5z^3-29z+4i(5z^2-4)}{5(z+i)^4} \quad (6.47)$$

Es ergibt sich eine ganzrationale Gleichung 3. bzw. 4. Grades, die mithilfe des Computeralgebra-Programms MATHEMATICA [WOL97] analytisch gelöst werden kann. Anstelle einer expliziten Darstellung der sehr unübersichtlichen Ausdrücke für die 3 bzw. 4 Lösungsäste werden nur die ersten Summanden der Taylor-Entwicklungen für kleine J angegeben. Diese geben bereits einen guten Einblick in das Verhalten der verschiedenen Lösungen.

Für die dritte Potenz des Lorentz-Bandes erhält man

$$\mathcal{G}_0^{(2,1)}(z) = \frac{3z^2 - 8 + 9iz}{3(z+i)^3} + \mathcal{O}(J^1) \tag{6.48a}$$

$$\mathcal{G}_0^{(2,2)}(z) = \frac{-4}{(2-b)J} - \frac{b}{2-b}\,\frac{6z^2 - 1 + 9iz + \sqrt{15z^2 + 1 + 18iz}}{6(z+i)^3} + \mathcal{O}(J^1) \tag{6.48b}$$

$$\mathcal{G}_0^{(2,3)}(z) = \frac{-4}{(2-b)J} - \frac{b}{2-b}\,\frac{6z^2 - 1 + 9iz - \sqrt{15z^2 + 1 + 18iz}}{6(z+i)^3} + \mathcal{O}(J^1) \tag{6.48c}$$

An diesen Potenzreihenentwicklungen sieht man, dass $\mathcal{G}_0^{(2,1)}(z)$ eine Korrektur zum ungestörten Band beschreibt und eine physikalische Lösung darstellt. $\mathcal{G}_0^{(2,2)}(z)$ und $\mathcal{G}_0^{(2,3)}(z)$ besitzen wie $\mathcal{G}_0^{(1,-)}(z)$ in Abschnitt 6.4.2 nicht die notwendigen Eigenschaften einer Green-Funktion und lassen sich daher nicht physikalisch interpretieren. Eine Überschneidung dieser Lösungen mit $G_1^{(2,1)}(z)$ kann für keine Parameter J und b festgestellt werden, da stets gilt $\mathfrak{Im}\,\mathcal{G}_0^{(2,2)}(z) > 0$ und $\mathfrak{Im}\,\mathcal{G}_0^{(2,3)}(z) > 0$. Die folgende Abbildung zeigt den Verlauf der drei Zustandsdichten für $J = -1$ und $b = 1$, wie sie sich aus der exakten Lösung der DMFT-Gleichung ergeben. Auf eine Darstellung für andere Parameter J und b wird an dieser Stelle verzichtet, da sich qualitativ dieselben Phänomene wie für das quadrierte Lorentz-Band, z. B. das Öffnen eines Gaps, ergeben.

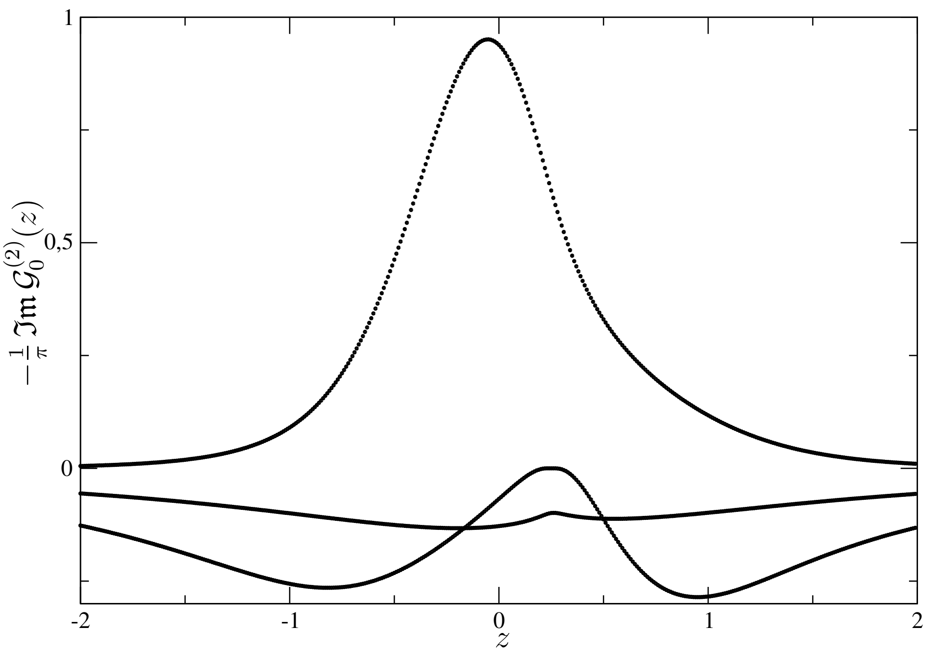


Abbildung 6.6 $-\frac{1}{\pi}\,\mathfrak{Im}\,\mathcal{G}_0^{(2)}(z)$ für $J = -1$ und $b = 1$

Das Verhalten für die vierte Potenz des Lorentz-Bandes ist analog. Anhand der Taylor-Entwicklungen lässt sich ablesen, dass auch hier nur eine physikalische Lösung $\mathcal{G}_0^{(3,1)}(z)$ existiert, da wiederum gilt $\mathfrak{Im}\,\mathcal{G}_0^{(3,2/3/4)}(z) > 0$.

$$\mathcal{G}_0^{(3,1)}(z) = \frac{5z^3 - 29z + 4i(5z^2 - 4)}{5(z+i)^4} + \mathcal{O}(J^1) \tag{6.49a}$$

$$\mathcal{G}_0^{(3,2)}(z) = \frac{-4}{(2-b)J} + \mathcal{O}(J^0) \tag{6.49b}$$

$$\mathcal{G}_0^{(3,3)}(z) = \frac{-4}{(2-b)J} + \mathcal{O}(J^0) \tag{6.49c}$$

$$\mathcal{G}_0^{(3,4)}(z) = \frac{-4}{(2-b)J} + \mathcal{O}(J^0) \tag{6.49d}$$

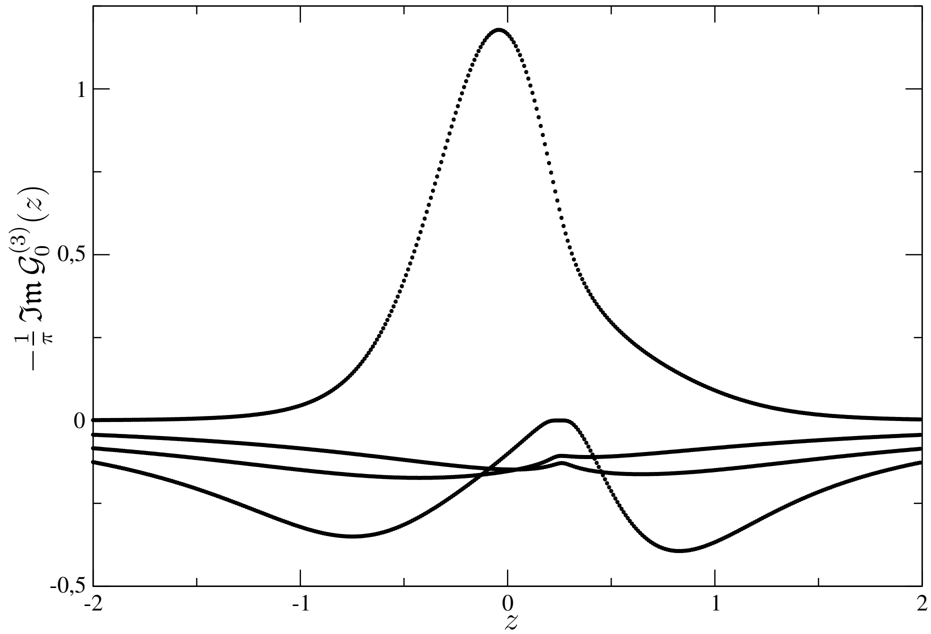


Abbildung 6.7 $-\frac{1}{\pi}\,\mathfrak{Im}\,\mathcal{G}_0^{(3)}(z)$ für $J=-1$ und $b=1$

6.5 Numerische Lösung der DMFT-Selbstkonsistenzbedingung

Im Gegensatz zu den niedrigen Potenzen des Lorentz-Bandes kann die Selbstkonsistenzbedingung (6.34) für eine Gauß-artige Zustandsdichte des unendlichdimensionalen Tight-Binding-Bandes nicht analytisch gelöst werden, da transzendente Gleichungen entstehen, die eine numerische Behandlung erfordern. Alle Berechnungen werden in diesem Abschnitt bei verschwindendem Magnetfeld $b=1$ durchgeführt. Für $b\neq 1$ ergibt sich eine analoge Aufspaltung zu Abbildung 6.5.
Wie schon bei der exakten Lösung mit den Potenzen des Lorentz-Bandes können für kleine Parameter J Unterschiede zur ungestörten Gauß-Dichte nur im Bereich der Fermi-Kante ausgemacht werden. Dabei zeigt sich, dass das Maximum der Zustandsdichte bei betragsmäßig größerem J anwächst und zunächst in Richtung der Fermi-Kante wandert.

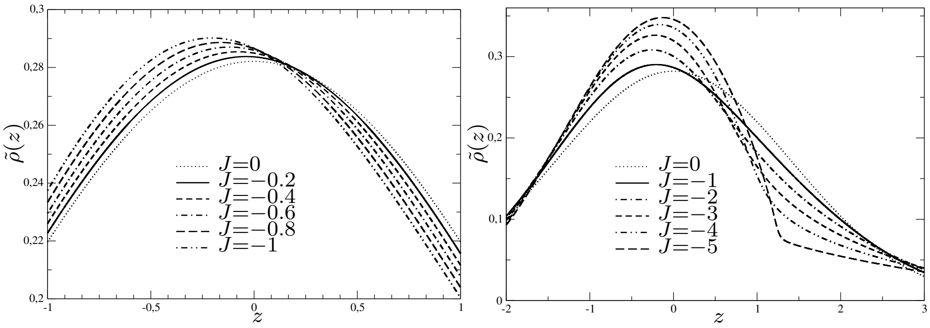


Abbildung 6.8 $-\frac{1}{\pi}\,\mathfrak{Im}\,\mathcal{G}_0(z)$ für $b = 1$ und ungestörte Zustandsdichte

Bei einer weiteren Vergrößerung von $|J|$ wandert das Maximum wieder zu größerem z. Außerdem bildet sich wie in der folgenden Abbildung dargestellt ein Minimum aus, bis sich schließlich sogar eine Lücke im Spektrum öffnet.

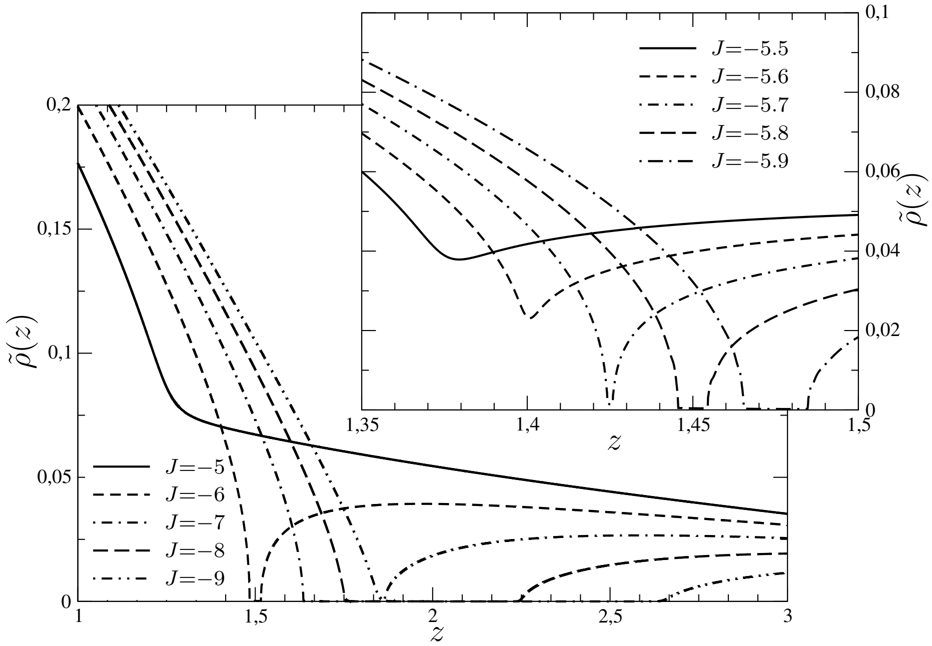


Abbildung 6.9 Ausbilden eines Gaps in $-\frac{1}{\pi}\,\mathfrak{Im}\,\mathcal{G}_0(z)$ für $b = 1$

Bei diesen Berechnungen wird durch Superposition des n-ten und $(n-1)$-ten Iterationsschrittes während der Lösung von (6.34) gewährleistet, dass die Green-Funktion $g_0(z)$ stets in der positiven Halbebene ausgewertet wird.

$$\mathfrak{Im}\left(t^{-1}(z) - \mathcal{G}_0(z)\right) \geq 0 \tag{6.50}$$

Bei der Untersuchung des Konvergenzverhaltens der Selbstkonsistenzgleichung stellt man fest, dass die Anzahl der benötigten Iterationen zunächst mit $|J|$ anwächst. Kommt man jedoch in den Bereich, in dem sich ein Gap in der Zustandsdichte ausbildet, so zeigt Abbildung 6.10 deutliche Maxima an den Rändern der Lücke.

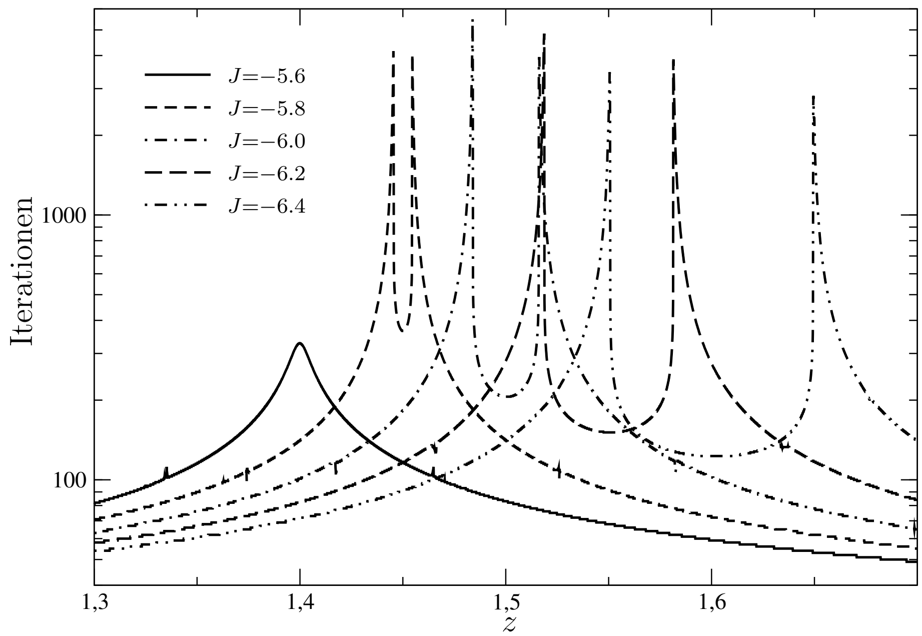


Abbildung 6.10 Anzahl der Iterationen zur Lösung von (6.34)

Bei weiterer Vergrößerung von $|J|$ reduziert sich die Zahl der Schritte zur Konvergenz wieder, wobei die beiden Maxima weiter bestehen bleiben.

Bereiche, in denen (6.34) bei einer ungestörten Gauß-Dichte nicht konvergiert, konnten weder durch Variation von J noch durch Einschalten eines Magnetfeldes $0 < b < 2$ gefunden werden.

Kapitel 7

Numerische Untersuchung der Selbstkonsistenzgleichungen

In Abschnitt 5.3 konnte gezeigt werden, dass die CPA einen Spezialfall der DMFT darstellt, bei dem die Streumatrix im Gegensatz zur XNCA exakt berechnet und in die Selbstkonsistenzschleife einbezogen werden kann. Daher wird in diesem Kapitel zunächst das Konvergenzverhalten der CPA betrachtet, aus dem sich Rückschlüsse auf die Eigenschaften der DMFT-Gleichung für das periodische Anderson-Modell ziehen lassen. Weiterhin stellt sich durch analytische Überlegungen an einfachen Leitungsbändern heraus, dass die Formulierung der CPA über ein effektives Band (5.34, 5.35) deutlich besser konvergiert als die Selbstkonsistenzbedingung für die Selbstenergie (5.25).
In der ursprünglichen XNCA, wie sie z. B. in [Leu98] verwendet wurde, bleibt die Streumatrix während der iterativen Lösung der DMFT-Gleichung konstant. In der CPA ist es nun möglich die Streumatrix in jedem Iterationsschritt neu zu berechnen und somit voll in das Iterationsverfahren einzubeziehen.
Im zweiten Teil dieses Kapitels werden die aus der Analyse der CPA gewonnenen Erkenntnisse auf die XNCA angewendet und untersucht, ob sich der in [Leu98, KeiLeu00] gefundene Analytizitätsschnitt im effektiven Band bestätigt oder er wie in [PruMetVol01] vermutet nur ein Artefakt der benutzten Näherungen darstellt.
Die Selbstkonsistenzgleichung für den Propagator des SAWs lässt sich mithilfe der Lace-Entwicklung sukzessive erweitern. Im letzten Abschnitt werden kurz die Ergebnisse der daraus berechneten d^{-1}-Korrektur von [Leu98] zusammengefasst und auf die CPA sowie XNCA angewendet.

