

# Entwicklung neuer Methoden zur Untersuchung des Anderson-Modells

Dissertation

zur Erlangung des Doktorgrades  
der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)  
der Naturwissenschaftlichen Fakultät II – Physik  
der Universität Regensburg

vorgelegt von

**Ralf Bulla**

aus Eberbach

1994

Promotionsgesuch eingereicht am: 16. 3. 1994

Die Arbeit wurde angeleitet von Prof. Dr. Joachim Keller.

Prüfungsausschuß:	Vorsitzender:	Prof. Dr. W. Schoepe
	1. Gutachter:	Prof. Dr. J. Keller
	2. Gutachter:	Prof. Dr. W. Weise
	Weiterer Prüfer:	Prof. Dr. I. Morgenstern

Kolloquiumstermin: 10. 05. 1994

*Büchlein, Büchlein an der Wand  
wer ist der Klügste im ganzen Land?  
Der Doktor Doll, der Daktor Dall,  
der Diktor Dill, der Duktor Dull,  
das ist der Klügste im Land.  
Büchlein, Büchlein,  
das sollst Du mir büßen.*

Martin Walser





# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Das Störstellen-Anderson-Modell</b>	<b>6</b>
2.1	Experimentelle Resultate . . . . .	6
2.2	Das Modell nach Anderson . . . . .	12
2.3	Überblick über bisherige Arbeiten . . . . .	17
<b>3</b>	<b>Funktionalintegrale</b>	<b>25</b>
3.1	Funktionalintegrale — eine Einführung . . . . .	25
3.2	Funktionalintegrale für Operatoren in zweiter Quantisierung . . . . .	27
3.3	Lösung von Funktionalintegralen im Frequenzraum . . . . .	29
<b>4</b>	<b>Die Theorie und erste einfache Anwendungen</b>	<b>33</b>
4.1	Die Theorie von Weller . . . . .	35
4.2	Anwendung auf das Einzustandsmodell . . . . .	41
4.3	Anwendung auf ein Zweizustandsmodell . . . . .	46
4.4	Weitere Anwendungen . . . . .	51
4.5	Zur Berechnung von $G(t)$ . . . . .	53
<b>5</b>	<b>Das Störstellen-Anderson-Modell — Green-Funktionen</b>	<b>55</b>
5.1	Wirkung des $U = \infty$ Störstellen-Anderson-Modells . . . . .	56
5.2	Numerische Berechnung von $G(\tau)$ . . . . .	59

---

5.3	Berechnung der Spektralfunktion . . . . .	67
5.4	Vergleich mit NCA-Resultaten . . . . .	75
5.5	Weitere Ansatzpunkte . . . . .	78
<b>6</b>	<b>Das Störstellen-Anderson-Modell — Suszeptibilität</b>	<b>83</b>
6.1	Funktionalintegral mit zusätzlichem Magnetfeld . . . . .	84
6.2	Numerische Ergebnisse . . . . .	84
<b>7</b>	<b>Renormierungsgruppentheorie für das Störstellen-Anderson-Modell</b>	<b>87</b>
7.1	Die Theorie . . . . .	88
7.2	Berechnung der Spektralfunktion . . . . .	94
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung, Diskussion und Ausblick</b>	<b>100</b>
<b>A</b>	<b>Thermodynamische Green-Funktion und Spektralfunktion</b>	<b>103</b>
<b>B</b>	<b>Rechenregeln für Grassmann-Variable</b>	<b>108</b>
<b>C</b>	<b>Nebenrechnungen zu Kapitel 4.1</b>	<b>111</b>
<b>D</b>	<b>Nebenrechnungen zu Kapitel 7</b>	<b>114</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>120</b>
	<b>Dank</b>	<b>126</b>

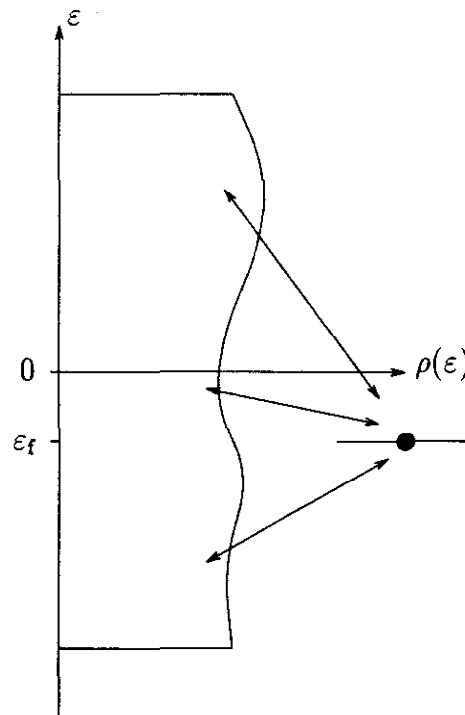
# 1 Einleitung

Die elektronischen Eigenschaften eines Festkörpers werden durch zahlreiche Wechselwirkungen beeinflusst, von denen die Coulombwechselwirkung der Elektronen untereinander von sehr unterschiedlicher Bedeutung sein kann. In vielen Substanzen (z.B. Metallen) wird aufgrund der großen Ausdehnung der elektronischen Wellenfunktionen die Coulombwechselwirkung so weit abgeschirmt, daß diese leicht störungstheoretisch berücksichtigt werden kann.

In den letzten Jahrzehnten sind jedoch einige Klassen von Festkörpern entdeckt worden, in denen lokalisierte Elektronenzustände die physikalischen Eigenschaften wesentlich mitbestimmen. Diese Lokalisierung hat einen hohen Wert der lokalen Coulombwechselwirkung  $U$  zur Folge, der in manchen Fällen alle anderen Energieskalen des Systems übertreffen kann und die Anwendung von Störungstheorien in  $U$  unmöglich macht. Unter diesen Bedingungen wird ein Festkörper als „stark korreliertes Elektronensystem“ bezeichnet.

Eine solche Klasse bilden nichtmagnetische Metalle mit magnetischen Verunreinigungen wie das System  $\text{Cu}_{1-x}\text{Fe}_x$  oder  $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Cu}_2\text{Si}_2$  ( $x$ : Verunreinigungskonzentration), zu deren Beschreibung von Anderson [And61] das Störstellen-Anderson-Modell (siehe Abb. 1.1) vorgeschlagen wurde. Hier erfahren zwei Elektronen genau dann die hohe lokale Coulombabstoßung, wenn sie denselben Störstellenplatz besetzen.

Befinden sich die magnetischen Verunreinigungen in jeder Einheitszelle eines Kristallgitters, so kann sich ein System Schwerer Fermionen ausbilden, welches durch eine für kleine Temperaturen extrem erhöhte effektive Masse der Ladungsträger charakterisiert ist. Beispiele für Substanzen dieser Klasse sind die Cer-Verbindungen  $\text{CeCu}_6$  und  $\text{CeCu}_2\text{Si}_2$  sowie die Uran-Verbindung  $\text{UPt}_3$ , die zum Teil neuartige Effekte aufweisen, wie ungewöhnliche Supraleitungszustände und die Koexistenz von Supraleitung und magnetischer Ordnung. Als theoretisches Modell zur Untersu-



**Abb. 1.1:** Im Störstellen-Anderson-Modell hybridisiert das lokalisierte Niveau (Energie  $\varepsilon_f$ ) mit den Elektronen des Leitungsbandes (Zustandsdichte  $\rho(\varepsilon)$ ). Zwei Elektronen in diesem Niveau erfahren dabei die starke Coulombabstoßung.

chung der Systeme Schwerer Fermionen wird üblicherweise das periodische Anderson-Modell — die Erweiterung des Störstellen-Anderson-Modells auf das Gitter — verwendet.

Seit der Entdeckung der Hochtemperatursupraleitung durch Bednorz und Müller [Bed86] gelten zahlreiche Untersuchungen den in all diesen Supraleitern vorhandenen  $\text{CuO}_2$ -Schichten. Quanten-Monte-Carlo-Rechnungen für das Drei-Band-Hubbard-Modell [Dop92] zeigten, daß die konsistente Beschreibung einer Reihe von Eigenschaften im normalleitenden Zustand mit einem Parametersatz möglich ist, der starke lokale Coulombwechselwirkungen enthält. Damit gehören die  $\text{CuO}_2$ -Schichten ebenfalls zu den stark korrelierten Elektronensystemen. Eine Erklärung für den Mechanismus, der für das Einsetzen der Supraleitung verantwortlich ist, ist allerdings noch nicht in Sicht.

Für all diese Substanzen sind Erfolge der Theorie immer nur in einem Teilbereich möglich. So sind z.B. die Quanten-Monte-Carlo-Verfahren oft nicht in der Lage, zu hinreichend tiefen Temperaturen vorzudringen, und die exakte Lösung von Gitter-

---

modellen durch den Bethe-Ansatz bleibt auf eindimensionale Probleme beschränkt.