7.1 Numerische Ergebnisse der CPA

Wie für den klassischen Schrieffer-Wolff-Limes des Anderson-Modells, der im vorherigen Kapitel ausführlich behandelt wurde, kann auch die Selbstkonsistenzgleichung der CPA

$$\Sigma = \overline{\frac{V}{1 - \overline{G_0}^{\text{conf}}(V - \Sigma)}}^{\text{conf}} \tag{7.1}$$

für einige Leitungsband-Modelldichten exakt gelöst werden.

7.1.1 Lorentz-Band

Analog zu Abschnitt 6.4.1 wird zunächst eine Lorentz-förmige Zustandsdichte der Bandelektronen angesetzt.

$$g_0^{(0)}(z) = \frac{1}{z+i} \tag{7.2}$$

Wie in 6.4.1 gezeigt koppelt für das Lorentz-Band die Streumatrix nicht an das effektive Band, weshalb dieses identisch mit der freien Lösung ist und offensichtlich keine Konvergenzprobleme der DMFT in diesem Fall auftreten können.

Für die Störpotentiale V_i im Hamilton-Operator (5.2) wird eine symmetrische Verteilung angesetzt, d. h. die Potentialstärken V und $-V$ treten jeweils in einer Konzentration von $c_{\text{imp}} = \frac{1}{2}$ auf.
Nach Einsetzen in (7.1) vereinfacht sich die Selbstkonsistenzbedingung zu

$$\Sigma(z) = V^2 \frac{z + i - \Sigma}{(z + i - V)(z + i + V)} = S^{(0)}(\Sigma) \tag{7.3}$$

Die eindeutige Lösung dieser Gleichung lässt sich elementar bestimmen.

$$\Sigma(z) = \frac{V^2}{z+i} = V^2 g_0^{(0)}(z) \tag{7.4}$$

Bei der numerischen Behandlung einer Fixpunktgleichung $x = \varphi(x)$, wie sie (7.1) bzw. (7.3) darstellt, benutzt man im einfachsten Fall das gewöhnliche Iterationsverfahren $x_{n+1} = \varphi(x_n)$ mit vorgegebenen x_0, bei dem der in der n-ten Iteration erhaltene Funktionswert x_n in der $(n+1)$-ten Iteration als Argument der Funktion φ eingesetzt wird.

Die folgende Abbildung zeigt die numerische Lösung der CPA- (7.3) und der DMFT-Gleichung (5.30) mit diesem Verfahren, wobei feststellt werden kann, dass die CPA in einigen Bereichen nicht konvergiert.

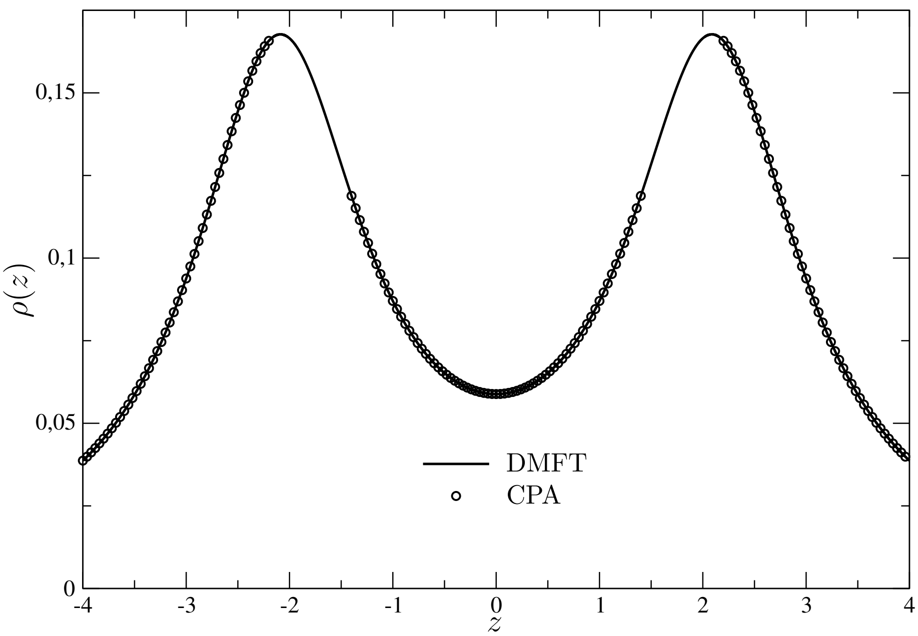


Abbildung 7.1 Lösungszusammenbruch der CPA für $V = 2.1$

Dies ist nicht auf eine zu geringe Anzahl an Iterationsschritten zurückzuführen, sondern liegt im Verfahren selber begründet. Hinreichende Bedingung für die Konvergenz des gewöhnlichen Iterationsverfahrens ist die Kontraktionseigenschaft von φ, daher muss in einer Umgebung des Fixpunktes $\left|\frac{\partial\varphi(x)}{\partial x}\right| < 1$ gelten.
Im Gegensatz zur XNCA für das Anderson-Modell und der Bestimmung der Streumatrix mit der NCA erlaubt (7.3) eine analytische Überprüfung dieser Bedingung.

$$\frac{\partial S^{(0)}}{\partial \Sigma} = \frac{-V^2}{(z+i-V)(z+i+V)} \tag{7.5}$$

Man erkennt, dass der Betrag der Ableitung unabhängig von Σ ist.

$$\left|\frac{\partial S^{(0)}}{\partial \Sigma}\right|^2 = \frac{V^4}{(z^2+1)^2 - 2V^2(z^2-1) + V^4} \tag{7.6}$$

Ein Vergleich zwischen dem Betrag der Ableitung und den benötigten Iterationsschritten bis zur Konvergenz ist in der nächsten Abbildung dargestellt.

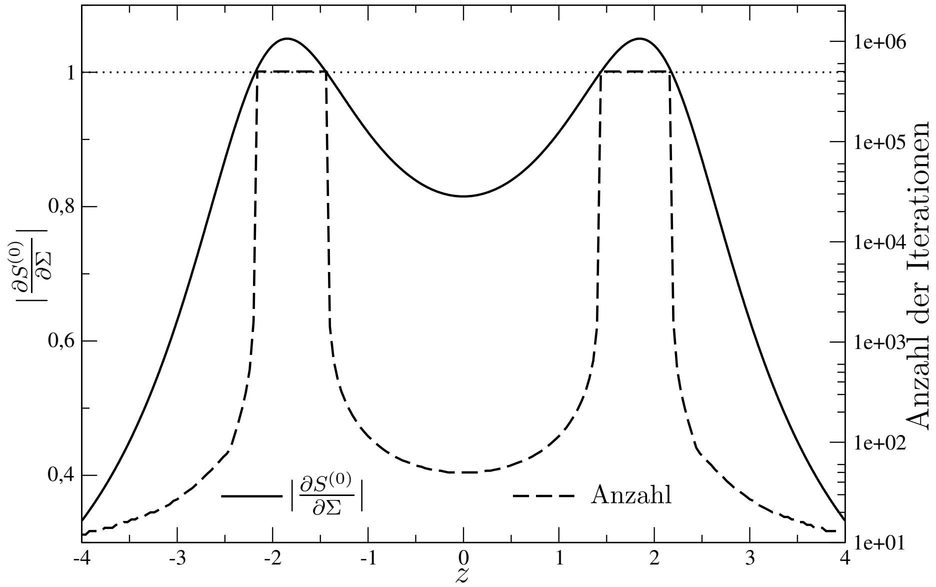


Abbildung 7.2 $|\frac{\partial S^{(0)}}{\partial \Sigma}|$ und Anzahl der Iterationen für $V = 2.1$

Hierbei wird deutlich, dass die Konvergenz genau an denjenigen Stellen zusammenbricht, an denen die Kontraktionseigenschaft nicht mehr erfüllt ist. Diese Argumente z, für die

$$|\frac{\partial S^{(0)}}{\partial \Sigma}| = 1 \tag{7.7}$$

gilt, lassen sich auch exakt bestimmen.

$$z = \pm\sqrt{V^2 - 1 \pm V\sqrt{V^2 - 4}} \tag{7.8}$$

Für $V < 2$ ist die hinreichende Bedingung für die Konvergenz der CPA immer erfüllt, da in diesem Fall (7.7) nur echt komplexe Lösungen besitzt. Im Parameterbereich $0 \leq V < 2$ sollte daher das gewöhnliches Iterationsverfahren für (7.3) stets konvergieren, dies entspricht auch der numerischen Beobachtung. Im Falle $V = 2.1$, der in Abbildung 7.1 dargestellt ist, ist in den Intervallen $[-2.181, -1.437]$ und $[1.437, 2.181]$ die Funktion $S^{(0)}(\Sigma)$ keine kontrahierende Abbildung mehr und die Iteration divergiert. Die numerischen Resultate in Abbildung 7.2 geben dieses Ergebnis sehr präzise wieder.

7.1.2 Quadriertes Lorentz-Band

Für das quadrierte Lorentz-Band (Abschnitt 6.4.2)

$$g_0^{(1)}(z) = \frac{z + 2i}{(z + i)^2} \tag{7.9}$$

lassen sich ebenfalls einige analytische Betrachtungen zum Konvergenzverhalten der CPA-Selbstkonsistenzbedingung anstellen. Mit der Annahme, dass auf 50% aller Elektronen ein zusätzliches Potential V wirkt, ergibt sich folgende Gleichung für die Selbstenergie.

$$\Sigma(z) = \frac{V}{2}\frac{(z+i-\Sigma)^2}{(z-V)(z+2i-\Sigma)-1} = S^{(1)}(\Sigma) \tag{7.10}$$

Diese quadratische Gleichung für $\Sigma(z)$ ist exakt lösbar.

$$\Sigma(z) = \frac{iV}{V-2z} + \frac{(z+i)^2}{V-2z}\Big(-1 \pm \sqrt{(1-\frac{V}{z+i})^2 - \frac{V^2}{(z+i)^4}}\Big) \tag{7.11}$$

Zur Überprüfung der Kontraktionseigenschaft von (7.10) wird die Ableitung gebildet.

$$\frac{\partial S^{(1)}}{\partial\Sigma} = -\frac{V}{2}\frac{(z+2i-\Sigma)((z-V)(z+2i-\Sigma)-1)-(V-\Sigma)}{((z-V)(z+2i-\Sigma)-1)^2} \tag{7.12}$$

Setzt man nun die exakte Lösung für $\Sigma(z)$ in diese Gleichung ein, so findet man, dass im Intervall $[0.624, 1.512]$ die Funktion $S^{(1)}(z)$ keine kontrahierende Abbildung mehr darstellt. Dieses Ergebnis liegt in voller Übereinstimmung mit den numerischen Resultaten in Abbildung 7.3, deren Inset $|\frac{\partial S^{(0)}}{\partial\Sigma}|$ zeigt.

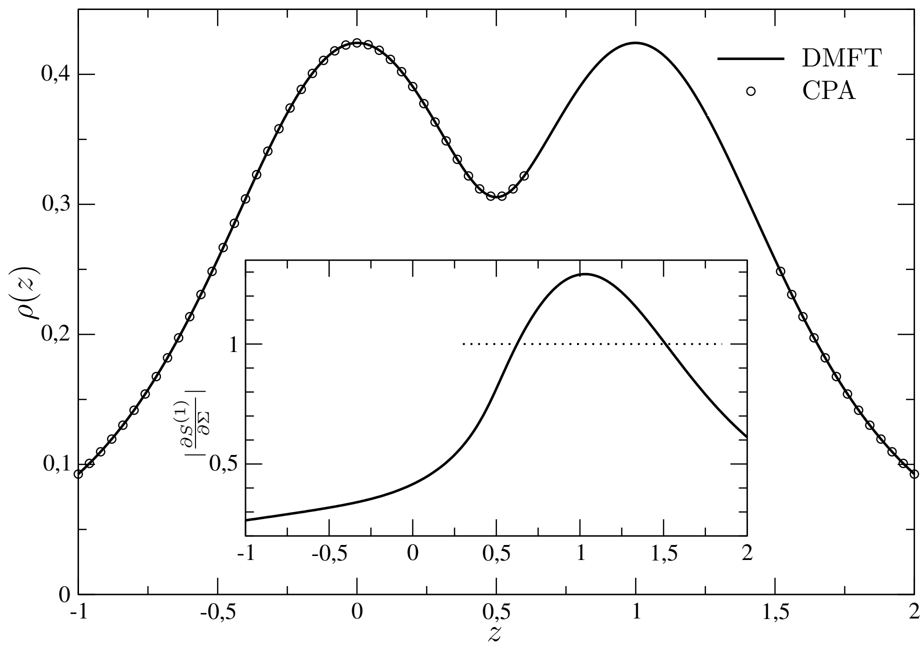


Abbildung 7.3 Lösungszusammenbruch der CPA für $V = 1.0$

Die durchgezogene Linie in obigem Graphen ergibt sich wiederum aus einer numerischen Lösung der DMFT-Gleichung (5.30).
Für das quadrierte Lorentz-Band werden ebenfalls die Unterschiede zwischen den beiden Schreibweisen (5.28) bzw. (5.30) der Selbstkonsistenzbedingung für die DMFT deutlich. Die in [Leu98] benutzte Gleichung (5.28) besitzt dieselbe Ableitung und somit dasselbe schlechte Konvergenzverhalten wie die CPA-Gleichung (7.10). In der Numerik divergiert daher auch (5.28) im Intervall $[0.624, 1.512]$, während die in dieser Arbeit benutzte Formulierung der DMFT bereits nach wenigen Iterationsschritten konvergiert, da für sie die Kontraktionseigenschaft über dem gesamten Parameterbereich erfüllt ist.

7.1.3 Iteration der Streumatrix in der SCC

In der XNCA, wie sie in [Leu98] implementiert wurde, wird die DMFT-Gleichung bei konstanter, vorher mit der NCA berechneter Streumatrix bis zur Konvergenz iteriert und aus dem so gewonnenen effektiven Band die neue Streumatrix bestimmt.
Im Gegensatz dazu ist es auch möglich die Streumatrix bei jedem Iterationsschritt der DMFT neu zu berechnen. Bei diesem Verfahren wird die Streumatrix voll in die Iteration einbezogen, während es sich in [Leu98] doch eher um zwei separate Selbstkonsistenzschleifen handelt.

Die Unterschiede in der numerischen Behandlung zwischen beiden Methoden lassen sich für den Fall eines ungeordneten Systems herausstellen. Hierbei wird ein Gauß-förmiges ungestörtes Leitungsband und eine symmetrische Verteilung des Störpotentials angenommen.
Die folgende Abbildung zeigt die Zustandsdichte des wechselwirkenden Systems, wobei die Streumatrix

$$t = \overline{\frac{V}{1 - \mathcal{G}_0 V}}^{\text{conf}} \tag{7.13}$$

zum einen während der DMFT-Iteration konstant gehalten und zum anderen nach jedem Iterationsschritt neu berechnet wird.

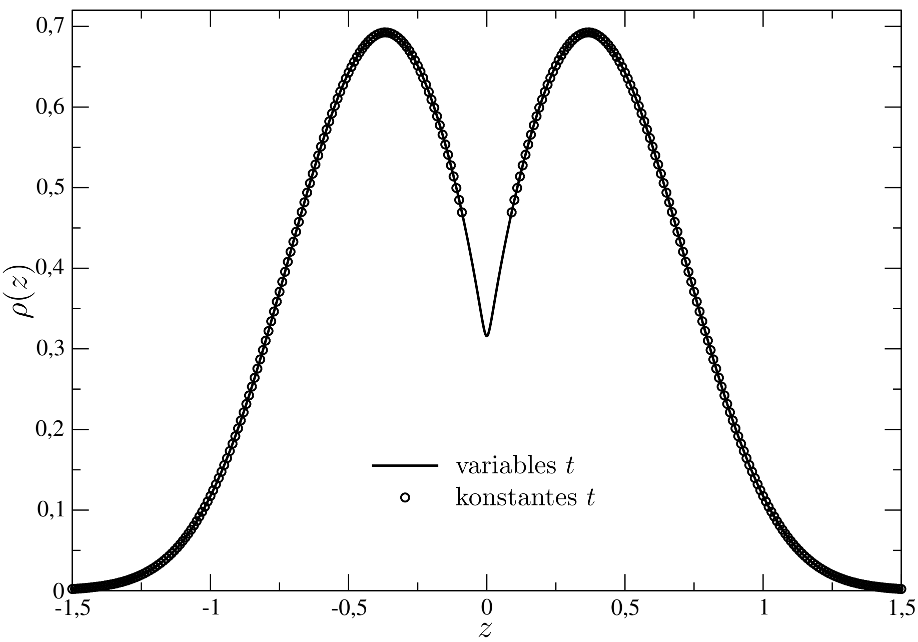


Abbildung 7.4 Lösungszusammenbruch der DMFT bei konstanter Streumatrix für $V = 0.35$

Für den Fall einer konstant gehaltenen Streumatrix tritt ein Bereich auf, in dem die Selbstkonsistenzgleichung divergiert, während in dem anderen Verfahren nach wenigen Iterationsschritten eine Konvergenz erreicht ist.