Daraus erklärt sich die Notwendigkeit, weitere theoretische Konzepte zu entwickeln und zu untersuchen, in der Hoffnung, dem Verständnis der stark korrelierten Elektronensysteme einen Schritt näher zu kommen.

Zwei neue Ansatzpunkte sind Gegenstand dieser Arbeit. Zum einen wird eine von Weller [Wel90] entwickelte Funktionalintegraltechnik verwendet, die den Fall  $U \rightarrow \infty$  exakt berücksichtigt. Dies geschieht bereits in der Herleitung des Funktionalintegrals und muß nicht (wie bei Slave-boson-Methoden) durch eine  $\delta$ -Funktion im Integralmaß gewährleistet werden.

Zum anderen wird das von Wilson [Wil75] und Krishna-murthy et al. [Kri80] für das Störstellen-Anderson-Modell konzipierte Renormierungsgruppenverfahren auf eine energieabhängige Kopplung zwischen dem Störstellenelektron und den Elektronen des Leitungsbandes verallgemeinert. Dieser Punkt sowie die Berechnung dynamischer Eigenschaften mit Hilfe der Renormierungsgruppentheorie sind in der Literatur bislang kaum untersucht worden.

Beide Methoden werden hier auf das Störstellen-Anderson-Modell angewendet, da diesem aus mehreren Gründen eine große Bedeutung zukommt. Neben den Verunreinigungssystemen ist das Störstellen-Anderson-Modell in der Lage, auch Substanzen mit sehr hohen Störstellenkonzentrationen bis hin zu Systemen Schwerer Fermionen zu beschreiben. Allerdings ist dort die Aussagefähigkeit auf relativ hohe Temperaturen beschränkt, bei denen noch in guter Näherung die einzelnen magnetischen Ionen als voneinander unabhängig betrachtet werden können.

Eine andere Motivation geht auf Metzner und Vollhardt [Met89] und Müller-Hartmann [Mül89] zurück. Ihre Arbeiten bewiesen, daß Modelle stark korrelierter Elektronensysteme mit der Dimension  $d = \infty$  definiert werden können, die nichttriviale Eigenschaften aufweisen. Da sich deren Selbstenergie als rein lokal herausstellt, ergeben sich zum Teil erhebliche Vereinfachungen in der Auswertung. Erst kürzlich wurde gezeigt [Jar92, Geo92], daß das  $d = \infty$ -Hubbard-Modell auf ein effektives Störstellen-Anderson-Modell abgebildet werden kann, bei dem die Störstelle über eine selbstkonsistent zu bestimmende, energieabhängige Hybridisierung an das Leitungsband ankoppelt. Dies gilt in gleicher Weise für das periodische Anderson-Modell in  $d = \infty$ . Um also ein solches Modell zu untersuchen, ist ein Lösungsverfahren für das Störstellen-Anderson-Modell notwendig, das es ermöglicht, bei vorgegebener energieabhängiger Hybridisierung, dynamische Eigenschaften zu berechnen. Dazu wur-

den bislang Quanten-Monte-Carlo-Verfahren und die Non-crossing-Approximation benützt, so daß mittlerweile das  $d = \infty$ -Hubbard-Modell gut verstanden ist.

Diese Methoden liefern jedoch für das periodische Anderson-Modell keine zufriedenstellenden Resultate — hier liegt die Hoffnung auf der in dieser Arbeit entwickelten Renormierungsgruppentheorie.

Was die neue Funktionalintegraltechnik betrifft, so ist ihre Bedeutung für den gerade erwähnten Aspekt noch unklar, doch liegt ihr Vorteil darin, daß sie (im Gegensatz zur Renormierungsgruppentheorie) leicht auf Gittermodelle übertragen werden kann. Die Untersuchung des Störstellen-Anderson-Modells mit dieser Theorie stellt damit nur den Einstieg für eine Erweiterung auf das Gitter dar. Dort können sogar diejenigen Ansätze von Nutzen sein, die — wie in dieser Arbeit beschrieben — für das Störstellen-Modell keine vernünftigen Resultate ergeben.

Die Arbeit gliedert sich folgendermaßen: Kap. 2 enthält neben einem Überblick über die experimentellen Eigenschaften magnetischer Störstellen in nichtmagnetischen Metallen eine ausführliche Diskussion des Hamiltonoperators des Störstellen-Anderson-Modells. Darauf folgt eine Darstellung der theoretischen Methoden, die bisher auf dieses Modell angewendet wurden, wobei ein Schwerpunkt auf die Techniken gelegt wurde, die (im weitesten Sinne) mit der hier verwendeten Funktionalintegralmethode verwandt sind.

Eine allgemeine Einführung in das Konzept der Funktionalintegrale findet sich in Kap. 3, in dem sowohl das Feynmansche Pfadintegral als auch Funktionalintegrale für Operatoren in zweiter Quantisierung diskutiert werden. Kap. 3.3 beschäftigt sich mit einem in der Literatur bislang nicht beachteten Problem: die Fouriertransformation der (nur als Abkürzung definierten) kontinuierlichen Darstellung der Wirkung ergibt eine divergente Zustandssumme. Erst eine diskrete Fouriertransformation führt auf das richtige Ergebnis.

In Kap. 4 wird eingehend die von Weller [Wel90] entwickelte Funktionalintegraltechnik diskutiert. Bei der Untersuchung des Ein- bzw. Zweizustandsmodells ergeben sich für Zustandssumme und Green-Funktionen korrekte Resultate. Kurz werden in Kap. 4.4 weitere Anwendungen dieser Methode in der Literatur beschrieben. Die numerischen Rechnungen dieser Arbeit beschränken sich zwar auf die thermodynamische Green-Funktion  $G(\tau)$ , doch ist — wie in Kapitel 4.5 gezeigt wird — die Korrelationsfunktion  $G(t)$  der Funktionalintegraltechnik im Prinzip ebenfalls zugänglich.

Kap. 5 enthält die numerische Berechnung der Green-Funktionen des Störstellen-

Anderson-Modells. Dazu müssen zunächst die Freiheitsgrade der Leitungselektronen aus dem Funktionalintegral ausintegriert werden, woraus eine effektive Wirkung für den Störstellenfreiheitsgrad folgt. Das resultierende Funktionalintegral wird mit Hilfe einer diskreten Darstellung der in Kap. 4 eingeführten komplexen Felder in eine Summe umgewandelt, die exakt ausgewertet wird. Das vielfach diskutierte Problem, aus der thermodynamischen Green-Funktion  $G(\tau)$  die f-Spektralfunktion zu berechnen, wird in Kap. 5.3 angegangen. Es wird ein Fit-Verfahren vorgestellt, das die f-Spektralfunktion durch eine bzw. zwei Lorentzfunktionen approximiert. Die Ergebnisse werden in Kap. 5.4 mit denen einer Non-crossing-Approximation verglichen. Kap. 5.5 enthält schließlich einen Zugang zur analytischen Lösung des Funktionalintegrals, der auf der Analogie der Determinantenformel mit einer Störungsrechnung in der Hybridisierung basiert.

Wie mit den hier entwickelten Methoden die magnetische Suszeptibilität des Störstellen-Anderson-Modells berechnet werden kann, ist Gegenstand von Kap. 6.

Kap. 7 beschäftigt sich mit der Verallgemeinerung der Renormierungsgruppentheorie auf eine energieabhängige Kopplung des f-Elektrons an die Elektronen des Leitungsbandes. Anschließend wird eine neue Methode vorgestellt, aus den diskreten Spektren (die diese Methode zwangsläufig zur Folge hat) kontinuierliche Spektralfunktionen zu gewinnen. Diese werden für verschiedene Parametersätze berechnet und mit exakten Resultaten verglichen.

Eine Zusammenfassung der Arbeit, die Diskussion ihrer Ergebnisse und ein Ausblick auf die große Zahl an möglichen weiterführenden Untersuchungen wird schließlich in Kap. 8 gegeben.

Am Ende dieser Einleitung sei noch erwähnt, daß die Einheit der Energie und das Wirkungsquantum  $\hbar$  im folgenden gleich Eins gesetzt werden.

## 2 Das Störstellen-Anderson-Modell

Auf die Bedeutung des Störstellen-Anderson-Modells für die Physik der stark korrelierten Elektronensysteme wurde in der Einleitung bereits hingewiesen. In Kap. 2.1 werden zunächst die experimentellen Tatsachen angeführt, zu deren theoretischer Erklärung dieses Modell vorgeschlagen wurde. Die einzelnen Terme des dem Modell entsprechenden Hamiltonoperators werden in Kap. 2.2 diskutiert. Mit Kap. 2.3 wird schließlich versucht, einen Überblick über die zahlreichen Arbeiten zu geben, die sich in den letzten gut 30 Jahren mit dem Störstellen-Anderson-Modell auseinandergesetzt haben.

### 2.1 Experimentelle Resultate

Das Verhalten von nichtmagnetischen Metallen mit magnetischen Verunreinigungen ist eine seit Jahrzehnten aktuelle Fragestellung in der Festkörperphysik. Kennzeichnend für die Verunreinigungen sind ihre nur teilweise gefüllten 3d-, 4f- oder 5f-Schalen (für z.B. Fe, Ce bzw. U).

Zum ersten Mal wurde bereits in den 30er Jahren in vermeintlich reinen Metallen ein Fingerabdruck der magnetischen Störstellen gefunden: Der Widerstand der Metalle, der eigentlich für  $T \rightarrow 0$  monoton fallen sollte, durchläuft ein Minimum und steigt zu tiefen Temperaturen hin wieder an. Dafür ist die inkohärente Streuung der Leitungselektronen an den lokalisierten magnetischen Momenten der Störstellen verantwortlich. Erst Kondo [Kon64] konnte diesen Anstieg theoretisch erklären. Er erhielt einen Widerstandsterm proportional zu  $(-c \ln T)$  ( $c$ : Konzentration der Störstellen), der zusammen mit dem auf die Streuung an Phononen zurückzuführenden Widerstandsverlauf das beobachtete Minimum ergab. Nach Abrikosov und Suhl [Suh65, Suh66] geht der Widerstandsanstieg einher mit dem Anwachsen einer zusätzlichen Resonanz



in der Streumatrix der Leitungselektronen, welche der Abrikosov-Suhl-Resonanz in der f-Spektralfunktion entspricht (siehe Kap. 2.2). In Abb. 2.1 ist der typische Verlauf des Widerstands eines Metalls für verschiedene Konzentrationen der magnetischen Verunreinigungen aufgetragen.

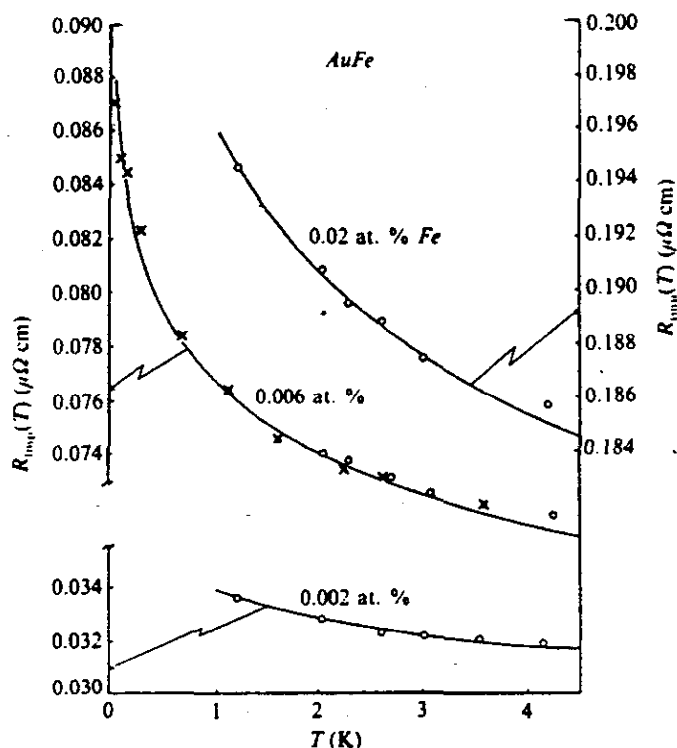


Abb. 2.1: Temperaturabhängigkeit des Widerstandes des Systems  $Au_{1-x}Fe_x$  für verschiedene Störstellenkonzentrationen. Die durchgezogenen Linien entsprechen einer logarithmischen Temperaturabhängigkeit (nach [Hew93]).

Die Tatsache, daß die Verunreinigungen magnetisch sind, wird bei Messungen der Suszeptibilität deutlich. Das Metall zeigt bei tiefen Temperaturen eine konstante Pauli-Suszeptibilität, während sich die Störstellen durch ein Curie-Verhalten  $\chi \propto 1/T$  zu erkennen geben. Die Suszeptibilität für ein Metall mit Störstellen ist in Abb. 2.2 dargestellt. Wird anstelle der Suszeptibilität  $\chi(T)$  das effektive magnetische Moment aufgetragen (siehe Abb. 2.3), so wird die Kompensation der lokalisierten magnetischen Momente aufgrund ihrer Kopplung an das Leitungsband für  $T \rightarrow 0$  deutlich.

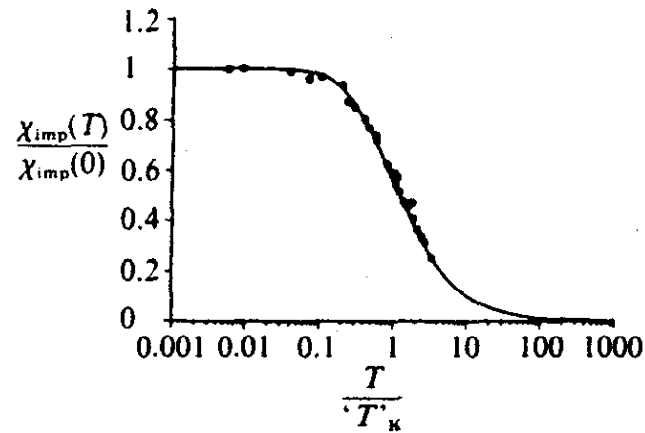


Abb. 2.2: Temperaturabhängigkeit der magnetischen Suszeptibilität des Systems  $\text{Cu}_{1-x}\text{Fe}_x$  (Punkte). Die durchgezogene Linie entspricht einer numerischen Rechnung (aus [Hew93]).

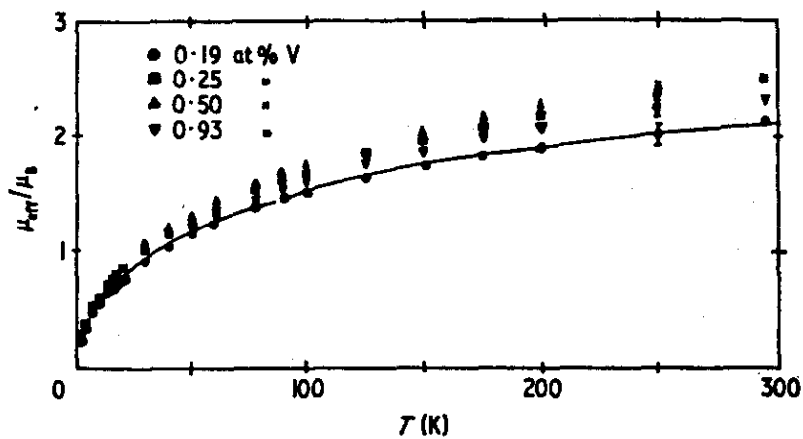
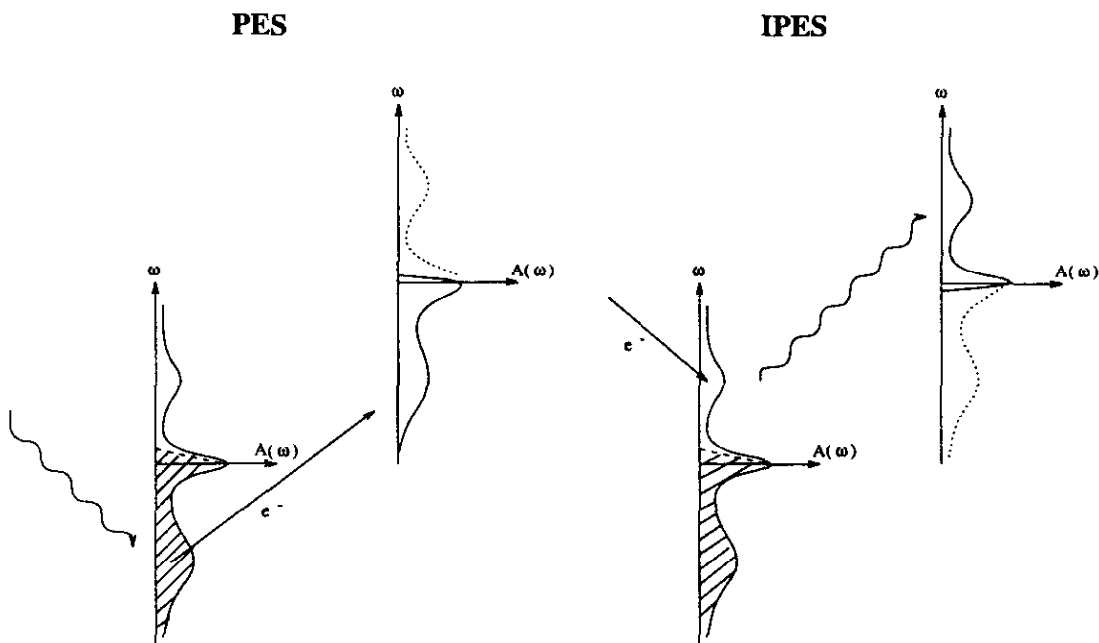


Abb. 2.3: Temperaturabhängigkeit des effektiven magnetischen Moments des Systems  $\text{Au}_{1-x}\text{V}_x$  bei verschiedenen Störstellenkonzentrationen (nach [Grü74]).