7.2 Numerische Ergebnisse der XNCA

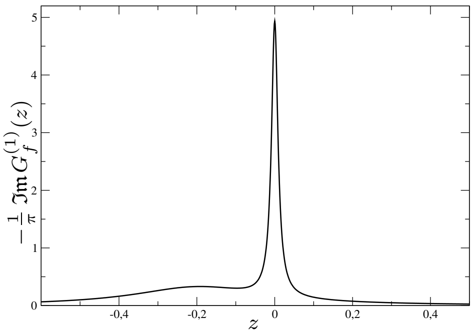
Aus der detaillierten Analyse der Selbstkonsistenzbedingung der CPA und deren Vergleich mit der DMFT-Gleichung können wichtige Erkenntnisse für die numerische Behandlung der XNCA gewonnen werden. Dabei wurden zum einen die Vorteile der in dieser Arbeit benutzten Form der DMFT-Selbstkonsistenzbedingung (5.30) deutlich. Zum anderen zeigte sich, dass die Streumatrix nach jedem Iterationsschritt des effektiven Bandes neu berechnet und somit voll in die Iteration einbezogen werden muss.
Bevor im letzten Abschnitt dieses Kapitels auf die XNCA eingegangen wird, wird die lokale Streumatrix, d. h. die f-Green-Funktion des effektiven Ein-Störstellen-Modells, mithilfe von Lorentz-Dichten modelliert um den in [Leu98, KeiLeu00] gefundenen Analytizitätsschnitt des effektiven Bandes eingehend zu untersuchen und auszuschließen, dass sich dieser als ein Artefakt der verwendeten Approximationen ergeben hat. Im Gegensatz zu [Leu98, KeiLeu00] werden in dieser Arbeit die modellierten Streumatrizen nicht nur in die exakte Lösung der DMFT-Gleichung für das quadrierte

Lorentz-Band eingesetzt, sondern diese für die Gauß-förmige Zustandsdichte in unendlichen Raumdimensionen mit $t = 0.282$ eV wie in der XNCA iterativ gelöst. Weiterhin werden $\epsilon_f = -0.2$ eV und $|V|^2 = 0.011$ (eV)^2 gesetzt.

7.2.1 Modellstreumatrix I

Zunächst wird eine typische f-Green-Funktion in der NCA, wie sie in Abbildung 2.3 dargestellt ist, durch zwei Lorentz-Kurven approximiert.

$$\begin{aligned} t^{(1)}(z) &= |V|^2\, G_f^{(1)}(z) \\ &= |V|^2 \Big(\frac{a_f b_f}{z - \epsilon_f + ib_f} + \frac{ab}{z + ib}\Big) \end{aligned} \tag{7.14}$$



Der erste Summand beschreibt in diesem Modell den breiten Peak in der Nähe von $z = \epsilon_f$, während der zweite Term die Abrikosov-Suhl-Resonanz an der Fermi-Kante $z = 0$ annähert. Die Breite der Maxima wird hierbei durch den Parameter b_f bzw. b und deren Höhe durch a_f bzw. a bestimmt. Da bei einer Erniedrigung der Temperatur die Resonanz anwächst, korrespondiert ein größeres a zu einer tieferen Temperatur.

In [PruMetVol01] wiesen Th. Pruschke, W. Metzner und D. Vollhardt darauf hin, dass während der Lösung der DMFT-Selbstkonsistenzbedingung in jedem Iterationsschritt folgende Ungleichung erfüllt sein muss, die sich aus den Analytizitätseigenschaften der f-Green-Funktion ergibt.

$$\mathfrak{Im}\left(t^{-1}(z) + \mathcal{G}_0(z)\right) \geq 0 \tag{7.15}$$

Eine Verletzung dieser Ungleichung im Verlauf der Iteration führt ihrer meiner Meinung nach zu dem in [Leu98, KeiLeu00] gefundenen Analytizitätsschnitt.

Bei der numerischen Lösung von

$$\mathcal{G}_0^{-1}(z) = g_0^{-1}(z - \frac{t}{1 + t\mathcal{G}_0(z)}) + \frac{t}{1 + t\mathcal{G}_0(z)} \tag{7.16}$$

mit dem gewöhnlichen Iterationsverfahren stellte sich in der Tat heraus, dass diese Bedingung sehr leicht verletzt werden kann. Dieses Verfahren lässt sich jedoch erweitern, indem im $(n + 1)$-ten Iterationsschritt nicht nur das Ergebnis des n-ten eingesetzt wird $x_{n+1} = \varphi(x_n)$, sondern eine Linearkombination des n-ten und $(n - 1)$-ten Schrittes gebildet wird $x_{n+1} = \varphi(\alpha x_n + \beta x_{n-1})$. Die Koeffizienten α, β mit $\alpha + \beta = 1$ werden hierbei jeweils so angepasst, dass (7.15) stets erfüllt ist. Dadurch ist ebenfalls gewährleistet, dass in (7.16) die ungestörte Band-Green-Funktion $g_0(z)$ niemals in dem unphysikalischen Bereich $\mathfrak{Im}\, z < 0$, sondern ausschließlich in der oberen komplexen Halbebene ausgewertet wird.

Die folgende Abbildung zeigt die effektive Zustandsdichte für zwei verschiedene Parameter a, zum einen in der Nähe der Fermi-Kante $z = 0$ und zum anderen im Inset über den ganzen Energiebereich.

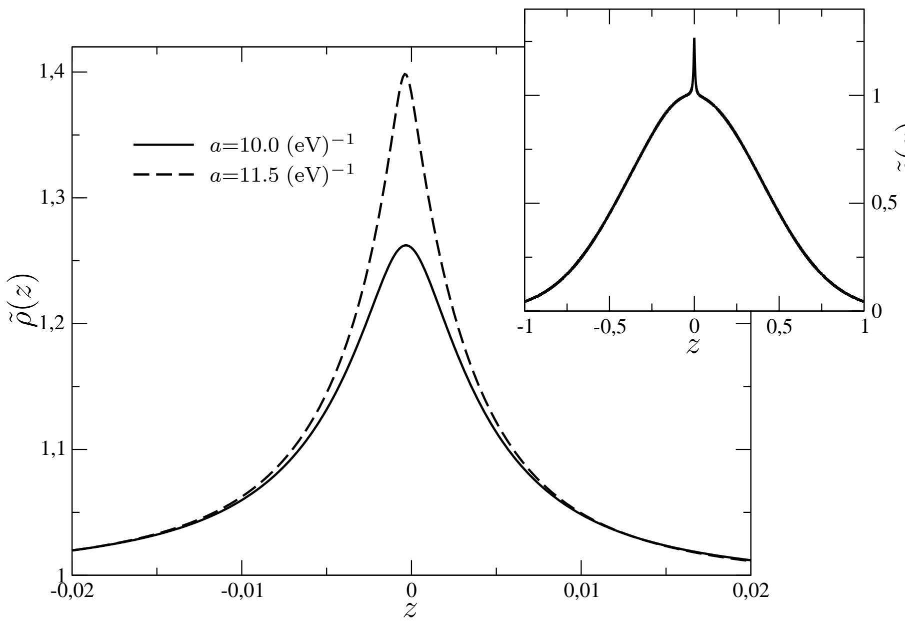


Abbildung 7.5 Effektive Banddichte für $t^{(1)}$
mit $b = 0.01$ (eV)$^{-1}$, $a_f = 1.0$ eV, $b_f = 0.2$ eV

Man erkennt ein scharfes Maximum bei $z \approx 0$, das sich bei größerem Parameter a, dies entspricht einer tieferen Temperatur, stärker ausprägt. In allen anderen Bereichen gibt es nur sehr geringe Abweichungen von der ungestörten Dichte.

Bei einer weiteren Vergrößerung von a tritt im effektiven Band der bereits in [Leu98, KeiLeu00] beobachtete Analytizitätsschnitt auf. Um diesen genauer numerisch zu untersuchen wird bei der Iteration der Energiebereich einmal vorwärts, d. h. von negativem zu positivem z, und einmal rückwärts durchlaufen.

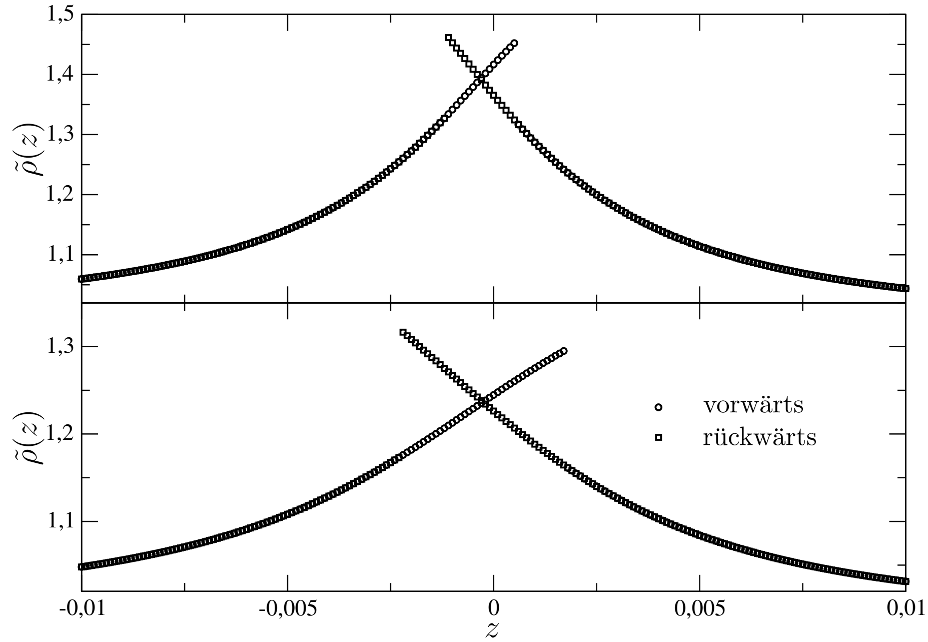


Abbildung 7.6 Effektive Banddichte für $t^{(1)}$ bei Vorwärts- und Rückwärtsiteration mit $a = 15.0\ (\mathrm{eV})^{-1}$ (oben), $a = 18.0\ (\mathrm{eV})^{-1}$ (unten)

Man erkennt, dass die iterative Lösung zunächst einem Lösungsast folgt, nach dem Analytizitätsschnitt dann aber auf den anderen, tieferen Zweig wechselt. Außerdem verlaufen die beiden Äste mit weiter zunehmenden a wieder flacher und der Verzweigungpunkt verschiebt sich zu kleinerem $\tilde{\rho}(z)$.

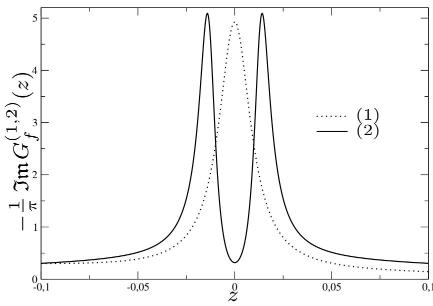
Der Analytizitätsschnitt bestätigt sich durch die hier durchgeführten numerischen Berechnungen. Ein artifizielles Auftreten aufgrund einer Verletzung der Ungleichung (7.15) oder einer Auswertung der ungestörten Green-Funktion in der unteren Halbebene lässt sich ausschließen.

7.2.2 Modellstreumatrix II

Th. Pruschke, W. Metzner und D. Vollhardt kritisierten in ihrer Arbeit weiterhin die einfache Struktur der modellierten f-Green-Funktion. Bei der Lösung des SIAMs mit der Numerischen Renormalisierungsgruppe erhalten sie in der f-Dichte einen Doppelpeak an der Fermi-Kante und nicht wie in $t^{(1)}(z)$ ein einzelnes Maximum.
Zur genauen Betrachtung der Auswirkungen einer solchen Doppelpeak-Struktur auf den Analytizitätsschnitt wird (7.14) durch Einführen eines

zusätzlichen Parameters c erweitert.

$$\begin{aligned} t^{(2)}(z) &= |V|^2\, G_f^{(2)}(z) \\ &= |V|^2 \Big(\frac{a_f b_f}{z-\epsilon_f+ib_f} + \frac{ab}{z-\frac{c}{z}+ib} \Big) \end{aligned} \tag{7.17}$$



Bei der numerischen Berechnung wird dasselbe Iterationsverfahren wie im vorherigen Abschnitt angewendet, durch das die korrekten analytischen Eigenschaften des effektiven Bandes sichergestellt werden.

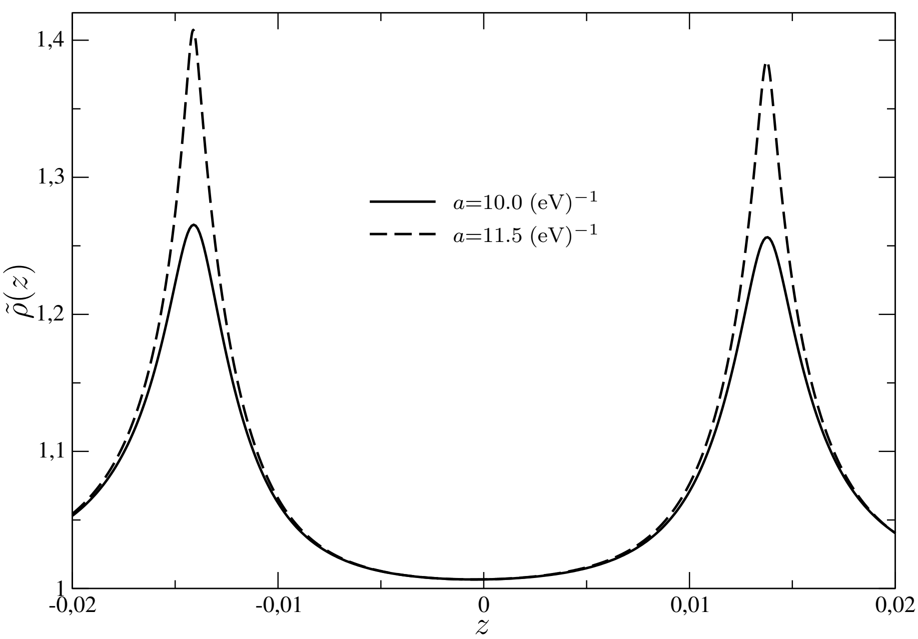


Abbildung 7.7 Effektive Banddichte für $t^{(2)}$
mit $b = 0.01$ (eV)$^{-1}$, $a_f = 1.0$ eV, $b_f = 0.2$ eV, $c = 0.0002$ (eV)^2

Die Doppelpeak-Struktur der Streumatrix findet sich direkt in der effektiven Banddichte wieder, wobei die Maxima wiederum mit größerem a anwachsen.

Erhöht man den Parameter a weiter, so tritt an beiden Maxima ein Analytizitätsschnitt auf. Das Szenario ist hierbei dasselbe wie bei $t^{(1)}$, die numerische Lösung folgt zunächst einem Zweig und springt kurz nach dem Verzweigungsschnitt auf den tieferen Ast.

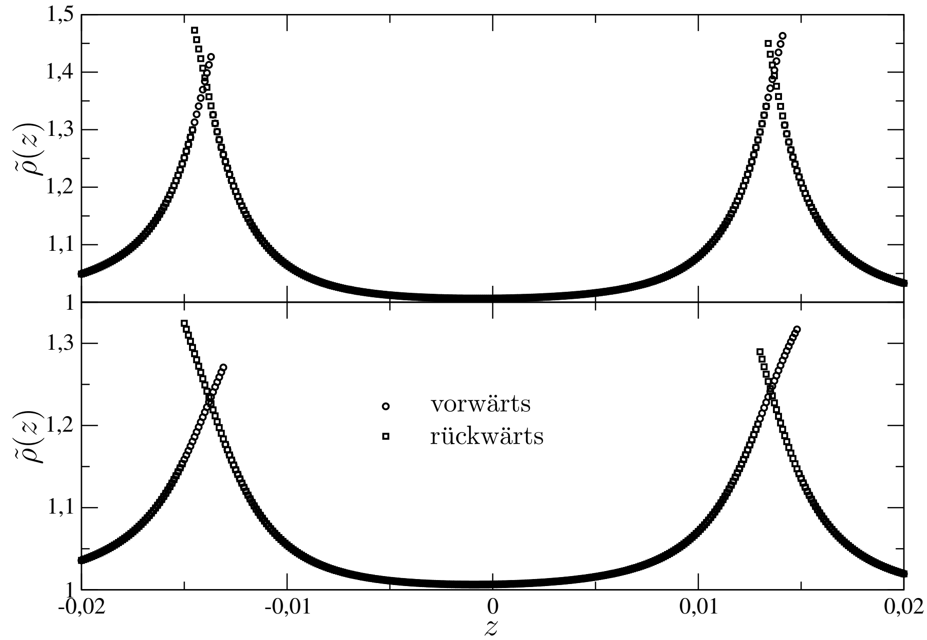


Abbildung 7.8 Effektive Banddichte für $t^{(2)}$ bei Vorwärts- und Rückwärtsiteration mit $a = 15.0\ (\text{eV})^{-1}$ (oben), $a = 18.0\ (\text{eV})^{-1}$ (unten)

Die obigen Resultate widerlegen, dass der Analytizitätsschnitt im effektiven Band nur aufgrund der gemachten Näherungen in der modellierten Streumatrix auftritt. Er ist stattdessen eine Folge der scharfen Abrikosov-Suhl-Resonanz an der Fermi-Kante. In Modellen ohne Vielteilchenkorrelationen (Kapitel 6 und 7.1) kann einen solches Verhalten nicht gefunden werden.