### Beitrag der f-Elektronen zur Zustandsdichte

Welchen Beitrag liefern die lokalisierten Zustände zur Zustandsdichte des gesamten Elektronensystems des Festkörpers<sup>1</sup>?

Die gesamte Zustandsdichte ist experimentell über die Photoemissions-Spektroskopie (PES) und die inverse PES (IPES) [All91] zugänglich. In Abb. 2.4 sind diese beiden Spektroskopiemethoden skizziert. In der PES treffen Photonen bestimmter Frequenz



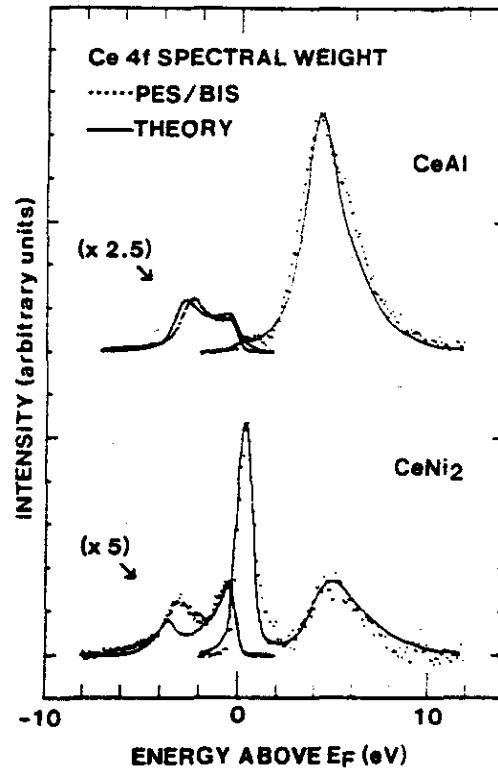
**Abb. 2.4:** PES und IPES — zwei Spektroskopiemethoden zur Bestimmung der elektronischen Zustandsdichte (Erläuterungen siehe Text).

auf den Festkörper und schlagen Elektronen aus besetzten Zuständen heraus. Um nicht nur die Oberflächenzustände zu erfassen, müssen die Photonen relativ hohe Energien — im keV Bereich — haben. Die Energieverteilung der herausgeschlagenen Elektronen wird gemessen und ergibt ein Abbild für das Produkt aus Fermi-Verteilung und Zustandsdichte  $f(\omega)A(\omega)$ .

Die IPES ist eigentlich nur die Umkehrung des gerade beschriebenen Verfahrens: Elektronen bestimmter Energie treffen auf den Festkörper und nehmen unbesetzte Zustände ein. Dabei werden Photonen emittiert, deren Verteilung Auskunft über das Produkt  $(1 - f(\omega))A(\omega)$  gibt. Die IPES wird als Bremsstrahlen-Isochromat-Spektroskopie (BIS) bezeichnet, falls die Energie der einfallenden Elektronen variiert wird und immer nur Photonen derselben Frequenz detektiert werden.

<sup>1</sup>Dieser Beitrag soll von jetzt an als f-Spektralfunktion  $A(\omega)$  bezeichnet werden.

Die f-Spektralfunktion kann aus diesen Daten durch Subtraktion der Daten einer Referenzsubstanz ohne f-Elektronen erhalten werden. In Abb. 2.5 ist dargestellt, wie sich aus Überlagerung von PES- und BIS-Daten die gesuchte f-Spektralfunktion ergibt. Für  $\text{CeNi}_2$  ist knapp oberhalb der Fermikante die Abrikosov-Suhl-Resonanz

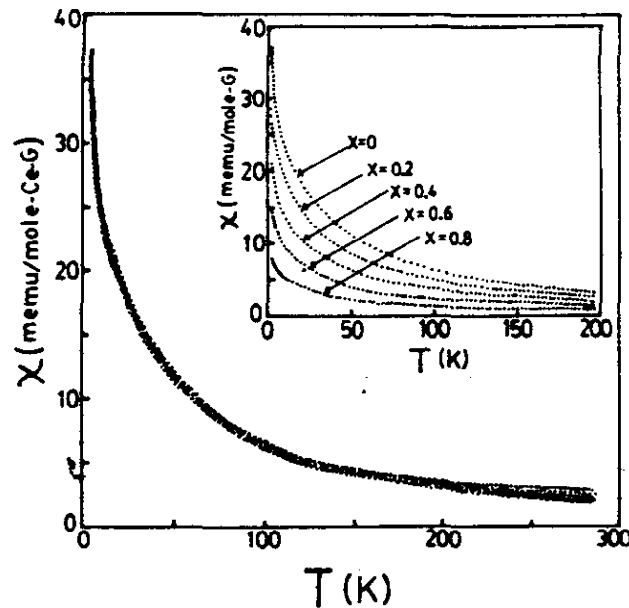


**Abb. 2.5:** Experimentell bestimmte 4f PES- und BIS-Spektren (Punkte) für  $\text{CeAl}$  und  $\text{CeNi}_2$  nach [All86]. Der PES-Anteil muß mit dem angegebenen Skalierungsfaktor multipliziert werden. Die durchgezogenen Linien entsprechen numerischen Rechnungen.

sichtbar. Diese für die f-Spektralfunktion typische Struktur erklärt auch die extreme Erhöhung des Sommerfeld-Koeffizienten  $\gamma = C/T$  ( $C$ : spezifische Wärme) und des Wertes der magnetischen Suszeptibilität bei sehr kleinen Temperaturen.

Eine wichtige Frage, die bei der Aufstellung eines theoretischen Modells berücksichtigt werden muß, ist, inwieweit die ins Wirtsmetall eingebrachten Störstellen als voneinander unabhängig betrachtet werden können. Dies läßt sich, aufgrund der großen Zahl an möglichen Systemen nicht allgemeingültig beantworten. Im System  $\text{Cu}_{1-x}\text{Fe}_x$ , bei dem schon drastische Effekte bei minimalen Konzentrationen von 0.01% Eisen in Kupfer auftreten, ist die Annahme unabhängiger Störstellen bei Konzentrationen der Größenordnung 1% nicht mehr gegeben. Bei der Legierung

$Ce_{1-x}La_xPb_3$  ( $LaPb_3$  ist das Metall, Cer die Verunreinigung) sind die Korrelations-  
effekte zwischen verschiedenen Cer-Plätzen überraschend gering [Lin87]: die Vorstel-  
lung unabhängiger Störstellen ist in einem weiten Temperaturbereich bei verschiede-  
nen Konzentrationen bis hin zur völligen Ersetzung von Lanthan durch Cer gültig.  
Dies wird besonders deutlich in der Temperaturabhängigkeit der Suszeptibilität pro  
mol Cer-Ionen (siehe Abb. 2.6), die in einem weiten Bereich der Konzentration (von  
 $x = 0$  bis  $x = 0.8$ ) dieselbe Form annimmt.



**Abb. 2.6:** Temperaturabhängigkeit der Suszeptibilität pro mol Cer-Ionen für das System  $Ce_{1-x}La_xPb_3$  für verschiedene Werte von  $x$  (aus [Lin87]).

Daher ist es bei der theoretischen Beschreibung in vielen Fällen sinnvoll, von einem Modell mit nur einer einzigen Störstelle in einem Metall auszugehen und das Ergebnis auf die tatsächliche Konzentration hochzurechnen.

Wirklich neuartige, innerhalb eines Störstellenmodells nicht zu erfassende Phänomene treten in Systemen auf, die die magnetischen Ionen an *jedem* Gitterplatz enthalten (z.B.  $CePb_3$ ). Zwar gilt auch hier für relativ hohe Temperaturen das Bild der Störstellenionen als unabhängige Streuzentren für die Leitungselektronen, doch findet bei einer für jede Substanz charakteristischen Temperatur  $T_{coh}$  ein stetiger Übergang von einer inkohärenten Streuung zu einer kohärenten Streuung statt. Der sich ausbildende Vielteilchenzustand umfaßt sowohl Leitungselektronenzustände als auch die lokalisierten f-Zustände. Die Eigenschaften eines solchen Systems lassen sich wieder gut in einem Fermi-Flüssigkeitsbild [Bay91] beschreiben, jedoch wegen den

ehemals lokalisierten f-Zuständen mit einer um den Faktor 100 bis 1000 erhöhten effektiven Masse der Quasiteilchen.

Daher stammt die Bezeichnung Systeme mit Schweren Fermionen. Einige typische Vertreter dieser Klasse sind die Cer-Verbindungen  $\text{CeCu}_2\text{Si}_2$ ,  $\text{CeCu}_6$  und die Uran-Verbindungen  $\text{URu}_2\text{Si}_5$ ,  $\text{URu}_3\text{Si}_5$ .

Für weitere physikalische Eigenschaften dieser Systeme sowie für die theoretischen Ansätze zu deren Beschreibung sei an dieser Stelle lediglich auf zwei Übersichtsartikel [Ste84, Ful88] verwiesen.

Auch wird in dieser Arbeit nicht auf periodische Systeme mit 3d-Ionen eingegangen. Zu diesen gehören z.B. die  $\text{CuO}_2$ -Ebenen in den Hochtemperatursupraleitern. Jedoch sind die 3d-Zustände im Vergleich zu den f-Zuständen viel weniger lokalisiert, und eine Beschreibung im Störstellenbild dürfte selbst bei hohen Temperaturen kaum zutreffend sein.

## 2.2 Das Modell nach Anderson

Um das Verhalten von magnetischen Verunreinigungen in nicht magnetischen Metallen zu verstehen, wurden mehrere Modelle vorgeschlagen. Doch haben sich das Virtual-bound-state-Modell von Friedel [Fri58] und das Wolff-Modell [Wol61] bei der Erklärung der experimentellen Resultate als weit weniger erfolgreich erwiesen als das von Anderson eingeführte Störstellen-Anderson-Modell [And61]. Ein weiteres Modell beschreibt die Freiheitsgrade der Störstellen durch lokalisierte Spins, die über eine Austauschwechselwirkung an die Spins der Leitungselektronen koppeln. Dieses Austauschmodell kann jedoch durch die Schrieffer-Wolff-Transformation [Sch66] aus dem Anderson-Modell im Grenzfall unendlich starker Coulombwechselwirkung erhalten werden. Das Anderson-Modell ist demzufolge umfassender, da es auch Mixed-valence-Systeme beschreiben kann, bei denen die f-Besetzung deutlich unter eins liegt.

Das Störstellen-Anderson-Modell lautet:

$$H = H_c + H_f + H_{ff} + H_{fc} \quad (2.1)$$

Die einzelnen Terme werden im folgenden erläutert.

Der Term

$$H_c = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \quad (2.2)$$

beschreibt die Leitungselektronen des Wirtsmetalls. Die Operatoren  $c_{k\sigma}^\dagger, c_{k\sigma}$  erzeugen bzw. vernichten ein Leitungselektron mit Impuls  $k$  und Spin  $\sigma$ . Die genaue Form der  $k$ -Abhängigkeit der Energien  $\varepsilon_k$  ist nicht wesentlich, in die Rechnungen wird später lediglich die Zustandsdichte

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) \quad (2.3)$$

eingehen. Deswegen spielt auch die Dimension des Wirtsmetalls ( $d = 3$  im Experiment) im Hamiltonoperator (2.1) keine Rolle mehr. Außerdem wird angenommen, daß das Leitungsband auf das Intervall  $[-D, D]$  beschränkt ist.

Da die erwähnten Effekte schon bei sehr geringen Konzentrationen der Verunreinigungen auftreten, ist es sinnvoll, Korrelationen zwischen zwei verschiedenen Störstellenionen völlig zu vernachlässigen und gleich von einem Modell mit nur einer einzigen Störstelle zu starten. Diese wird beschrieben durch:

$$H_f = \sum_{\sigma} \varepsilon_f f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} \quad (2.4)$$

Die Operatoren  $f_{\sigma}^\dagger, f_{\sigma}$  erzeugen bzw. vernichten ein Elektron in einer inneren (d- oder f-Schale) des Störstellenions.

Ein wichtiger Punkt ist, welche Entartung  $\nu_f = \sum_{\sigma} 1$  für das Störstellenniveau verwendet werden soll. Bei Metallen mit Cer-Störstellen ist die  $4f^1$ -Konfiguration 14-fach entartet. Die Hundsche Regel liefert das  $J = 5/2$ -Multipllett als Grundzustand. Dieses Niveau kann durch Kristallfeldeffekte noch beträchtlich aufgespalten sein. In dieser Arbeit wird der Fall  $\nu_f = 2$  behandelt, d.h. der Spin  $\sigma$  kann nur die Einstellungen  $\uparrow$  und  $\downarrow$  annehmen.

Die Frage, welche Gestalt die Wellenfunktionen haben, die durch die Operatoren  $f_{\sigma}^\dagger$  und  $c_{k\sigma}^\dagger$  erzeugt werden, geht natürlich wegen der Darstellung in zweiter Quantisierung nicht in das Modell ein. Entscheidend ist jedoch, daß die den f-Operatoren entsprechenden Wellenfunktionen  $\varphi_f$  orthogonal auf den zu den Leitungselektronen gehörenden Wellenfunktionen  $\varphi_c$  stehen, somit auch die Antikommutatoren  $[f_{\sigma}^{(\dagger)}, c_{k\sigma}^{(\dagger)}]_{+}$  verschwinden.

Der einzige Zweiteilchenterm, der im Hamiltonoperator berücksichtigt werden soll, ist die lokale Coulombwechselwirkung zweier Elektronen an der Störstelle:

$$H_{ff} = U f_{\uparrow}^\dagger f_{\uparrow} f_{\downarrow}^\dagger f_{\downarrow} \quad (2.5)$$

Aus der unterschiedlichen räumlichen Ausdehnung von 4f-, 5f- und 3d-Zuständen lassen sich grob die relativen Größenverhältnisse der Werte für  $U$  angeben:

$$U_{4f} > U_{5f} \gtrsim U_{3d} \quad (2.6)$$

In der Regel übertrifft  $U$  alle anderen Energieskalen des Systems bei weitem und eine Störungsentwicklung in  $U$  wird sinnlos.

Der Effekt von  $H_{ff}$  ist anschaulich leicht zu verstehen. Das doppelt besetzte f-Niveau hat eine um  $U$  erhöhte Energie und liegt damit weit jenseits der Fermikante. Bei hinreichend tiefen Temperaturen wird die Doppelbesetzung praktisch ausgeschlossen. Das Niveau ist mit hoher Wahrscheinlichkeit mit einem Elektron besetzt, woraus das magnetische Moment der Störstelle resultiert.

Ein weiterer Term, die Coulombwechselwirkung zwischen f-Elektron und Leitungselektronen, wird an dieser Stelle vernachlässigt. Ihr Wert  $U_{fc}$  dürfte wegen der größeren Delokalisierung der Leitungselektronen nicht so hoch wie der des Parameters  $U$  liegen. Numerische Untersuchungen [Tak93] haben gezeigt, daß sich die Hinzunahme dieses Terms im wesentlichen in einer Renormierung der anderen Parameter des Hamiltonoperators (2.1) äußert.

Der vierte Term des Hamiltonoperators enthält die Hybridisierung der Leitungselektronen mit den f-Elektronen.

$$H_{fc} = \sum_{k\sigma} V (f_{\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^{\dagger} f_{\sigma}) \quad (2.7)$$

Die Größe  $V$  wird als unabhängig von  $k$  und  $\sigma$  angenommen.  $H_{fc}$  erlaubt Übergänge zwischen dem f-Niveau und dem Leitungsband und führt bei tiefen Temperaturen zu einer Abschirmung des an der Störstelle lokalisierten magnetischen Moments.

Aus der Struktur des Störstellen-Anderson-Modells läßt sich bereits eine Reihe von physikalischen Eigenschaften ableiten, die im folgenden diskutiert werden sollen.

### Qualitativer Verlauf des effektiven magnetischen Moments

Für  $k_B T \ll U$ ,  $\varepsilon_f + U > 0$  und verschwindende Hybridisierung erlaubt die lokale Coulombabstoßung eine höchstens einfache Besetzung des f-Niveaus. Da das Elektron in diesem Niveau ein magnetisches Moment  $g\mu_B$  trägt, wird die Temperaturabhängigkeit des effektiven magnetischen Moments mit der der f-Besetzung  $n_f$  identisch sein.