7.2.3 Extended Non-Crossing Approximation

Nachdem zuvor die lokale Streumatrix $t(z) = |V|^2\, G_f(z)$ durch zwei Funktionen modelliert wurde, wird nun das effektive SIAM mit der NCA approximativ gelöst. Durch diese Untersuchungen lässt sich ein artifizielles Auftreten des Analytizitätsschnittes aufgrund einer zu groben Näherung der Streumatrix durch $t^{(1)}(z)$ bzw. $t^{(2)}(z)$ ausschließen.
Die Betrachtungen zur CPA zu Beginn dieses Kapitels zeigten, dass hierbei die f-Green-Funktion voll selbstkonsistent in die DMFT-Iteration einbezogen werden muss. Weiterhin werden zu jedem Zeitpunkt die korrekten Analytizitätseigenschaften des effektiven Bandes und der Streumatrix sichergestellt.

Die Parameter im Anderson-Modell werden für die numerischen Berechnungen wie folgt gewählt.

Hoppingamplitude	t	0.282 eV
$\Rightarrow$ Bandbreite	$D = \sqrt{\langle \epsilon_k \rangle} = \sqrt{\pi}\, t$	0.4 eV
$\Rightarrow$ Zustandsdichte bei ϵ_{Fermi}	$\rho(\epsilon_{\text{Fermi}} = 0)$	1.0 $(\text{eV})^{-1}$
f-Energie	ϵ_f	-0.2 eV
f-Entartung	N_f	6
Hybridisierung	$\|V\|^2$	0.011 $(\text{eV})^2$
chem. Potential	μ	0 eV
$\Rightarrow$ Andersonbreite	$W_0 = N_f \|V\|^2 \rho(0)$	0.066 eV
$\Rightarrow$ Kondo-Temperatur	$T_K = \frac{D}{k_B} \left(\frac{W_0}{D}\right)^{\frac{1}{N_f}} \exp\left(\frac{\epsilon_f}{W_0}\right)$	166 K

Die effektive Banddichte für verschiedene Temperaturen deutlich unterhalb der Kondo-Temperatur ist in der folgenden Abbildung dargestellt.

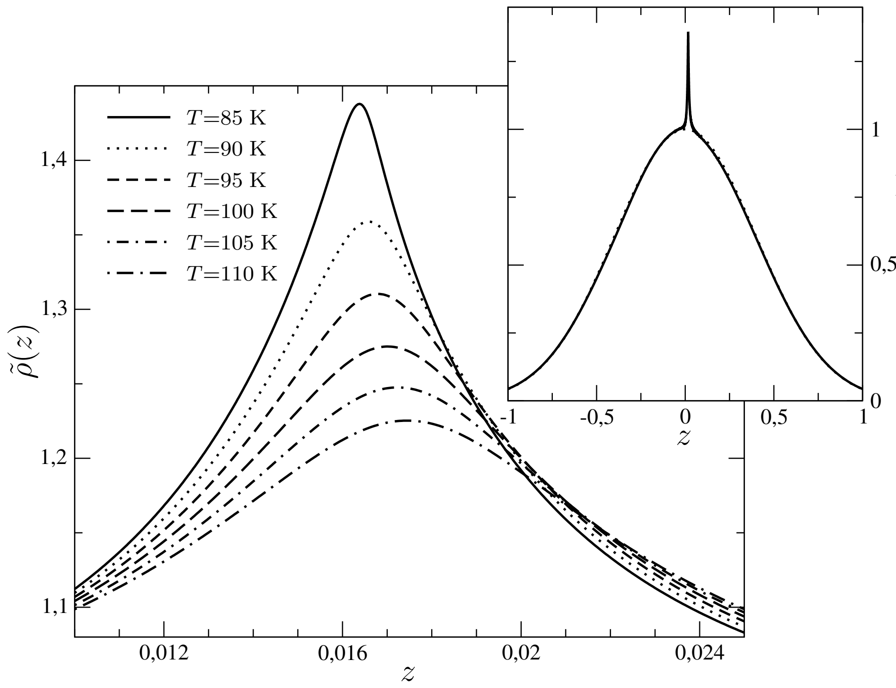


Abbildung 7.9 Effektive Bandzustandsdichte in der XNCA

Man erkennt ein sehr scharfes Maximum etwas oberhalb der Fermi-Energie $\epsilon_{\text{Fermi}} = 0$, das bei tieferer Temperatur anwächst und sich leicht in Richtung der Fermi-Kante verschiebt. Wie der Inset zeigt gibt es in den anderen Bereichen nur marginale Unterschiede zum ungestörten Gauß-Band. Die ausgezeichnete Übereinstimmung der XNCA-Ergebnisse mit denen der Modellstreumatrix (Abbildung 7.5) bestätigt die gute Modellierung der f-Green-Funktion in den vorherigen Abschnitten.

Auch in der XNCA bildet sich bei einem weiteren Absenken der Temperatur ein Analytizitätsschnitt im effektiven Band aus. Dieser wird wie für die Modellstreumatrizen deutlich, falls man in der DMFT-Iteration den Energiebereich einmal in positiver und einmal in negativer Richtung durchläuft.

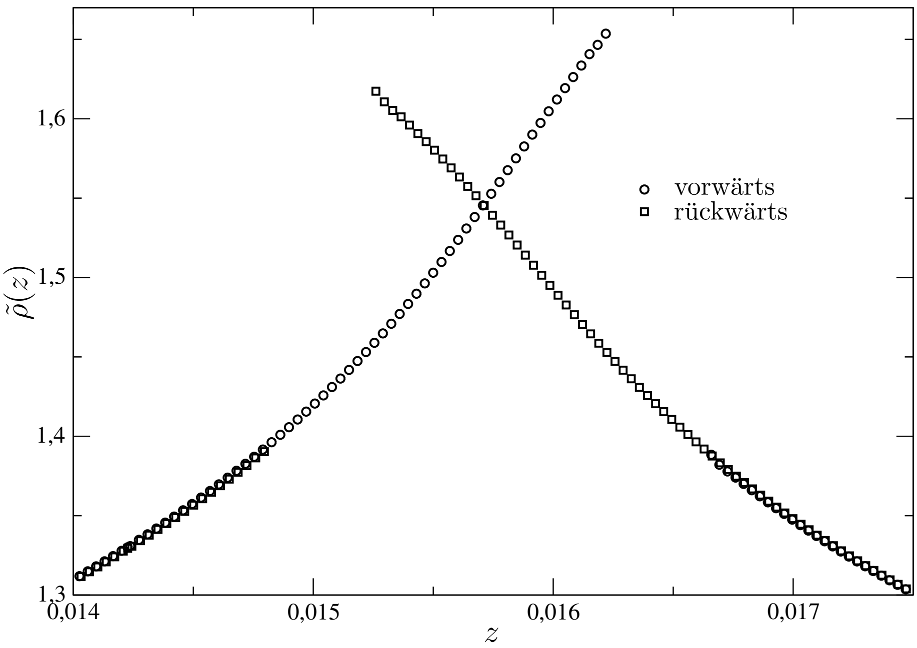


Abbildung 7.10 Verzweigungsschnitt in der XNCA für $T = 75$ K

Alle hier durchgeführten Berechnungen bestätigen den in [Leu98, KeiLeu00] gefundenen Verzweigungschnitt, der dort in der exakten Lösung der DMFT-Gleichung für das quadrierte Lorentz-Band mit einer modellierten Streumatrix auftrat. In dieser Arbeit konnte der Analytizitätsschnitt nun auch in einer numerischen Behandlung des Gauß-Bandes beobachtet werden. Weiterhin ließ sich feststellen, dass dieser sich nicht als ein Artefakt aus den Modellstreumatrizen ergibt, sondern ebenfalls in der XNCA entsteht.

Um im letzten Teil dieses Abschnittes den Einfluss einer periodischen Anordnung von Störstellen mit dem SIAM zu vergleichen wird die Zustandsdichte der f-Elektronen betrachtet. In der folgenden Abbildung zeigt der Inset die f-Dichte des SIAMs für $T = 90$ K über dem gesamten Energiebereich. Hierbei erkennt man ein breites Maximum bei ϵ_f und die scharfe Abrikosov-Suhl-Resonanz direkt oberhalb der Fermi-Kante. Da nur dort Unterschiede zwischen dem SIAM und dem PAM sichtbar sind, wird dieser Bereich nochmals vergrößert dargestellt.

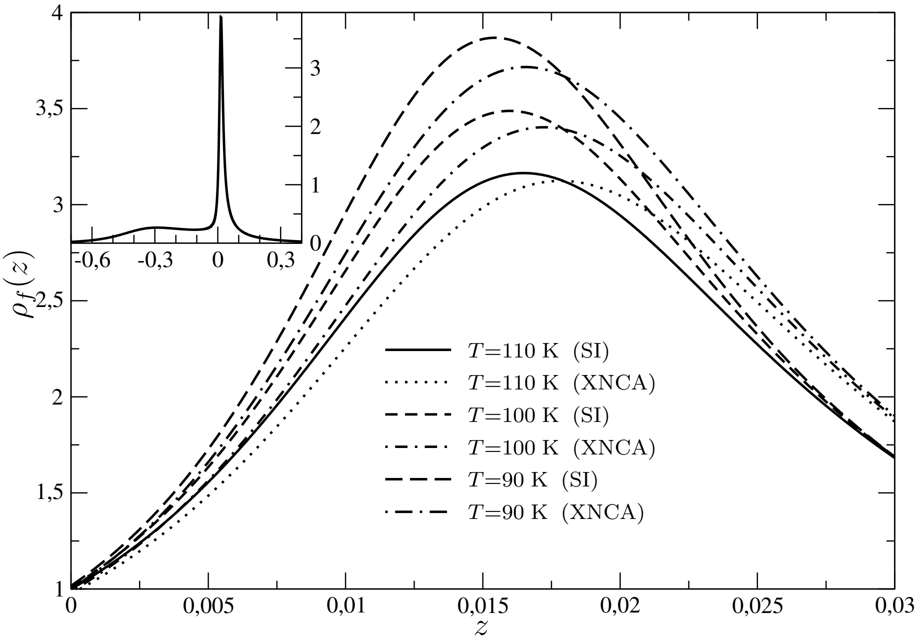


Abbildung 7.11 f-Elektronen-Zustandsdichte $\rho_f(z) = -\frac{1}{\pi}\,\mathfrak{Im}\,G_f(z)$

Man stellt fest, dass im SIAM der Peak etwas höher und in Richtung der Fermi-Energie verschoben ist. Bei tieferen Temperaturen wachsen die Maxima sowohl im SIAM als auch im PAM an, wobei deren Abstand zunimmt. Außerdem verschiebt sich hierbei die Abrikosov-Suhl-Resonanz leicht zur Fermi-Kante.

Bei denjenigen Temperaturen, bei denen ein Verzweigungsschnitt im effektiven Band auftritt, ergeben sich dennoch konsistente f-Green-Funktionen. Dieses Ergebnis ist auf den ersten Blick ein wenig überraschend, da der Analytizitätsschnitt bei tieferen Temperaturen wieder zu kleineren $\tilde{\rho}$-Werten wandert. Dieses Verhalten ist gegensätzlich zum Anwachsen des Peaks im effektiven Band (Abbildung 7.9). Daher könnte man zunächst erwarten, dass die Abrikosov-Suhl-Resonanz bei einem Verzweigungsschnitt im effektiven Band ein unphysikalisches Verhalten zeigen und sich bei kleinerem T wieder weniger stark ausbilden würde.

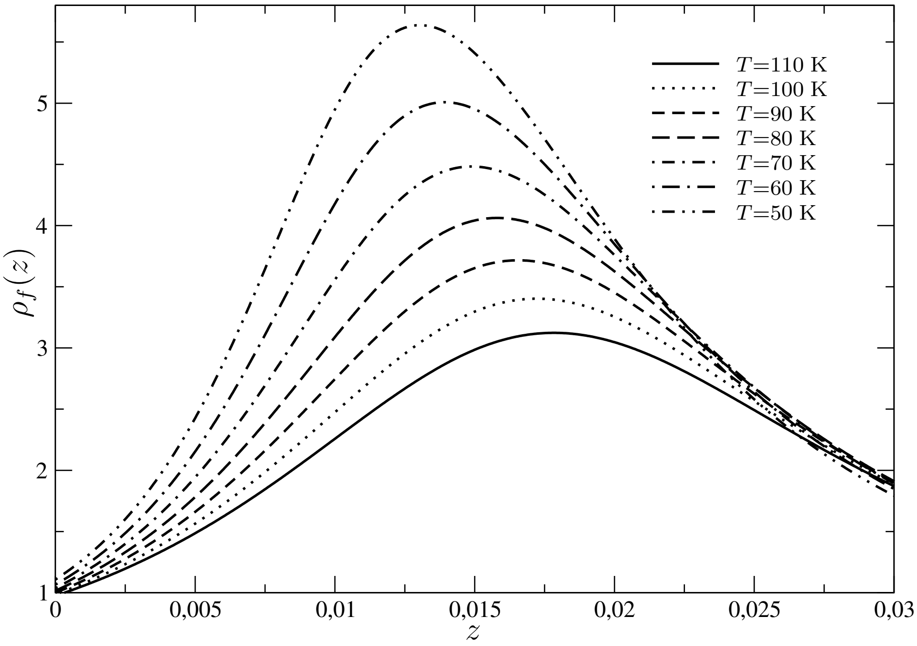


Abbildung 7.12 f-Elektronen-Zustandsdichte in der XNCA

Die obige Abbildung zeigt jedoch das aus der Behandlung des SIAMs erwartete Anwachsen des Maximums und eine geringe Verschiebung zur Fermi-Energie. Die Mehrdeutigkeit im effektiven Band scheint daher für die physikalischen Eigenschaften des Systems, wie die f-Zustandsdichte, keine signifikanten Auswirkungen zu haben.

Bei einem weiteren Absenken der Temperatur bricht die NCA und somit auch die XNCA unterhalb eines charakteristischen T_{NCA} zusammen, da bei tiefen Temperaturen Wechselwirkungsprozesse höherer Ordnung wichtig werden, die die NCA nicht berücksichtigt. Detaillierte Betrachtungen zum Tief-Temperatur-Verhalten und zu den fehlenden Fermi-Flüssigkeits-Eigenschaften der NCA findet man in [Bic87].

7.3 Erweiterung der CPA und XNCA

Mithilfe der Lace-Entwicklung, die in Kapitel 4 für den mathematischen Self-Avoiding Walk eingeführt und in [Leu98] auf den physikalischen SAW angewendet wurde, lässt sich die DMFT-Selbstkonsistenzgleichung (7.16) sukzessive erweitern. Da der Non-Crossing Loop (7.16) aufgrund des dimensionalen Skalierungsverhaltens der ungestörten Propagatoren einen SAL in unendlichen Raumdimensionen exakt löst, bietet sich die inverse Dimension als

Entwicklungsparameter für eine Erweiterung der DMFT-Gleichung an.

7.3.1 d^{-1}-Korrektur des effektiven Bandes

Für die Berechnung der ersten dimensionalen Korrektur zu der in unendlichen Raumdimensionen exakten Lösung des SALs (7.16) wird der Diagonalteil der effektiven Band-Green-Funktion $\mathcal{G}_0$ nach der inversen Raumdimension entwickelt. Hierbei ist zu bemerken, dass aufgrund des verschwindenden Konvergenzradius eines mathematischen SAWs in $d \to \infty$ (Abschnitt 4.4) eine solche d^{-1}-Entwicklung jedoch a priori fraglich sein könnte.

$$\mathcal{G}_0 = \underbrace{\mathcal{G}_0^{(0)}}_{\sim\mathcal{O}(d^0)} + \underbrace{\mathcal{G}_0^{(1)}}_{\sim\mathcal{O}(d^{-1})} + \mathcal{O}(d^{-2}) \tag{7.18}$$

Der $(d \to \infty)$-Anteil $\mathcal{G}_0^{(0)}$ ergibt sich hierbei wiederum aus der Lösung der bekannten Selbstkonsistenzbedingung. Zum Vereinfachung werden an dieser Stelle die Abkürzungen $q = \frac{1}{1+t\mathcal{G}_0^{(0)}}$ und $\tilde{z} = z - qt$ eingeführt.

$$\mathcal{G}_0^{(0)}(z) = \Big\langle \frac{g(z)}{1 - t(g(z) - \mathcal{G}_0^{(0)}(z))} \Big\rangle = \big(g_0^{-1}(\tilde{z}) + qt\big)^{-1} \tag{7.19}$$

Bei der Auswertung dieses Ausdrucks im Rahmen einer d^{-1}-Korrektur ist zu beachten, dass im ungestörten Band g_0 ebenfalls die Terme bis zur Ordnung $\mathcal{O}(d^{-1})$ mitgenommen werden (Anhang A).

Für die Bestimmung des ersten Korrekturterms $\mathcal{G}_0^{(1)}$ müssen zwei zusätzliche Diagramme in der Selbstenergie betrachtet werden.

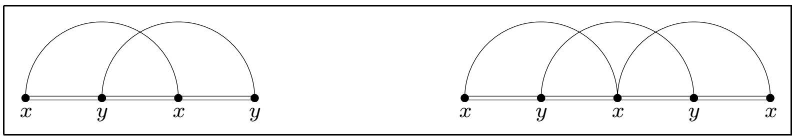


Abbildung 7.13 d^{-1}-Korrekturen in der Selbstenergie

Da die ungestörten Propagatoren g_{xy} mit der inversen Wurzel aus dem Abstand der beiden Sites x und y skalieren $g_{xy} \sim \sqrt{d}^{\,-\Delta(x,y)}$, lässt sich leicht sehen, dass die obigen Selbstenergieanteile, die den Mehrfachbesuch eines Gitterplatzes beschreiben, von der Ordnung $\mathcal{O}(d^{-1})$ sind.
Die Herleitung des folgenden Ausdrucks für die erste dimensionale Korrektur $\mathcal{G}_0^{(1)}$ wird in [Leu98] durchgeführt. Sie basiert auf einer Reihenentwicklung der Dyson-Gleichung für den Hilfspropagator $\breve{\mathcal{G}} = \mathcal{G} - \mathcal{G}_0 + \frac{1}{t}$ und renormalisiert die obigen Diagramme mit $\bar{\mathcal{G}}^{(0)} = \mathcal{G}^{(0)} - \mathcal{G}_0^{(0)}$. Weitere Terme brauchen

bei der Auswertung der Graphen nicht berücksichtigt zu werden, da diese Selbstenergiebeiträge aufgrund ihrer Topologie bereits von der Ordnung $\mathcal{O}(d^{-1})$ sind und somit nur der führende Term $\bar{\mathcal{G}}^{(0)} \sim \mathcal{O}(1)$ einen d^{-1}-Beitrag liefert.

$$\mathcal{G}_0^{(1)}(z) = \frac{1}{t}\Big(\frac{Q_5(z) + 2Q_4(z)}{1 + Q_2(z)} - Q_4(z)\Big) \tag{7.20}$$

Die Hilfsgrößen Q_2, Q_4 und Q_5 wurden zur Verbesserung der Übersichtlichkeit eingeführt, wobei die Ortsdarstellung die Mehrfachbesetzung der Gitterplätze x und y in den Prozessen Q_4 und Q_5 offenbart.

$$Q_2 = \frac{1}{N}\sum_k \big(\bar{\mathcal{G}}_k\big)^2 = \sum_x \bar{\mathcal{G}}_{0x}\bar{\mathcal{G}}_{x0} \tag{7.21a}$$

$$Q_4 = \frac{1}{N}\sum_{k_1,k_2,k_3} \bar{\mathcal{G}}_{k_1}\bar{\mathcal{G}}_{k_2}\bar{\mathcal{G}}_{k_3}\bar{\mathcal{G}}_{k_1-k_2+k_3} = \sum_x \big(\bar{\mathcal{G}}_{0x}\bar{\mathcal{G}}_{x0}\big)^2 \tag{7.21b}$$

$$Q_5 = \frac{1}{N}\sum_{k_1,k_2,k_3} \big(\bar{\mathcal{G}}_{k_1}\big)^2\bar{\mathcal{G}}_{k_2}\bar{\mathcal{G}}_{k_3}\bar{\mathcal{G}}_{k_1-k_2+k_3} = \sum_{x,y} \bar{\mathcal{G}}_{0x}\bar{\mathcal{G}}_{xy}\bar{\mathcal{G}}_{yx}\bar{\mathcal{G}}_{xy}\bar{\mathcal{G}}_{y0} \tag{7.21c}$$

Diese Ausdrücke können wiederum auf eine Auswertung der ungestörten Green-Funktion zurückgeführt werden. Hierbei lässt sich Q_2 exakt bestimmen und aufgrund des Skalierungsverhaltens der g_{xy} braucht man in der Ortssummation von Q_4 und Q_5 jeweils nur die Propagation zu den $2d$ nächsten Nachbarn zu berücksichtigen, für die $g_{nN}(z) = \frac{t_{\text{hop}}}{\sqrt{d}}\, g'(z)$ gilt.

$$Q_2(z) = -t^2q^4\big(g_0'(\tilde{z}) + g_0^2(\tilde{z})\big) \tag{7.22a}$$

$$Q_4(z) = \frac{2t^4q^8}{d}\big(t_{\text{hop}}g_0'(\tilde{z})\big)^4 + \mathcal{O}(d^{-2}) \tag{7.22b}$$

$$Q_5(z) = -\frac{t^5q^{10}}{d}\big(t_{\text{hop}}g_0'(\tilde{z})\big)^3 t_{\text{hop}}\big(g_0''(\tilde{z}) + 2g_0(\tilde{z})g_0'(\tilde{z})\big) + \mathcal{O}(d^{-2}) \tag{7.22c}$$

7.3.2 d^{-1}-Erweiterung der CPA

In Kapitel 5 konnte gezeigt werden, dass die Coherent Potential Approximation eine Spezialisierung der DMFT auf ungeordnete Systeme darstellt. Daher lässt sich die d^{-1}-Erweiterung des effektiven Bandes direkt auf die CPA übertragen, diese Verallgemeinerung wird mit CPA-d abgekürzt. Um ihren Einfluss auf das effektive Band und die volle Green-Funktion zu untersuchen wird nur ein Störpotential V mit einer Konzentration von $c_{\text{imp}} = \frac{1}{2}$ angesetzt. Wie im vorherigen Abschnitt erläutert führt man die Berechnungen mit einem Gauß-förmigen Leitungsband mit d^{-1}-Korrektur durch.

Bei der iterativen Lösung des Selbstkonsistenzproblems wird zunächst ein Iterationsschritt der DMFT-Gleichung durchgeführt und anschließend mit (7.22) der d^{-1}-Anteil bestimmt. Aus dem effektiven Band mit d^{-1}-Korrektur ergibt sich eine neue Streumatrix und solange noch keine Selbstkonsistenz eingetreten ist, kann der nächste Schritt der Iteration beginnen.

Die folgende Abbildung vergleicht die effektiven Bänder der CPA und CPA-d bei zwei verschiedenen Potentialstärken, wobei sich für kleine V in der CPA-d nur sehr geringe Unterschiede zur CPA zeigen.

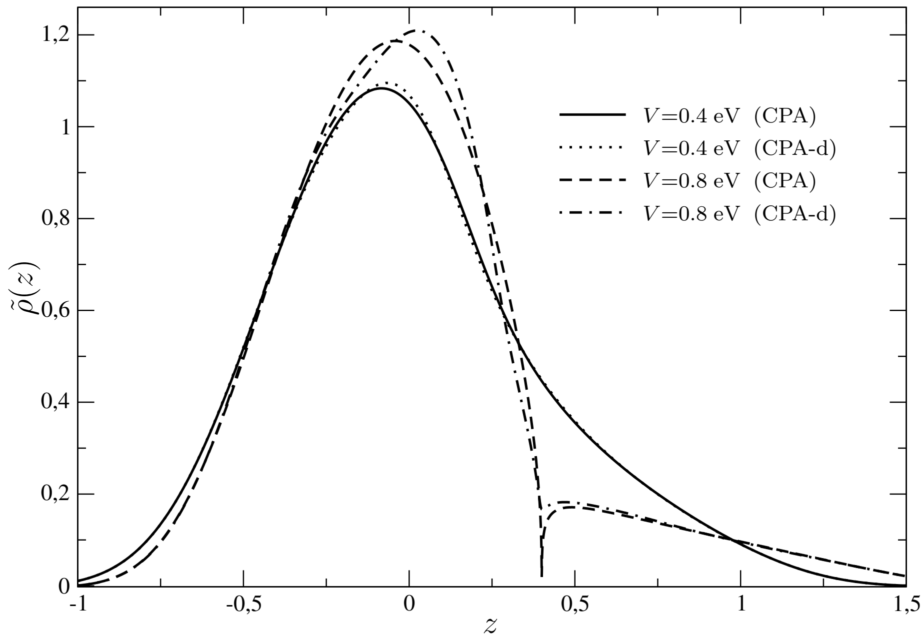


Abbildung 7.14 Effektive Banddichte mit d^{-1}-Korrektur

Diese Differenzen werden bei einer Vergrößerung von V etwas deutlicher, allerdings lässt sich in der vollen Bandzustandsdichte, die im nächsten Graphen dargestellt ist, kein qualitativ anderes Verhalten erkennen.

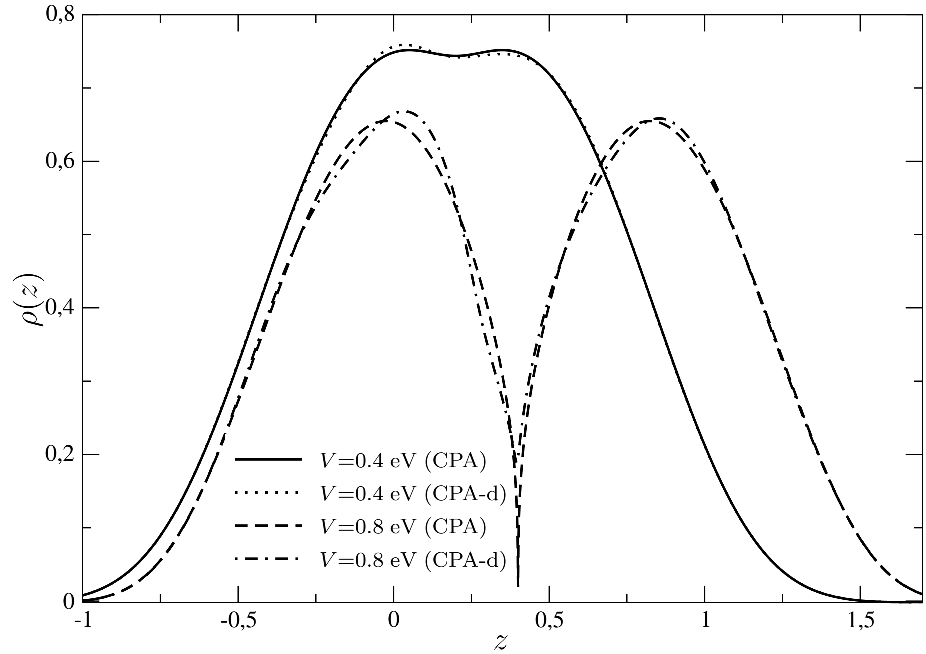


Abbildung 7.15 Bandzustandsdichte mit d^{-1}-Korrektur

Bei der numerischen Lösung der Gleichungen stellt man fest, dass sich durch die d^{-1}-Korrektur das Konvergenzverhalten deutlich verschlechtert und bei einer weiteren Erhöhung von V bzw. der Konzentration die CPA-d in großen Bereichen divergiert. Ein weiterer Schwachpunkt der CPA-d ist den in der CPA exakten Limes $c_{\mathrm{imp}} = 1$ nicht mehr reproduzieren zu können. Diese Tatsache lässt sich durch die Asymmetrie in der dimensionalen Erweiterung erklären. Zwar wird in der CPA-d das effektive Band mit den d^{-1}-Beiträgen korrigiert, eine entsprechende Verbesserung der lokalen Streumatrix entfällt jedoch in diesem Zugang.

7.3.3 d^{-1}-Erweiterung der XNCA

Ein Anwenden der d^{-1}-Erweiterung des effektiven Bandes in Abschnitt 7.3.1 ist ebenfalls auf die XNCA möglich und wird mit XNCA-d bezeichnet. Für einen Vergleich dieser Verallgemeinerung mit der XNCA in der folgenden Abbildung wird auch die XNCA mit einem d^{-1}-korrigierten Gauß-Band berechnet, das wie in Anhang A gezeigt an der Fermi-Kante eine geringere Zustandsdichte als der unkorrigierte Fall besitzt. Daraus folgt eine schwächere Abrikosov-Suhl-Resonanz in der f-Green-Funktion und man erwartet, dass bei denselben Parametern aus Abschnitt 7.2.3 ein eventueller Analytizitätsschnitt bei einer tieferen Temperatur auftritt.

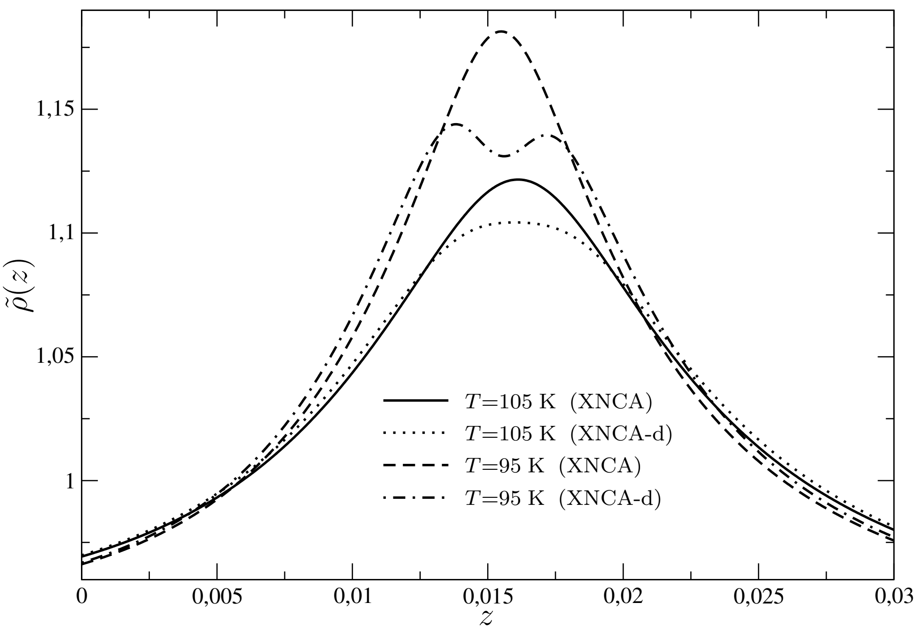


Abbildung 7.16 Effektive Banddichte mit d^{-1}-Korrektur

Unterschiede zwischen beiden Näherungen werden nur in der Nähe des Peaks etwas oberhalb der Fermi-Energie deutlich. Hierbei erkennt man ein Absinken der Zustandsdichte am Maximum durch die d^{-1}-Korrektur. Weiterhin bildet für tiefere Temperaturen eine Doppelpeak-Struktur aus, die in der nächsten Abbildung genauer betrachtet wird.

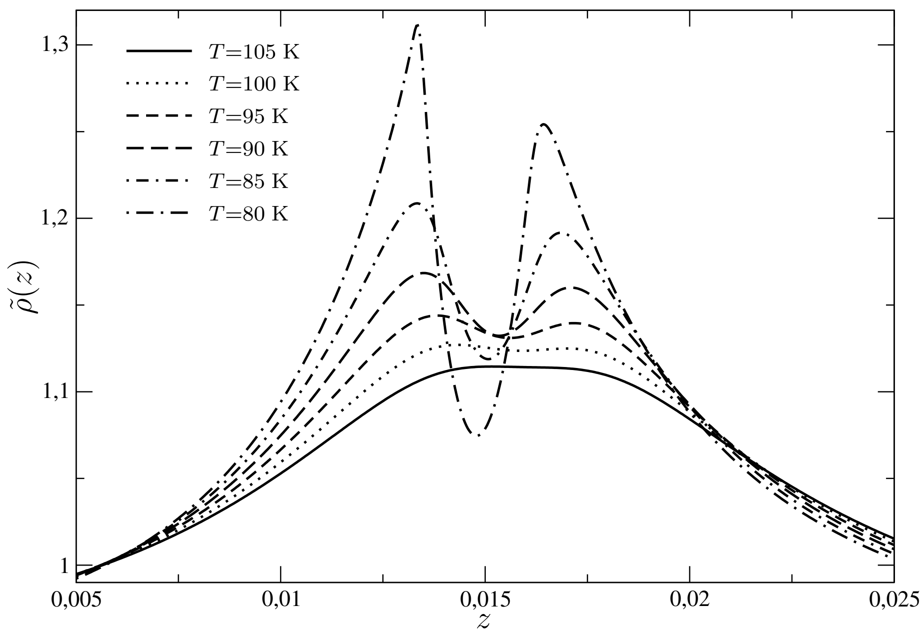


Abbildung 7.17 Effektive Banddichte mit d^{-1}-Korrektur

Mit niedrigerer Temperatur wird der Doppelpeak immer ausgeprägter. Außerdem beobachtet man eine leichte Verschiebung in Richtung der Fermi-Kante, was bereits aus der XNCA bekannt ist.