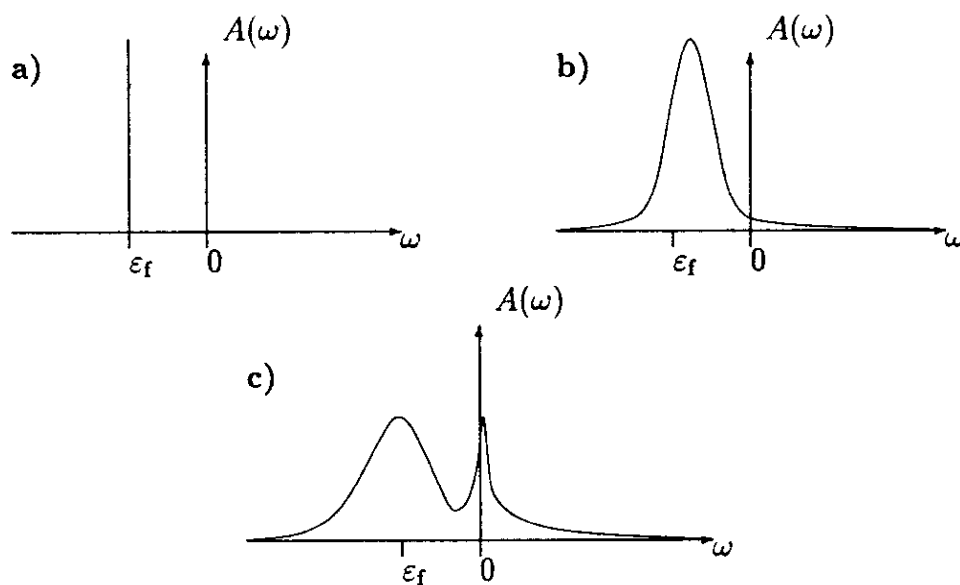
Bei endlicher Hybridisierung und hinreichend tiefen Temperaturen schirmen die Leitungselektronen dieses magnetische Moment jedoch ab. In dem in Kap. 4.3 untersuchten Zweizustandsmodell äußert sich dies in der Ausbildung eines unmagnetischen



Singulett-Grundzustands, wie er auch (nach Varma und Yafet [Var76]) im Störstellen-Anderson-Modell erwartet werden kann. Die Energieabsenkung des Singulett-Zustands gegenüber den Triplett-Zuständen bestimmt die Größenordnung der Temperatur, bei der das effektive magnetische Moment nicht mehr dem Verlauf von  $n_f$  folgt und für  $T \rightarrow 0$  gegen Null konvergiert. Dieser Verlauf wird auch in den in Kap. 6 beschriebenen Rechnungen bestätigt.

### Qualitativer Verlauf der f-Spektralfunktion

In Fig. 2.7 sind die zu erwartenden f-Spektralfunktionen für verschiedene Grenzfälle des Störstellen-Anderson-Modells gegenübergestellt.

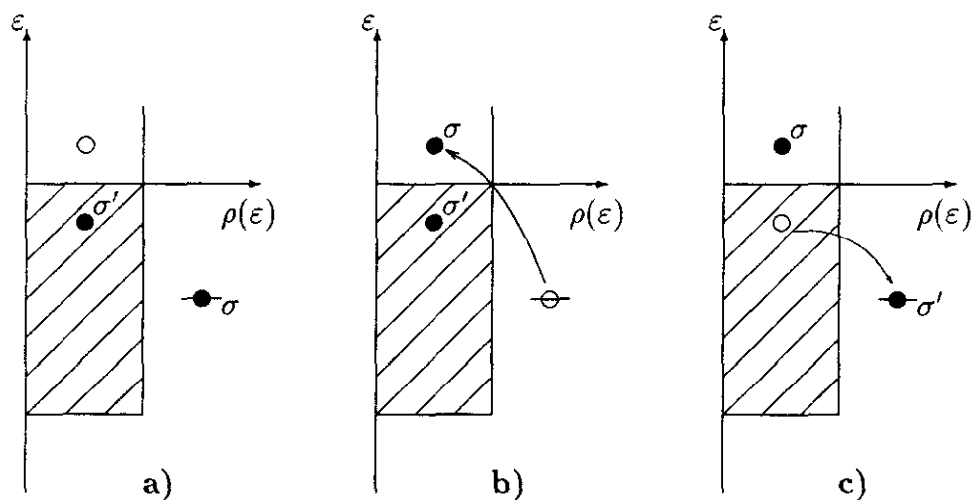


**Abb. 2.7:** Qualitativer Verlauf der f-Spektralfunktion in verschiedenen Grenzfällen des Störstellen-Anderson-Modells; Erläuterungen siehe Text.

a)  $V = 0$ : Das lokalisierte Niveau hybridisiert nicht mit den Leitungselektronen. Die f-Spektralfunktion besteht nur aus zwei  $\delta$ -Funktionen bei  $\epsilon_f$  und  $\epsilon_f + U$ , von denen die zweite bei  $U \rightarrow \infty$  ins Unendliche hinausgeschoben ist.

b)  $V > 0, U = 0$ : Der Peak bei  $\epsilon_f$  verbreitert sich und verschiebt sich leicht zu höheren Frequenzen. Diese Lorentz-Form läßt sich analytisch herleiten. Für die Breite resultiert dabei der Wert  $\Delta = \pi\rho(0)V^2$ . Die Verbreiterung entspricht einer endlichen Lebensdauer des f-Niveaus, denn die Elektronen können aus dem lokalisierten Niveau ins Leitungsband gelangen und umgekehrt.

c)  $V > 0$ ,  $U > 0$ ,  $\Delta \ll |\varepsilon_f|$ : An der Fermikante entwickelt sich eine neue Struktur — die Abrikosov-Suhl-Resonanz. Das Auftreten dieser Resonanz hat folgende Ursache. Da die f-Spektralfunktion auch als Streumatrix für die Leitungselektronen aufgefaßt werden kann, müssen für die Abrikosov-Suhl-Resonanz Streuprozesse mit sehr kleinen Anregungsenergien verantwortlich sein. Diese sind in Abb. 2.8 skizziert. Verläßt ein



**Abb. 2.8:** Das Umklappen des Spins eines Leitungselektrons bildet einen Streuprozess mit sehr kleiner Anregungsenergie.

Elektron mit Spin  $\sigma$  das f-Niveau (Abb. 2.8 a und b), so kann der freigewordene Platz durch ein Leitungselektron mit Spin  $\sigma'$  eingenommen werden (Abb. 2.8 c). Effektiv kommt dies einer Spinstreuung des Leitungselektrons gleich. Die Resonanz tritt jedoch nur im sog. Kondo-Regime des Störstellen-Anderson-Modells auf, welches durch  $(1 - n_f) \ll 1$  definiert ist.

Für f-Besetzungen sehr viel kleiner als eins spielt die Coulombwechselwirkung keine große Rolle mehr. Die Spektralfunktion nähert sich dem Verhalten für  $U = 0$  an, die Abrikosov-Suhl-Resonanz verschwindet.

Eine Spektralfunktion wie in Abb. 2.7c erklärt auch die extreme Erhöhung der spezifischen Wärme bei tiefen Temperaturen, da der Sommerfeld-Koeffizient  $\gamma$  der Zustandsdichte an der Fermikante proportional ist.

### Die Kondo-Temperatur

Die Bedeutung der Kondo-Temperatur liegt darin, daß sie für viele physikalische Größen des Störstellen-Anderson-Modells *die* Tieftemperaturskala darstellt. Damit ist gemeint, daß thermodynamische Größen und z.B. die Breite der Abrikosov-Suhl-Resonanz nur über  $T/T_K$  von den Parametern des Störstellen-Anderson-Modells ( $\varepsilon_f$ ,  $U$ ,  $V$ , ...) abhängen.

Aus verschiedenen Ansätzen (siehe z.B. [Hew93]) ergibt sich die Formel

$$k_B T_K \propto D \exp \left[ - \frac{\pi |\varepsilon_f| |\varepsilon_f + U|}{\nu_f \Delta U} \right] \quad (2.8)$$

Alle mit dem Kondo-Regime verbundenen Effekte, wie der logarithmische Widerstandsanstieg, der stark erhöhte Sommerfeld-Koeffizient und die Abrikosov-Suhl-Resonanz in der Spektralfunktion, treten erst in einem Temperaturbereich auf, dessen obere Grenze in etwa durch die Kondo-Temperatur gegeben ist. Jedoch existiert zwischen Hochtemperatur-Regime und Kondo-Regime kein Phasenübergang! Die Energie  $k_B T_K$  kann auch als Absenkung der Grundzustandsenergie bei Hinzunahme der Hybridisierung verstanden werden (siehe z.B. [Var76]).

## 2.3 Überblick über bisherige Arbeiten

Viel von dem Wissen, das wir heute über die Eigenschaften des Störstellen-Anderson-Modells haben, wurde erst durch aufwendige Untersuchungen mit den verschiedensten Methoden möglich. In diesem Kapitel sollen die wichtigsten dieser Methoden sowie deren Resultate kurz vorgestellt werden. Diese Darstellung ist insofern subjektiv, als nur die dem Funktionalintegralansatz von Kap. 4 näher verwandten Techniken genauer beschrieben werden. Die Renormierungsgruppentheorie wird erst später in Kap. 7 ausführlich behandelt. Für eine umfassende Darstellung auch der hier nicht erwähnten Theorien sei auf das Buch [Hew93] verwiesen.

### Der Bethe-Ansatz

Dieser ursprünglich von Bethe [Bet31] zur Lösung des eindimensionalen Heisenberg-Modells entwickelte Ansatz wurde von Andrei et al. [And83] und Tsvelick und Wiegmann [Tsv83] auf das Störstellen-Anderson-Modell übertragen. Dabei wird ausgenutzt, daß die Dispersion der Leitungselektronen in der Nähe der Fermienergie als linear angenommen werden kann. Durch eine Transformation in den Ortsraum wird

$\sum_k k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$  durch  $\int dx c_\sigma^\dagger(x) \frac{\partial}{\partial x} c_\sigma(x)$  ersetzt. Der resultierende Hamiltonoperator entspricht einem System von Leitungselektronen in einer Dimension, die nur bei  $x = 0$  an die Störstelle koppeln. Daher ist es möglich, den Ansatz für die Lösung dieses Problems für  $x \neq 0$  aus Einteilchenzuständen aufzubauen und die Störstellenfreiheitsgrade nur bei  $x = 0$  zu berücksichtigen.