Ein weiteres Absenken der Temperatur ist leider nicht möglich. Ähnlich der CPA-d im vorherigen Abschnitt so besitzt auch die XNCA-d ein wesentlich schlechteres Konvergenzverhalten als die XNCA und bei kleineren T divergiert die Selbstkonsistenzschleife.

7.3.4 Kritische Anmerkungen zu Banderweiterungen

Mit der Lace-Entwicklung ist es prinzipiell möglich die nächsten Korrekturterme $\mathcal{O}(d^{-2})$ des effektiven Bandes zu bestimmen. Allerdings wächst hierbei die Zahl der zu berücksichtigen Diagramme sehr stark an und dieses Verfahren wird schnell unpraktikabel. Außerdem zeigen die Untersuchungen dieses Kapitels, dass eine dimensionale Entwicklung des effektiven Bandes keinen guten Ausgangspunkt für eine Verallgemeinerung der DMFT darstellt. Aufgrund der schlechten Konvergenz der Gleichungen konnte in der XNCA-d zwar kein Analytizitätsschnitt des effektiven Bandes gefunden werden, jedoch weisen die Daten für $T = 80$ K nach einem Vergleich mit den Ergebnissen aus Abschnitt 7.2.3 darauf hin, dass auch in der XNCA-d ein Verzweigungsschnitt auftreten wird.

Eine weitere Schwierigkeit bei einer Verallgemeinerung der DMFT mit der Lace-Entwicklung für den SAW des effektiven Bandes besteht in der Asymmetrie der Erweiterung. Dies wird bereits an den d^{-1}-Korrekturen deutlich. Bei der Abbildung des PAMs auf ein Ein-Störstellen-Modell mit einem SAW als effektives Band werden Mehrfach-Streuprozesse an einem Gitterplatz vernachlässigt, weiterhin entstehen aufgrund der selbstkonsistenten Berechnung der lokalen Streumatrix Überzählungen (Abschnitt 5.2). Diese Beiträge verschwinden im Grenzfall unendlicher Raumdimensionen. Für eine konsistente dimensionale Entwicklung des PAMs müssen sie jedoch berücksichtigt werden und das Bild eines SAWs mit lokaler Streumatrix bricht gänzlich zusammen.

Kapitel 8

Zusammenfassung

Zu Beginn dieser Arbeit wurde das Anderson-Modell zur Beschreibung von Systemen mit magnetischen Störstellen eingeführt. Die große Coulomb-Wechselwirkung in den lokalisierten f-Niveaus ist für das ungewöhnliche Verhalten dieses Modells verantwortlich. Aus der bekannten diagrammatischen Störungstheorie nach der Hybridisierung von H. Keiter und J. C. Kimball, die die hohen elektronischen Korrelationen in besonderer Weise berücksichtigt, kann die Non-Crossing Approximation hergeleitet werden. Diese Näherung ermöglicht es charakteristische Eigenschaften des Modells, wie das Ausbilden der Abrikosov-Suhl-Resonanz an der Fermi-Kante unterhalb der Kondo-Temperatur, gut wiederzugeben.

Bei sehr tiefen Temperaturen liefert die NCA jedoch keine zufriedenstellenden Ergebnisse mehr. In ihr ergibt sich nicht das erwartete Fermi-Flüssigkeits-Verhalten und auch die Schwellenexponenten, die die Divergenz der Propagatoren an einer Schwellenenergie kennzeichnen, werden nicht korrekt beschrieben. Eine Erweiterung der NCA, die die für tiefere Temperaturen wichtig werdenden Crossing-Anteile einbezieht, wurde in Kapitel 3 vorgestellt. Diese Verallgemeinerung basiert auf einem erzeugenden Funktional, das alle Diagramme mit Verbindungen von Bandelektronenlinien zwischen drittnächsten Vertices beinhaltet. Im Gegensatz zu den NCA-Erweiterungen der letzten Jahre, die alle den umständlicheren Slave-Boson-Formalismus benutzen, lassen sich die entstehenden Selbstenergiebeiträge mit der Diagrammtechnik von H. Keiter und J. C. Kimball auswerten. Nach Definition dreier Streumatrizen, wobei zwei über jeweils eine eindimensionale Integralgleichung berechnet werden müssen, können die zusätzlichen Anteile in den Selbstenergien bestimmt werden. Eine konsistente Erweiterung der f-Green-Funktion, die durch die Streumatrizen beschrieben werden kann, folgt ebenfalls aus dem erzeugenden Funktional.

Nach diesen Betrachtungen zum Ein-Störstellen-Modell stand im weiteren Verlauf der Arbeit das periodische Anderson-Modell im Mittelpunkt. Für dieses ist es auch möglich eine diagrammatische Störungstheorie zu entwickeln. Das schnelle Anwachsen der zu berücksichtigen Beiträge mit der Ordnung erfordert jedoch eine andere Behandlung des PAMs. Hierzu bildet man in der Dynamischen-Mean-Field-Theorie das Gittersystem auf ein Ein-Störstellen-Modell ab, bei dem ein effektives Band den Einfluss der anderen Störstellen beschreibt. Eine solche Abbildung ist im Limes unendlicher Raumdimensionen exakt. Zur Lösung des SIAMs kommt in diesem Fall die Bestimmung des effektiven Bandes hinzu, das man als einen Self-Avoiding Walk durch das Gitter mit einer lokalen Streumatrix ansetzt.
Die Eigenschaften eines mathematischen SAWs, insbesondere sein Verhalten in endlichen und unendlichen Raumdimensionen wurden in Kapitel 4 untersucht. Für dieses analytisch nicht lösbare Problem lassen sich mithilfe der mächtigen Lace-Entwicklung zwei verschiedene Näherungen angeben, die auch sukzessive erweitert werden können. In unendlichen Raumdimensionen löst der Non-Crossing Walk, der in einer diagrammatischen Beschreibung ähnlich der NCA alle Beiträge ohne sich überkreuzende Korrelationslinien beinhaltet, den SAW exakt und führt auf die bekannte Selbstkonsistenzgleichung für das effektive Band in der DMFT. Als weitere Approximation ergibt sich aus der Lace-Entwicklung der Memory-2 Walk, dessen Selbstenergie im Gegensatz zum NCW auch nicht-lokale Anteile besitzt. Bei der Analyse der Zahl der Loops einer bestimmten Kettenlänge in Abhängigkeit von der Raumdimension werden Unterschiede zwischen den beiden Näherungen deutlich. Es zeigt sich, dass die Anzahl der M2Ls wie erwartet stets zwischen der exakten Lösung des SALs und dem Random Loop liegt, da durch das endliche Gedächtnis nur ein Teil aller Selbstausschlüsse berücksichtigt werden. Die Zahl aller NCLs liegt unterhalb des exakten Ergebnisses, es findet somit eine Überkorrektur des RLs statt. In zwei Dimensionen erhält man für den NCL bei einigen Kettenlängen sogar eine negative Zahl an Loops. Dies weist darauf hin, dass diese Näherung in niedrigen Raumdimensionen nicht geeignet ist. Im Limes unendlicher Raumdimensionen wird ein generischer Unterschied zu dem Verhalten in endlichen d sichtbar. Während in $d < \infty$ die Zahl der Loops exponentiell mit der Kettenlänge ansteigt, wächst sie in $d \to \infty$ überexponentiell. Dies zeigt sich auch an dem verschwindenden Konvergenzradius der Suszeptibilität in $d \to \infty$. Das beobachtete Skalierungsverhalten ist unabhängig davon, ob es sich um einen Random, Memory-2 oder Non-Crossing Loop handelt. Vergleicht man weiterhin die Zahl an NCLs und M2Ls mit der an Random Loops, so stellt man fest, dass in jeder endlichen Dimension die restringierten Loops langer Kettenlänge nur einen verschwindenden

Bruchteil aller RLs darstellen. In $d \to \infty$ ist deren Anteil jedoch nicht mehr vernachlässigbar, stattdessen geht das Verhältnis gegen die Konstante e^{-1}. Diese Betrachtungen zum mathematischen SAW zeigen die Besonderheiten, die sich im Limes unendlicher Raumdimensionen ergeben, und verdeutlichen die Schwierigkeiten beim Anwenden einer $(d \to \infty)$-Näherung auf echt endliche Dimensionen.

Trotz dieser Eigenarten im Limes $d \to \infty$ wurden mit der DMFT in den letzten Jahren viele Gittermodelle erfolgreich behandelt. Eine allgemeine Formulierung der DMFT, an der durch Vergleich mit den Gleichungen aus der Standard-Störungstheorie die Methode des effektiven Mediums sichtbar wird, gab Kapitel 5. Die aus der Lace-Entwicklung für den SAW folgende Selbstkonsistenzgleichung der DMFT besitzt dieselbe Struktur wie die Coherent Potential Approximation aus der Theorie ungeordneter Systeme. Auch die analoge diagrammatische Herleitung aus allen Beiträgen ohne Überkreuzungen sowie der in beiden Näherungen exakte Grenzfall $d \to \infty$ legen eine enge Verbindung der DMFT und CPA nahe. Es stellt sich in der Tat heraus, dass die CPA eine Spezialisierung der DMFT auf ungeordnete Systeme darstellt. Durch diese Äquivalenz lässt sich auch die nicht-lokale Streumatrix in der CPA exakt bestimmen, die bisher nur durch eine Reihenentwicklung bekannt war.

Ein konkretes Anwenden der DMFT auf physikalische Modelle und die Untersuchung der Lösungseigenschaften ihrer Selbstkonsistenzgleichung erfolgte in den letzten zwei Kapiteln dieser Arbeit. Zunächst wurde in Kapitel 6 das Anderson-Modell im Schrieffer-Wolff-Limes betrachtet. Bei einer klassischen Behandlung des Störstellen-Spins lässt sich die Streumatrix exakt bestimmen und sie wird anschließend in einem äußeren Magnetfeld bei festem Spinbetrag klassisch gemittelt. Durch Ersetzen des ungestörten Propagators durch die effektive Green-Funktion der DMFT kann dieses System direkt auf das Gitter übertragen werden. Somit erhält man ein vereinfachtes Modell, bei dem im Gegensatz zum vollen Anderson-Modell die Streumatrix exakt berechnet und in die Iteration der DMFT-Gleichung einbezogen werden kann. Für die ersten Potenzen des Lorentz-Bandes ist sogar eine analytische Lösung des Problems möglich. Hierbei zeigt sich kein Analytizitätsschnitt der effektiven Green-Funktion in der physikalisch relevanten Halbebene. Auch bei der numerischen Behandlung für das Gauß-förmige Tight-Binding-Band bildet sich in keinem Parameterbereich ein Verzweigungsschnitt aus.

Diese Ergebnisse machen deutlich, dass der von H. Keiter und T. Leuders

gefundene Analytizitätsschnitt im effektiven Band keine allgemeine Besonderheit der DMFT darstellt. H. Keiter und T. Leuders beobachteten den Verzweigungsschnitt in der exakten Lösung der DMFT-Gleichung für das quadrierte Lorentz-Band mit einer modellierten Streumatrix des PAMs. Um der Kritik einiger Autoren an dieser Arbeit nachzugehen wurde zu Beginn des 7. Kapitels die CPA als Spezialfall der DMFT für ungeordnete Systeme untersucht. Bei den analytischen und numerischen Berechnungen stellt sich heraus, dass die Formulierung der CPA über das effektive Band wesentlich bessere Konvergenzeigenschaften als die ursprüngliche Selbstenergiegleichung besitzt. Weiterhin zeigt sich, dass die lokale Streumatrix voll in die Iteration der Selbstkonsistenzgleichung einbezogen werden muss und bei jedem Iterationsschritt die Analytizitätseigenschaften der Green-Funktionen sichergestellt werden müssen.
Diese Ergebnisse ließen sich anschließend auf die XNCA anwenden. Die f-Green-Funktion wurde hierbei zum einen durch zwei Modelle a priori vorgegeben und während der DMFT-Iteration konstant gehalten, zum anderen mit der NCA in jedem Iterationsschritt selbstkonsistent bestimmt. Bei allen numerischen Berechnungen bildet sich ein Analytizitätsschnitt im effektiven Band aus, sobald die scharfe Abrikosov-Suhl-Resonanz an der Fermi-Kante in der Streumatrix anwächst. Somit kann ein artifizielles Auftreten des Verzweigungsschnittes aufgrund zu grober Näherungen oder einer Verletzung der Analytizitätsbedingungen in der Arbeit von H. Keiter und T. Leuders ausgeschlossen werden. Er stellt stattdessen ein echtes Vielteilchenphänomen im PAM dar. Überraschenderweise ergeben sich auch konsistente f-Elektronen-Dichten, selbst wenn das effektive Band einen unphysikalischen Verzweigungsschnitt besitzt. Für die physikalischen Eigenschaften des Systems scheint dieser daher keinen bedeutenden Einfluss zu haben.
Im letzten Teil der Arbeit wurde das effektive Band in der CPA und XNCA durch d^{-1}-Beiträge erweitert, die sich aus der Lace-Entwicklung für den SAW ergeben. Es lassen sich jedoch keinen signifikanten Verbesserungen der beiden Näherungen feststellen. Es zeigt sich ganz im Gegenteil eine deutlich schlechtere Konvergenz der entstehenden Gleichungen. Der in der CPA exakte Limes $c_{\mathrm{imp}} \to 1$ kann ebenfalls nicht mehr reproduziert werden. Dies offenbart die Schwäche solcher reinen Banderweiterungen. Bei diesen findet zwar eine Korrektur des effektiven Bandes statt, eine Verallgemeinerung der lokalen Streumatrix bleibt jedoch aus. Z. B. müssen für eine konsistente d^{-1}-Entwicklung des PAMs in der f-Green-Funktion auch nicht-lokale Anteile berücksichtigt werden. In diesem Fall bricht allerdings das Bild eines SAWs mit einer lokalen Streumatrix gänzlich zusammen.

Diese Stelle bietet auch einen Ansatz für mögliche zukünftige Forschungsprojekte auf diesem Gebiet. Man ist an einer Verallgemeinerung der DMFT interessiert, die das effektive Band und die lokale Streumatrix in symmetrischer Weise behandelt. Die in dieser Arbeit gezeigte Äquivalenz von CPA und DMFT ermöglicht es eine solche Näherung zunächst auf den einfacher zu behandelnden Fall der CPA anzuwenden und anschließend auf das Anderson-Modell zu übertragen.

Die DMFT löst das Gittermodell in unendlichen Raumdimensionen exakt. Aus dem unterschiedlichen Skalierungsverhalten eines SAWs in endlichen und unendlichen Dimensionen ergibt sich allerdings die Frage, wie gut ein solches $(d \to \infty)$-Verfahren die physikalisch relevanten Fälle $d = 2, 3$ beschreiben kann. Eventuell lässt sich eine neue Näherung formulieren, die direkt von endlichen Raumdimensionen ausgeht.

Neben einer Verbesserung des Gitterproblems kann für das Anderson-Modell auch die approximative Lösung des Ein-Störstellen-Systems erweitert werden. In diesem Bereich steht eine numerische Untersuchung der vorgestellten NCA-Verallgemeinerung unmittelbar bevor, die zeigen wird, ob durch die Einbeziehung von Crossing-Beiträgen das Verhalten bei sehr tiefen Temperaturen besser beschrieben werden kann. Es wird auch interessant zu sehen sein, welchen Einfluss die bessere Behandlung des Ein-Störstellen-Modells, die die Summenregeln erfüllt, auf das Lösungsverhalten der XNCA-Gleichung haben wird.

Anhang A

Tight-Binding-Band in *d* Raumdimensionen

So wie in dieser Arbeit werden in vielen theoretischen Modellen die Bandelektronen in der Tight-Binding-Näherung behandelt, die z. B. in [AshMer76] ausführlich vorgestellt wird. Für einen Vergleich der Ergebnisse in verschiedenen Raumdimensionen, insbesondere im Limes $d \to \infty$ [Mül89], gibt daher dieser Abschnitt eine Zusammenfassung der wichtigsten Eigenschaften des Tight-Binding-Propagators in beliebigen d.
Im Tight-Binding-Modell findet ausschließlich ein Hopping der Bandelektronen zwischen benachbarten Gitterplätzen statt, somit erhält man für die Übergangsamplitude t_{ij} und den Hamilton-Operator des ungestörten Bandes

$$t_{ij} = \begin{cases} -t & \text{falls } i, j \text{ n. N.} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{A.1}$$

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma} = -t \sum_{<i,j>,\sigma} c^\dagger_{i\sigma} c_{j\sigma} = \epsilon_k \sum_{k,\sigma} c^\dagger_{k\sigma} c_{k\sigma} \tag{A.2}$$

Mit der Gitterkonstanten $a = 1$ in einem hyperkubischen Gitter, dessen erste Brillouin-Zone sich über den Quader $[-\pi, \pi]^d$ erstreckt, ergibt sich aus der Fourier-Transformation eine Cosinus-förmige Dispersionsrelation.

$$\epsilon_k = -2t \sum_{j=1}^{d} \cos k_j \tag{A.3}$$

Hierbei stellt k_j die j-te Komponente eines reziproken Gittervektors k dar.