Um die Thermodynamik zu bestimmen, muß ein Funktional der Freien Energie aufgestellt werden, dessen Minimierung auf einen Satz von unendlich vielen nichtlinearen Integralgleichungen führt, die numerisch gelöst werden können. Damit wurde insbesondere die Universalitätshypothese bestätigt, die besagt, daß alle thermodynamischen Größen bei tiefen Temperaturen nur über das Verhältnis  $T/T_K$  von den Parametern des Störstellen-Anderson-Modells abhängen. Es konnte auch die korrekte Formel für  $T_K$  angegeben werden (siehe (2.8)).

Ein Beweis für die Richtigkeit der Ergebnisse ist unter anderem der Vergleich mit den Resultaten aus der Renormierungsgruppentheorie. Abb. 2.9 zeigt diesen Vergleich für das effektive magnetische Moment  $T \cdot \chi(T)$  — die Übereinstimmung ist perfekt. Jedoch können zeitabhängige Korrelationsfunktionen mit dem Bethe-Ansatz nicht

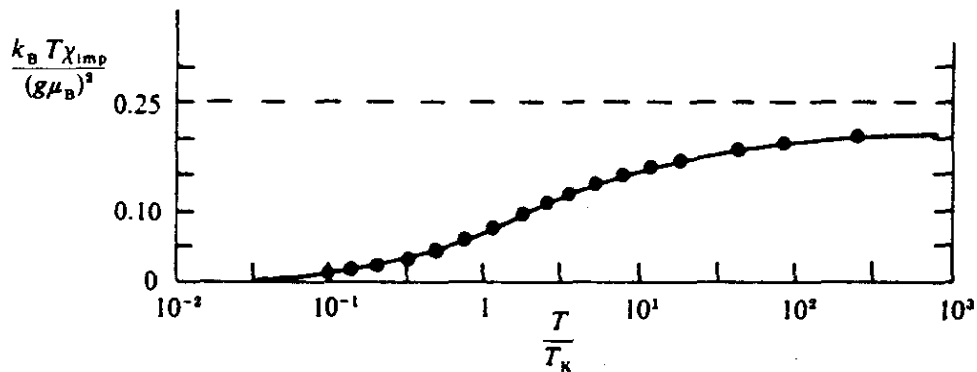


Abb. 2.9: Vergleich der Ergebnisse für  $T \cdot \chi(T)$  aus Renormierungsgruppentheorie (Punkte) und Bethe-Ansatz (durchgezogene Linie).

berechnet werden — die f-Spektralfunktion ist dieser Theorie also nicht zugänglich.

## Die Slave-boson-Methode

In Kap. 4 wird beschrieben, wie eine unendlich hohe lokale Coulombabstoßung mit der Ersetzung der Fermi-Operatoren durch die sog. Hubbard-Operatoren berücksichtigt werden kann. In der Slave-boson-Methode [Bar76, Col84] tritt nun anstelle dieser Hubbard-Operatoren jeweils ein Produkt aus Fermi- und Bose-Operatoren

$$X_{0\sigma} = f_\sigma b^\dagger \quad , \quad X_{\sigma 0} = f_\sigma^\dagger b \quad . \quad (2.9)$$

In Gl (2.9) tragen die Fermi-Operatoren den Spin, es können jedoch genauso Darstellungen verwendet werden, in denen den Bosonen der Spin zugeschrieben wird.

Durch die Einführung der zusätzlichen Bose-Operatoren wird der Hilbertraum um unphysikalische Zustände erweitert. Die Nebenbedingung

$$\sum_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + b^{\dagger} b = 1 \quad (2.10)$$

gewährleistet, daß diese Zustände herausprojiziert werden. Ebenso sorgt sie für die Einhaltung des bei  $U \rightarrow \infty$  auftretenden Doppelbesetzungsverbots.

Im Hamiltonoperator muß diese Nebenbedingung mit einem Lagrangeparameter  $\lambda$  angekoppelt werden:

$$\lambda \left[ \sum_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + b^{\dagger} b - 1 \right] \quad (2.11)$$

Das auf diese Weise erhaltene, wechselwirkende System aus Fermionen und Bosonen kann mit verschiedenen Methoden untersucht werden.

### Slave-boson Mean-field-Theorie

In dieser Mean-field-Theorie (siehe z.B. [Ful88]) werden die  $b$ -Operatoren durch eine Zahl ersetzt, die in einem selbstkonsistenten Gleichungssystem bestimmt wird. So kann mit geringem Aufwand die Resonanz an der Fermienergie reproduziert werden, der Peak am ursprünglichen  $f$ -Niveau verschwindet jedoch völlig. Ein weiterer Nachteil besteht darin, daß die Mean-field-Theorie bei einer bestimmten Temperatur einen Phasenübergang liefert, der im Experiment nicht zu beobachten ist: die selbstkonsistent berechnete, effektive Hybridisierung verschwindet völlig. Trotz dieser Nachteile ergibt die Mean-field-Theorie bei niedrigen Temperaturen eine qualitativ richtige Beschreibung der physikalischen Größen.

### Auswertung mit einer Graphen-Theorie

Während die Vertauschungsregeln der Hubbard-Operatoren die Anwendung der Standardtechniken der Vielteilchentheorie verhindern, kann in dem wechselwirkenden System aus Fermionen und Bosonen eine Entwicklung nach Feynman-Diagrammen vorgenommen werden (siehe [Col84]). Dabei sind drei Sorten von Propagatoren zu unterscheiden: Propagatoren für die  $f$ -Elektronen, die Leitungselektronen und die Bosonen. Die von Coleman berechnete  $f$ -Spektralfunktion zeigt sowohl die Abrikosov-Suhl-Resonanz als auch den Peak beim ursprünglichen  $f$ -Niveau.

Die Slave-boson-Methode kann auch als Ausgangspunkt einer Funktionalintegraldarstellung dienen. Näheres dazu im folgenden Abschnitt.

## Funktionalintegralmethoden

Um hervorzuheben, daß es sich bei der in Kap. 4.1 beschriebenen Wellerschen Theorie wirklich um einen neuen Ansatz handelt, sollen die Funktionalintegralmethoden, mit denen das Störstellen-Anderson-Modell bisher untersucht wurde, etwas genauer dargestellt werden.

Im Limes  $U \rightarrow \infty$  dient als Ausgangspunkt für eine Funktionalintegralformulierung üblicherweise die Slave-boson-Darstellung (2.9) (siehe z.B. [Rea83]). Die Nebenbedingung

$$Q = \sum_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + b^{\dagger} b = 1 \quad (2.12)$$

tritt in der Zustandssumme und damit im Funktionalintegral zunächst als  $\delta$ -Funktion auf:

$$Z = \text{Sp} \left[ e^{-\beta H} \delta(Q - 1) \right] \quad (2.13)$$

Nach [Hoo87] werden im wesentlichen zwei Darstellungen für die  $\delta$ -Funktion verwendet:

$$\delta(Q - 1) = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \frac{d}{d(e^{-\beta\lambda})} \left[ e^{-\beta\lambda Q} \right] \quad (2.14)$$

$$\delta(Q - 1) = \frac{\beta}{2\pi i} \int_{-\pi i/\beta}^{\pi i/\beta} d\lambda e^{-\beta\lambda(Q-1)} \quad (2.15)$$

In beiden Fällen erhält das Funktionalintegral den zusätzlichen Term  $\exp[-\beta\lambda Q]$ . Die Wirkung erhält nun eine Vielzahl von Feldern: Grassmann-Felder anstelle der Operatoren für die Leitungselektronen und für das f-Elektron sowie komplexe Felder  $b(\tau)$  anstelle der zusätzlich eingeführten Bose-Operatoren. Da eine direkte Auswertung dieser Funktionalintegrale nicht möglich ist, müssen die  $b$ -Felder durch einen  $\tau$ -unabhängigen Wert  $b(\tau) = b$  ersetzt werden. Nach Ausintegration der Grassmann-Variablen ist dann die Sattelpunktnäherung (siehe z.B. [Neg88]) für die Werte von  $b$  und  $\lambda$  anwendbar.

Die Werte  $b'$  und  $\lambda'$ , bei denen die Wirkung extremal wird, ergeben (ähnlich wie die Slave-boson Mean-field-Theorie) einen Quasiteilchenpeak an der Fermikante. Der ursprüngliche Peak bei der Energie  $\epsilon_f$  ist aber völlig verschwunden, was auf die Vernachlässigung der Fluktuationen der  $b$ -Felder zurückzuführen sein dürfte.