Das Quadratmittel der Energie

$$\langle \epsilon_k^2 \rangle = 2dt^2 \tag{A.4}$$

wächst proportional zur Zahl der nächsten Nachbarn in einem d-dimensionalen Gitter. Daher muss, um im Grenzfall $d \to \infty$ eine endliche Energie zu erhalten, das Hopping-Matrixelement t mit der Wurzel der Raumdimension skaliert werden.

$$t \to \tilde{t} = \frac{t}{\sqrt{d}} \tag{A.5}$$

Aus der Dispersionsrelation (A.3) lässt sich der Tight-Binding-Propagator bestimmen.

$$\begin{aligned} g_0(z) &= \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{z - \epsilon_k} \\ &= \frac{1}{N} \sum_k (-i) \int_0^\infty ds\, e^{is(z-\epsilon_k)} \qquad \text{für } \mathfrak{Im}\, z > 0 \\ &= (-i) \int_0^\infty ds\, e^{isz} \prod_{j=1}^d \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_j\, e^{i2s\tilde{t}\cos k_j} \\ &= (-i) \int_0^\infty ds\, e^{isz} \big(J_0(2s\tilde{t})\big)^d \end{aligned} \tag{A.6}$$

Das Integral in der vorletzten Zeile ergibt nach [GraRyz65] die Bessel-Funktion 0. Ordnung J_0, so dass sich $g_0(z)$ als einseitige Laplace-Transformierte der d-ten Potenz von J_0 schreiben lässt. Leider lässt sich dieser Ausdruck nur für $d = 1, 2$ analytisch auswerten [Eco90, GraRyz65].
Für große d kann die Bessel-Funktion nach der inversen Raumdimension entwickelt werden.

$$\big(J_0(2s\tilde{t})\big)^d = e^{-(st)^2}\big(1 - \frac{(st)^4}{4d} + \mathcal{O}(d^{-2})\big) \xrightarrow{d\to\infty} e^{-(st)^2} \tag{A.7}$$

Im Limes $d \to \infty$ ergibt das entstehende Integral die komplexe Fehlerfunktion $w(z) = e^{-z^2}(1 - \mathrm{erf}(-iz))$. Mit der Abkürzung $x = \frac{z}{2t}$ gilt für den Propagator des Tight-Binding-Bandes in unendlichen Raumdimensionen.

$$g_0^{(\infty)}(z) = g_0(z) = \frac{\sqrt{\pi}}{2it}\, w(x) \tag{A.8}$$

Daraus folgt eine Gauß-förmige Zustandsdichte mit Standardabweichung $\sigma^2 = 2t^2$.

$$\rho(z) = -\frac{1}{\pi}\, \mathfrak{Im}\, g_0(z) = \frac{1}{2t\sqrt{\pi}} e^{-(\frac{z}{2t})^2} \tag{A.9}$$

Die Rekursionsgleichungen zur Bestimmung der Ableitung von $w(z)$ lassen sich direkt auf $g_0(z)$ übertragen, mit deren Hilfe alle Ableitungen rekursiv auf den Propagator $g_0(z)$ zurückgeführt werden können.

$$g_0'(z) = -\frac{1}{2t^2}\big(zg_0(z) - 1\big) \tag{A.10a}$$

$$g_0^{(n+1)}(z) = -\frac{1}{2t^2}\big(zg_0^{(n)}(z) + ng_0^{(n-1)}(z)\big) \qquad \text{für } n \geq 1 \tag{A.10b}$$

Mit diesen Gleichungen kann aus (A.7) die erste Korrektur zum unendlich dimensionalen Fall berechnet werden.

$$\begin{aligned} g_0^{(d^{-1})}(z) &= g_0^{(\infty)}(z) - \frac{t^4}{4d}\frac{\partial^4}{\partial z^4}g_0^{(\infty)}(z) \\ &= g_0^{(\infty)}(z) + \frac{1}{d}\Big(\big(-\frac{x^4}{4} + \frac{3x^2}{4} - \frac{3}{16}\big)g_0^{(\infty)}(z) + \frac{1}{2t}\big(\frac{x^3}{4} - \frac{5x}{8}\big)\Big) \end{aligned} \tag{A.11}$$

Die folgende Abbildung stellt die Zustandsdichte des Tight-Binding-Bandes in verschiedenen Dimensionen dar.

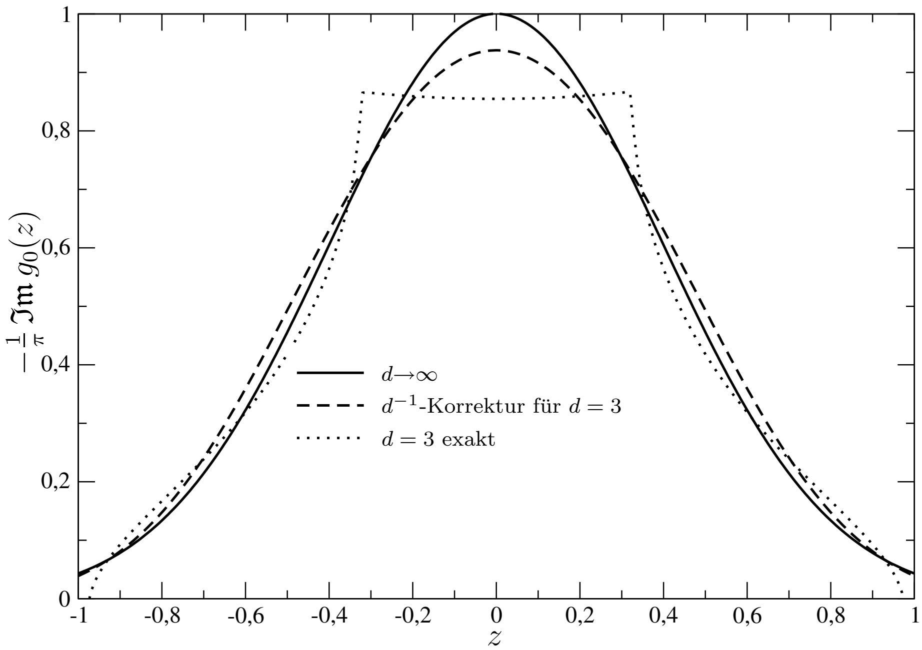


Abbildung A.1 Tight-Binding-Dichte für $t = (2\sqrt{\pi})^{-1} \approx 0.282$ eV

Man erkennt, dass die d^{-1}-Korrektur die exakte Dichte für $d = 3$ nur unzureichend approximiert. Die für niedrige Dimensionen charakteristischen van-Hove-Singularitäten können nicht reproduziert werden. Weiterhin gibt es in den Flanken unphysikalische Bereiche, in denen die korrigierte Dichte negativ wird.

Die Propagatoren

$$g_{xy}(z) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{e^{ik(x-y)}}{z - \epsilon_k} \tag{A.12}$$

die die Bewegung eines Bandelektrons vom Gitterplatz x nach y beschreiben, lassen sich in analoger Weise berechnen.

$$g_{xy}(z) = (-i) \int_0^\infty ds\, e^{isz} \prod_{j=1}^{d} i^{|x_j - y_j|}\, J_{|x_j-y_j|}(2s\tilde{t}) \tag{A.13}$$

Eine Bessel-Funktion n-ter Ordnung wird hierbei mit

$$J_n(z) = \frac{i^{-n}}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk\, e^{i(z \cos k + nk)} \tag{A.14}$$

bezeichnet, deren führender Term in der Reihenentwicklung durch folgenden Ausdruck gegeben ist.

$$J_n(\frac{2z}{\sqrt{d}}) = \frac{1}{\sqrt{d}^n}\, e^{-\frac{z^2}{d}}\, \frac{z^n}{n!} + \mathcal{O}(\frac{1}{\sqrt{d}^{n+2}}) \tag{A.15}$$

$\Delta(x,y)$ beschreibt die minimale Anzahl an nächsten-Nachbar-Sprüngen von der Site x nach y, dies entspricht der Betragssummennorm des Differenzvektors.

$$\Delta(x,y) = \sum_j |x_j - y_j| \tag{A.16}$$

Nach Einsetzen von (A.15) in (A.13) und partieller Integration erhält man für den gesuchten Propagator

$$g_{xy}(z) = \frac{1}{\sqrt{d}^{\Delta(x,y)}}\, \frac{t^{\Delta(x,y)}}{\prod_j |x_j - y_j|!}\, \frac{\partial^{\Delta(x,y)}}{\partial z^{\Delta(x,y)}} g_0(z) + \mathcal{O}(\frac{1}{\sqrt{d}^{\Delta(x,y)+2}}) \tag{A.17}$$

Hierbei ist besonders das dimensionale Skalierungsverhalten mit der inversen Wurzel aus der Raumdimension von g_{xy} hervorzuheben, das die Grundlage für die Untersuchungen im Limes $d \to \infty$ darstellt.

$$g_{xy}(z) \sim \sqrt{d}^{-\Delta(x,y)} \tag{A.18}$$

Eine exakte Berechnung aus (A.13) ist nur für den Propagator zu einer nächsten-Nachbar-Site g_{nN}, der in der d^{-1}-Erweiterung der XNCA benötigt wird, möglich.

$$g_{nN}(z) = \frac{1}{2t\sqrt{d}}\big(1 - zg(z)\big) = \frac{t}{\sqrt{d}}\, g_0'(z) \tag{A.19}$$

Anhang B

Erzeugendes Funktional des Anderson-Modells

G. Baym und L. P. Kadanoff entwickelten 1961 einen Formalismus, der es ermöglicht aus einem erzeugenden Funktional Φ durch Funktionalableitung die Selbstenergie zu bestimmen [BayKad61, Bay62]. Ein solches Funktional besteht in einer diagrammatischen Beschreibung aus allen irreduziblen Anteilen mit renormalisierten Green-Funktionen. Die Wahl der berücksichtigten Diagramme bestimmt eine konkrete Näherung, die aufgrund ihrer Konstruktion aus Φ die Erhaltungssätze erfüllt.
In diesem Anhang wird das erzeugende Funktional für das Single-Impurity-Anderson-Modell im Limes $U \to \infty$ hergeleitet und die Besonderheiten aufgezeigt, die aufgrund der Störungstheorie nach der Hybridisierung entstehen.

Führt man im SIAM eine Kopplungskonstante g ein, so lässt sich die Zustandssumme aus dem Erwartungswert der Hybridisierung berechnen.

$$\mathcal{Z} = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta(H_0 + gH_V)} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial g} \ln \mathcal{Z} = -\beta \langle H_V \rangle_0 \tag{B.1}$$

Nach Einsetzen des expliziten Ausdrucks für H_V ergibt sich aus diesem Erwartungswert eine Berechnung der gemischten $c\bar{f}$- bzw. $\bar{f}c$-Green-Funktionen.

$$\langle H_V \rangle_0 = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \tilde{V} \sum_{k,\sigma} \left(\ll c_{k\sigma}, \bar{f}_\sigma^\dagger \gg\!(i\omega_n) + \ll \bar{f}_\sigma, c_{k\sigma}^\dagger \gg\!(i\omega_n) \right) \tag{B.2}$$

Wie bei der Herleitung der Streumatrix in Abschnitt 2.2 können $\ll c_{k\sigma}, \bar{f}_\sigma^\dagger \gg\!(i\omega_n)$ und $\ll \bar{f}_\sigma, c_{k\sigma}^\dagger \gg\!(i\omega_n)$ mithilfe der Bewegungsgleichungen auf die f-Green-Funktion zurückgeführt werden.

$$\ll c_{k\sigma}, \bar{f}_\sigma^\dagger \gg\!(i\omega_n) = \ll \bar{f}_\sigma, c_{k\sigma}^\dagger \gg\!(i\omega_n) = g\tilde{V} g_k(i\omega_n) G_f(i\omega_n) \tag{B.3}$$

Damit erhält man für den gesuchten Erwartungswert folgenden Ausdruck, der durch Einführen des Bandpropagators $F(i\omega_n)$ übersichtlich geschrieben werden kann.

$$\langle H_V\rangle_0 = \frac{2}{\beta}\frac{1}{g}\sum_{\omega_n}\underbrace{\frac{g^2\,|V|^2}{N}\sum_{k,\sigma} g_k(i\omega_n)}_{=F(i\omega_n)}\,G_f(i\omega_n) \tag{B.4}$$

Die Zustandssumme lässt sich daraus durch eine Kopplungskonstantenintegration gewinnen.

$$\mathcal{Z}_f - \mathcal{Z}_{f0} = -2\beta\int\limits_0^1 \frac{dg}{g}\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n} F(i\omega_n)\mathcal{Z}_f G_f(i\omega_n) \tag{B.5}$$

Ein Zusammenhang mit den Propagatoren $P_0(z)$ bzw. $P_f(z)$ und den Selbstenergien $\Sigma_0(z)$ bzw. $\Sigma_f(z)$ lässt sich auf diagrammatischem Wege finden. Hierzu verwendet man eine alternative Formulierung der in Kapitel 2 angegebenen Diagrammregeln, die die Band-Green-Funktion $F(i\omega_n)$ benutzt.

3'. Bezeichne unter Berücksichtigung der Spinerhaltung alle halbkreisförmigen Bandelektronenlinien mit imaginären Frequenzen $i\omega_n$ und Spinindices σ.

4'. Anstelle der Fermi-Funktionen liefert jede Bandelektronenlinie mit Indices $(i\omega_n, \sigma)$ einen Faktor $F(i\omega_n)$. Die Energienenner ergeben sich analog zu 4. aus den Energien der Zwischenzustände.

5'. Multipliziere mit $(-)^{c+a}$, dabei gibt c die Zahl der Überkreuzungen und a die Zahl hinauflaufender Bandelektronenlinien an. Die Summe über die internen Freiheitsgrade wird durch Frequenzsummationen $\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n}$ ersetzt. Das abschließende Konturintegral umschließt wiederum alle Singularitäten des Integranden.

Die Regeln für die f-Green-Funktion folgen hieraus analog zu Abschnitt 2.3.2.

Zur weiteren Umformung von (B.5) zerlegt man $\mathcal{Z}_f G_f(i\omega_n)$ nach obigen Diagrammregeln und zieht die Integration über z heraus. Im Vergleich zur Selbstenergie besitzt die f-Green-Funktion eine äußere Bandelektronenlinie mit Energie $i\omega_n$, über die nicht summiert wird. Diese Summation und der fehlende Faktor $F(i\omega_n)$ wird in (B.5) hinzugefügt und es ergibt sich ein Selbstenergieanteil zu $\Sigma_0(z)$. Allerdings enthält $\mathcal{Z}_f G_f(i\omega_n)$ einen Propagator mehr als

das korrespondierende $\Sigma_0(z)$, der noch als zusätzlicher Faktor berücksichtigt werden muss.
Diese Überlegungen lassen sich in gleicher Weise für $\Sigma_f(z)$ und $P_f(z)$ anstellen und man erhält

$$\frac{1}{\beta}\sum_{\omega_n} F(i\omega_n)\mathcal{Z}_f G_f(i\omega_n) = \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z} P_0(z)\Sigma_0(z) \tag{B.6a}$$

$$= \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z} N_f P_f(z)\Sigma_f(z) \tag{B.6b}$$

Für eine Darstellung der Zustandssumme wie in (2.34) lassen sich diese beiden Ausdrücke symmetrisieren.

$$\mathcal{Z}_f - \mathcal{Z}_{f0} = -2\beta \int_0^1 \frac{dg}{g} \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z} P_0(z)\Sigma_0(z) \tag{B.7a}$$

$$= -2\beta \int_0^1 \frac{dg}{g} \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z} N_f P_f(z)\Sigma_f(z) \tag{B.7b}$$

$$= -\beta \int_0^1 \frac{dg}{g} \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z}\big(P_0(z)\Sigma_0(z) + N_f P_f(z)\Sigma_f(z)\big) \tag{B.7c}$$

Das erzeugende Funktional wird im weiteren aus (B.7a) berechnet und in $\Sigma_0(z)$ die explizite Abhängigkeit von der Kopplungskonstanten abgespalten.

$$\Sigma_0(z) = \sum_{n=1}^{\infty} g^{2n}\Sigma_0^{(2n)}(z) \tag{B.8}$$

In der Zustandssumme hängt $\Sigma_0^{(2n)}(z)$ nur noch implizit über die Propagatoren $P_0(z)$ und $P_f(z)$ von g ab.

$$\mathcal{Z}_f - \mathcal{Z}_{f0} = -2\beta \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z} \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^1 \frac{dg}{g} g^{2n} P_0(z)\Sigma_0^{(2n)}(z) \tag{B.9}$$

An dieser Stelle kann über die Kopplungskonstante partiell integriert werden.

$$\int_0^1 \frac{dg}{g} g^{2n} P_0(z)\Sigma_0^{(2n)}(z)$$

$$= \frac{1}{2n} g^{2n} P_0(z)\Sigma_0^{(2n)}(z)\Big|_0^1 - \frac{1}{2n}\int_0^1 dg\, g^{2n} \frac{\partial}{\partial g} P_0(z)\Sigma_0^{(2n)}(z) \tag{B.10}$$

Bei der Berechnung der Ableitung im zweiten Summanden sind lediglich $P_0(z)$ und $P_f(z)$ von g abhängig.

$$\frac{\partial}{\partial g} = \frac{\partial P_0(z)}{\partial g}\frac{\partial}{\partial P_0(z)} + \frac{\partial P_f(z)}{\partial g}\frac{\partial}{\partial P_f(z)} \tag{B.11}$$

Da nach der z-Integration die beiden Darstellungen (B.7a) und (B.7b) äquivalent sind, wird bei der partiellen Ableitung nach $P_0(z)$ bzw. $P_f(z)$ jeweils derjenige Ausdruck mit demselben Propagator gewählt. Weiterhin mache man sich klar, dass $\Sigma_0^{(2n)}(z)$ bzw. $\Sigma_f^{(2n)}(z)$ den Propagator $P_0(z)$ bzw. $P_f(z)$ $(n-1)$-mal enthält. Es gilt somit

$$\frac{\partial}{\partial g}P_0(z)\Sigma_0^{(2n)}(z) = n\Sigma_0^{(2n)}(z)\frac{\partial}{\partial g}P_0(z) + nN_f\Sigma_f^{(2n)}(z)\frac{\partial}{\partial g}P_f(z) \tag{B.12}$$

Anschließend wird die Reihenentwicklung (B.8) rückgängig gemacht und die Definitionen der Selbstenergien eingesetzt. Das Integral über g im zweiten Term von (B.10) lässt sich so auswerten.

$$\int_0^1 dg\, g^{2n}\big(z - P_0^{-1}(z)\big)\frac{\partial}{\partial g}P_0(z) = zP_0(z) - 1 - \ln zP_0(z) \tag{B.13a}$$

$$\int_0^1 dg\, g^{2n}\big(z - \epsilon_f - P_f^{-1}(z)\big)\frac{\partial}{\partial g}P_f(z) = (z-\epsilon_f)P_f(z) - 1 - \ln(z-\epsilon_f)P_f(z) \tag{B.13b}$$

Für den f-Anteil der Zustandssumme des SIAMs ergibt sich daraus folgender Ausdruck.

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}_f - \mathcal{Z}_{f0} = &-\beta\oint\frac{dz}{2\pi i}\,e^{-\beta z}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n}P_0(z)\Sigma_0^{(2n)}(z)\\ &+\beta\oint\frac{dz}{2\pi i}\,e^{-\beta z}\big(zP_0(z) - 1 - \ln zP_0(z)\big)\\ &+\beta\oint\frac{dz}{2\pi i}\,e^{-\beta z}N_f\big((z-\epsilon_f)P_f(z) - 1 - \ln(z-\epsilon_f)P_f(z)\big)\end{aligned} \tag{B.14}$$

Aus dem ersten Summanden lässt sich direkt das erzeugende Funktional Φ ablesen, die anderen Darstellungen ergeben sich hierbei aus denselben Rechnungen für (B.7b) und (B.7c) bzw. (B.5).

$$\Phi = \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} P_0(z) \Sigma_0^{(2n)}(z) \tag{B.15a}$$

$$= \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} N_f P_f(z) \Sigma_f^{(2n)}(z) \tag{B.15b}$$

$$= \oint \frac{dz}{2\pi i}\, e^{-\beta z} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2n} \big(P_0(z) \Sigma_0^{(2n)}(z) + N_f P_f(z) \Sigma_f^{(2n)}(z) \big) \tag{B.15c}$$

$$= \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} F(i\omega_n) \mathcal{Z}_f G_f^{(2n)}(i\omega_n) \tag{B.15d}$$

Die gesuchten Selbstenergien können durch eine Funktionalableitung von Φ nach den Propagatoren gewonnen werden.

$$\frac{\delta \Phi}{\delta P_0(z)} = \frac{e^{-\beta z}}{2\pi i}\, \Sigma_0(z) \tag{B.16a}$$

$$\frac{\delta \Phi}{\delta P_f(z)} = \frac{e^{-\beta z}}{2\pi i}\, N_f \Sigma_f(z) \tag{B.16b}$$

Der hier vorgestellte Zugang zum SIAM erfüllt ebenfalls die Stationaritätsbedingungen für die Zustandssumme.

$$\frac{\delta\big(\mathcal{Z}_f - \mathcal{Z}_{f0}\big)}{\delta P_0(z)} = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\delta\big(\mathcal{Z}_f - \mathcal{Z}_{f0}\big)}{\delta P_f(z)} = 0 \tag{B.17}$$

Literaturverzeichnis

[AbrSte72] M. Abramowitz und I.A. Stegun: *Handbook of Mathematical Functions*. Dover Publications, 1972.

[And58] P.W. Anderson: *Absence of diffusion in certain random lattices*. Physical Review **109** (1958) 1492.

[And61] P.W. Anderson: *Localized magnetic states in metals*. Physical Review **124** (1961) 41.

[AshMer76] N.W. Ashcroft und N.D. Mermin: *Solid State Physics*. Holt, Rinehart and Winston, 1976.

[Bau03] K. Baumgartner: *to be published*. Dissertation, Universität Dortmund, 2003.

[Bay62] G. Baym: *Self-consistent approximations in many-body systems*. Physical Review **127** (1962) 1391.

[BayKad61] G. Baym und L.P. Kadanoff: *Conservation laws and correlation functions*. Physical Review **124** (1961) 287.

[Bic87] N.E. Bickers: *Review of techniques in the large-N expansion for dilute magnetic alloys*. Reviews of Modern Physics **59** (1987) 845.

[BicCoxWil87] N.E. Bickers, D.L. Cox und J.H. Wilkins: *Self-consistent large-N expansion for normal-state properties of dilute magnetic alloys*. Physical Review **B 36** (1987) 2036.

[Blo65] C. Bloch: *Diagram expansions in quantum statistical mechanics*. In: J. de Boer und G.E. Uhlenbeck (Herausgeber): *Studies in Statistical Mechanics*, Band III, Seite 1. North-Holland Publishing Company, 1965.

[BraMie89] U. Brandt und C. Mielsch: *Thermodynamics and correlation functions of the Falicov-Kimball model in large dimensions.* Zeitschrift für Physik **B 75** (1989) 365.

[BraMie90] U. Brandt und C. Mielsch: *Thermodynamics of the Falicov-Kimball model in large dimensions II.* Zeitschrift für Physik **B 79** (1990) 295.

[BraMie91] U. Brandt und C. Mielsch: *Free energy of the Falicov-Kimball model in large dimensions.* Zeitschrift für Physik **B 82** (1991) 37.

[Eco90] E.N. Economou: *Green's Functions in Quantum Physics.* Springer-Verlag, 1990.

[EllKruLea74] R.J. Elliot, J.A. Krumhansl und P.L. Leath: *The theory and properties of randomly disordered crystals and related physical systems.* Reviews of Modern Physics **46** (1974) 465.

[FalKim69] L.M. Falicov und J.C. Kimball: *Simple model for semiconductor-metal transitions: $Sm\,B_6$ and transition-metal oxides.* Physical Review Letters **22** (1969) 997.

[FetWal71] A.L. Fetter und J.D. Walecka: *Quantum Theory of Many-Particle Systems.* McGraw-Hill Book Company, 1971.

[FulKelZwi88] P. Fulde, J. Keller und G. Zwicknagl: *Theory of Heavy Fermion systems.* In: H. Ehrenreich und D. Turnbull (Herausgeber): *Solid State Physics*, Band 41, Seite 1. Academic Press, 1988.

[GeoKotKraRoz96] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth und M. Rozenberg: *The local impurity self-consistent approximation to strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions.* Reviews of Modern Physics **68** (1996) 13.

[GraRyz65] I.S. Gradshteyn und I.M. Ryzhik: *Table of Integrals, Series, and Products.* Academic Press, 1965.

[Gre87] N. Grewe: *A theory for the Anderson lattice.* Zeitschrift für Physik **B 67** (1987) 323.

[GreKei81] N. Grewe und H. Keiter: *Diagrammatic approach to the intermediate-valence compounds.* Physical Review **B 24** (1981) 4420.

[HauKirKroWöl01] K. Haule, S. Kirchner, J. Kroha und P. Wölfle: *Anderson impurity model at finite Coulomb interaction U: generalized non-crossing approximation.* Physical Review **B 64** (2001) 155111.

[Hew93] A.C. Hewson: *The Kondo problem to Heavy Fermions.* Cambridge University Press, 1993.

[HülQin94] G. Hülsenbeck und Q. Qin: *Anderson model: Lattice effects in high dimensions.* Solid State Communications **90** (1994) 195.

[HorZla84] B. Horvatić und V. Zlatić: *Magnetic field effects for the asymmetric Anderson Hamiltonian.* Physical Review **B 30** (1984) 6717.

[Hub63] J. Hubbard: *Electron correlations in narrow energy bands.* Proceedings of The Royal Society **A 276** (1963) 238.

[Hub64a] J. Hubbard: *Electron correlations in narrow energy bands II. The degenerate band case.* Proceedings of The Royal Society **A 277** (1964) 237.

[Hub64b] J. Hubbard: *Electron correlations in narrow energy bands III. An improved solution.* Proceedings of The Royal Society **A 281** (1964) 401.

[Hub65] J. Hubbard: *Electron correlations in narrow energy bands IV. The atomic representation.* Proceedings of The Royal Society **A 285** (1965) 542.

[Ina79] S. Inagaki: *Ground state of the asymmetric Anderson Model.* Progress in Theoretical Physics **62** (1979) 1441.

[Kei82] H. Keiter: *On the zero-bandwidth limit in diagrammatic perturbation technique for a model of an intermediate valent impurity.* Zeitschrift für Physik **B 49** (1982) 209.

[KeiCzy83] H. Keiter und G. Czycholl: *Integral equation studies for f-electron energies of rare-earth ions in a metallic compound.* Journal of Magnetism and Magnetic Materials **31-34** (1983) 477.

[KeiKim70] H. Keiter und J.C. Kimball: *Perturbation technique for the Anderson Hamiltonian.* Physical Review Letters **25** (1970) 672.

[KeiKim71] H. Keiter und J.C. Kimball: *Diagrammatic perturbation technique for the Anderson Hamiltonian, and relation to the s-d exchange Hamiltonian.* International Journal of Magnetism **1** (1971) 233.

[KeiLeu00] H. Keiter und T. Leuders: *Dynamical mean-field theory as a random loop problem.* Europhysics Letters **49** (2000) 801.

[KeiLeuMelSch95] H. Keiter, T. Leuders, Ch. Melsheimer und P. Schönenberg: *Comparison of various approaches to the Anderson lattice.* Physica **B 206-207** (1995) 168.

[KeiMor84] H. Keiter und G. Morandi: *Thermodynamic perturbation theory for systems with strong local correlations.* Physics Reports **109** (1984) 227.

[Kon64] J. Kondo: *Resistance minimum in dilute magnetic alloys.* Progress of Theoretical Physics **32** (1964) 37.

[KroWölCos97] J. Kroha, P. Wölfle und T.A. Costi: *Unified description of fermi and non-fermi liquid behavior in a conserving slave boson approximation for strongly correlated impurity models.* Physical Review Letters **79** (1997) 261.

[Kur83] Y. Kuramoto: *Self-consistent perturbation theory for dynamics of valence fluctuations: I. Single-site theory.* Zeitschrift für Physik **B 53** (1983) 37.

[Kur85] Y. Kuramoto: *Self-consistent perturbation theory for valence-fluctuating lattice systems.* In: T. Kasuya und T. Saso (Herausgeber): *Theory of Heavy Fermions and Valence Fluctuations*, Proceedings of the Eighth Taniguchi Symposium 1985, Seite 152. Springer-Verlag, 1985.

[Lan66] D.C. Langreth: *Friedel sum rule for Anderson's model of localized impurity states.* Physical Review **150** (1966) 516.

[LanAmb61] J.S. Langer und V. Ambegaokar: *Friedel sum rule for a system of interacting electrons.* Physical Review **121** (1961) 1090.

[LanLif88] L.D. Landau und E.M. Lifschitz: *Lehrbuch der theoretischen Physik III: Quantenmechanik.* Akademie-Verlag Berlin, 1988.

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

[MadSla96] N. Madras und G. Slade: *The Self-Avoiding Walk.* Birkhäuser, 1996.

[MarSch59] P.C. Martin und J. Schwinger: *Theory of many-particle systems. I.* Physical Review **115** (1959) 1342.

[MetVol89] W. Metzner und D. Vollhardt: *Correlated lattice fermions in $d = \infty$ dimensions.* Physical Review Letters **62** (1989) 324.

[Mül84] E. Müller-Hartmann: *Self-consistent perturbation theory of the Anderson model: Ground state properties.* Zeitschrift für Physik **B 57** (1984) 281.

[Mül89] E. Müller-Hartmann: *Correlated fermions on a lattice in high dimensions.* Zeitschrift für Physik **B 74** (1989) 507.

[Nol02] W. Nolting: *Grundkurs theoretische Physik, Band 7: Viel-Teilchen-Theorie.* Springer-Verlag, 2002.

[Ott98] D. Otto: *Das Excluded-Volume Problem in hohen Raumdimensionen.* Hauptpraktikumsbericht, Universität Dortmund, 1998.

[Ott99] D. Otto: *Störstellen-Mittelungen in hochkorrelierten Systemen.* Diplomarbeit, Universität Dortmund, 1999.

[PruMetVol01] Th. Pruschke, W. Metzner und D. Vollhardt: *On the analyticity of solutions in the dynamical mean-field theory.* Journal of Physics: Condensed Matter **13** (2001) 9455.

[Ric80] G. Rickayzen: *Green's Functions and Condensed Matter.* Academic Press, 1980.

[SchCzy89a] H. Schweitzer und G. Czycholl: *Second order U-perturbation approach to the Anderson lattice model in high dimensions.* Solid State Communications **69** (1989) 171.

[SchCzy89b] H. Schweitzer und G. Czycholl: *U-perturbation treatment of Heavy Fermion systems.* Zeitschrift für Physik **B 74** (1989) 303.

[SchCzy90] H. Schweitzer und G. Czycholl: *The second order U-perturbation approach to the Anderson lattice model in one, two and three dimensions.* Solid State Communications **74** (1990) 735.

[SchWol66] J.R. Schrieffer und P.A. Wolff: *Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians.* Physical Review **149** (1966) 491.

[Sok95] A. Sokal: *Monte carlo methods for the self-avoiding walk.* In: K. Binder (Herausgeber): *Monte Carlo and Molecular Dynamics Simulations in Polymer Science.* Oxford University Press, 1995.

[Sov67] P. Soven: *Coherent-potential model of substitutional disordered alloys.* Physical Review **156** (1967) 809.

[Sov69] P. Soven: *Contribution to the theory of disordered alloys.* Physical Review **178** (1969) 1136.

[Ste82] K.W.H. Stevens: *Diagrammatic Expansions in I.V.: Exact or approximate?* In: P. Wachter und H. Boppart (Herausgeber): *Valence Instabilities*, Seite 35. North-Holland Publishing Company, 1982.

[VarYaf76] C.M. Varma und Y. Yafet: *Magnetic susceptibility of mixed-valence rare-earth compounds.* Physical Review **B 13** (1976) 2950.

[VelKirEhr68] B. Velický, S. Kirkpatrick und H. Ehrenreich: *Single-site approximations in the electronic theory of simple binary alloys.* Physical Review **175** (1968) 747.

[Wol97] S. Wolfram: *Das Mathematica-Buch.* Addison-Wesley, 1997.

[Zen51] C. Zener: *Interaction between the d shells in the transition metals.* Physical Review **81** (1951) 440.

An dieser Stelle möchte mich bei all denen ganz herzlich bedanken, die zur Durchführung und zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Mein besonderer Dank gilt hierbei Herrn Prof. Dr. Hellmut Keiter für die interessante Themenstellung sowie seine ständige Bereitschaft mich mit Ideen und Ratschlägen zu unterstützen.

Herrn Dipl.-Phys. Klaus Baumgartner danke ich für die zahlreichen anregenden Diskussionen über das Anderson-Modell, aber auch über andere Dinge des täglichen Lebens.

Weiterer Dank gilt Herrn Dr. Kay Hamacher für die lebendige Atmosphäre während unserer gemeinsamen Zeit in einem Büro.

Bei allen weiteren Mitgliedern des Lehrstuhls „Theoretische Physik 1“ bedanke ich mich für das überaus angenehme Arbeitsklima und ihre stetige Hilfsbereitschaft bei allen großen und kleinen Problemen.

Nicht vergessen möchte ich auch alle Freunde und Bekannte außerhalb der Universität, die mir immer zur Seite standen und mit denen ich Kraft für weitere Aufgaben sammeln konnte.

Zuletzt danke ich meinen Eltern von ganzem Herzen, die mich während meiner gesamten Ausbildung in allerhöchstem Maße unterstützt haben.