Auf ein weiteres Problem dieser statischen Näherung haben Keiter und Krech [Kei85] hingewiesen. Werden nämlich die Bosonen und Fermionen mit Hilfe einer Hubbard-Stratonovich-Transformation [Hub59, Str57] entkoppelt, treten divergente Terme in

der Wirkung auf. Keiter und Krech behaupteten daher, daß ohne die Hinzunahme von Fluktuationen der  $b$ -Felder die statische Näherung unbrauchbar sei.

Hooijer und Van Himbergen [Hoo87] haben allerdings gezeigt, daß die divergenten Terme nur auf eine unglückliche Wahl der Darstellung der  $\delta$ -Funktion zurückzuführen sind, und haben eine alternative Darstellung vorgeschlagen, die diese Schwierigkeiten beheben kann.

Das Sattelpunktverfahren ohne die Mitnahme von Fluktuationen ist auch dem Variationsverfahren nahe verwandt. Schönhammer [Sch90] hat gezeigt, daß in der Slaveboson-Version von Kotliar und Ruckenstein [Kot86] die Sattelpunktgleichungen (drei Gleichungen mit drei Unbekannten) exakt dieselbe Form haben, wie die mit einem speziellen Variationsansatz erhaltenen Gleichungen.

Zusammenfassend ist festzustellen, daß die Funktionalintegralmethoden sich bei weitem nicht als so erfolgreich erwiesen haben wie z.B. das Renormierungsgruppenverfahren. Sie erlauben jedoch aufgrund der allgemeineren Struktur einer Lagrange-Funktion gegenüber einem Hamiltonoperator verbesserte statische Näherungen, die dann auch für tiefe Temperaturen gute Ergebnisse liefern.

### Quanten-Monte-Carlo-Methoden

Wie mit Hilfe der Quanten-Monte-Carlo-Methode statische und dynamische Eigenschaften des Störstellen-Anderson-Modells berechnet werden können, findet sich z.B. in [Fye88]. Zunächst wird der Hamiltonoperator (2.1) in

$$H = H_0 + H_1 \quad (2.16)$$

aufgeteilt mit

$$H_0 = H_c + H_f + H_{fc} \quad \text{und} \quad H_1 = H_{ff} \quad (2.17)$$

Die Spur über  $\exp[-\beta H]$  wird mit Hilfe der Trotter-Formel [Tro59] zerlegt:

$$\text{Sp} \left[ e^{-\beta H} \right] = \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \text{Sp} \left[ \prod_{l=1}^N e^{-\Delta\tau H_0} e^{-\Delta\tau H_1} \right] \quad , \quad \Delta\tau = \frac{\beta}{N} \quad (2.18)$$

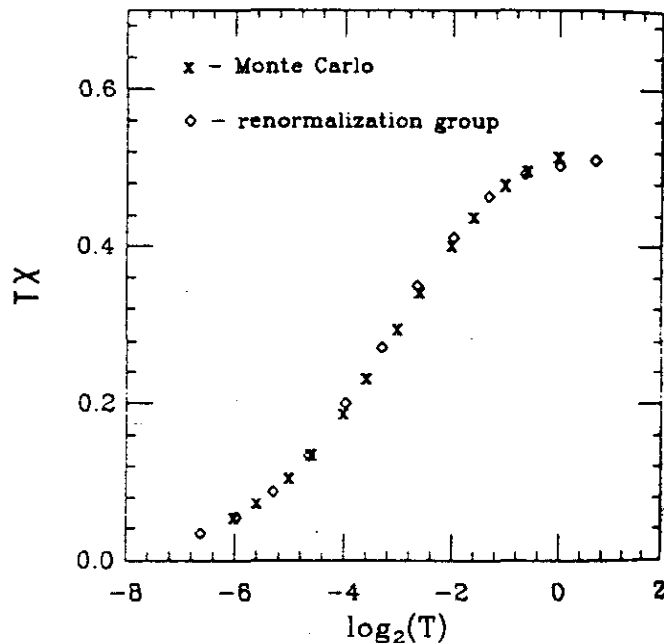
(Vgl. dazu die Vorgehensweise zur Herleitung des Funktionalintegrals in Kap. 4.1.) Mit der von Hirsch [Hir83] entwickelten diskreten Hubbard-Statonovich-Transformation

$$\exp \left[ -\Delta\tau U \left( n_{\uparrow} n_{\downarrow} - \frac{1}{2} (n_{\uparrow} + n_{\downarrow}) \right) \right] = \frac{1}{2} \text{Sp}_{\sigma} \left[ \exp \left[ \lambda \sigma (n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) \right] \right] \quad (2.19)$$

( $\cosh\lambda = e^{\Delta\tau U/2}$ ) werden die Coulombterme in  $\exp[-\Delta\tau H_1]$  in Einteilchenterme aufgespalten. Diese koppeln jedoch an zusätzliche Freiheitsgrade  $\sigma = \pm 1$ , so daß pro Zeitschritt  $\Delta\tau$  eine weitere Summation  $\text{Sp}_\sigma$  notwendig ist.

Die Spurbildung über die fermionischen Freiheitsgrade entspricht der Ausintegration der Grassmann-Felder in einer Funktionalintegralformulierung und liefert als Ergebnis die Determinante einer hochdimensionalen Matrix. Die Gleichung zur Berechnung der Zustandssumme bzw. der Green-Funktionen ist damit auf eine Summe über  $2^N$  ( $N$ : Zahl der Zeitschritte) Beiträge reduziert. Diese Summe kann mit dem Metropolis-Algorithmus (siehe dazu Kap. 5.2) ausgewertet werden.

Für das effektive magnetische Moment  $T\chi(T)$  ergibt sich dabei eine sehr gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen aus Renormierungsgruppentheorie und Bethe-Ansatz (siehe Abb. 2.10 und 2.9). Dynamische Größen sind nur über die Berechnung



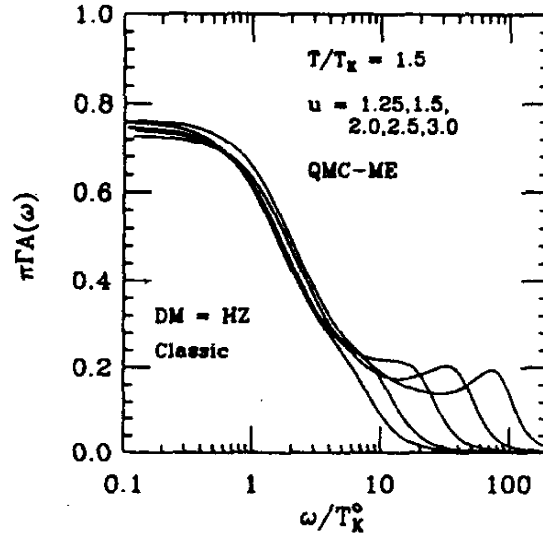
**Abb. 2.10:** Mit der Quanten-Monte-Carlo-Methode berechnetes effektives magnetisches Moment des Störstellen-Anderson-Modells (aus [Fye88]).

der thermodynamischen Green-Funktion  $G(\tau)$  zugänglich (siehe dazu die ausführliche Diskussion in Kap. 5.3). In [Gub91] und [Sil90] wird gezeigt, wie dieses Problem mit Hilfe der Maximum-entropy-Methode gelöst werden kann.

Abb. 2.11 enthält die so gewonnenen Spektralfunktionen für das durch  $-\varepsilon_f = \varepsilon_f + U$  definierte symmetrische Störstellen-Anderson-Modell. Die Form der Abrikosov-Suhl-Resonanz ist bei konstantem  $T/T_K$  eine universelle Funktion von  $\omega/T_K$ , während die



Resonanz bei  $\varepsilon_f + U$  direkt von der Coulombwechselwirkung abhängt.



**Abb. 2.11:** Aus Quanten-Monte-Carlo-Daten mit Hilfe der Maximum-entropy-Methode gewonnene Spektralfunktionen für das symmetrische Störstellen-Anderson-Modell. Das Verhältnis  $T/T_K$  wurde konstant gehalten, die Coulombwechselwirkung hingegen variiert (aus [Gub91]).

Ein weiteres Problem der Quanten-Monte-Carlo-Methode liegt in der mit der Zahl der Zeitschritte exponentiell anwachsenden Rechenzeit, wodurch die Werte von  $U$  auf  $U \lesssim 3\pi\Delta$  beschränkt ist. Jedoch tritt hier nicht das bei der Simulation von Gittermodellen so berühmte Minuszeichenproblem auf [Jar92].

Neuere Arbeiten mit der Quanten-Monte-Carlo-Methode sind vor allem im Zusammenhang mit der Untersuchung des  $d = \infty$  Hubbard-Modells [Jar92, Jar93] entstanden und beinhalten sowohl den symmetrischen als auch den unsymmetrischen Fall des Störstellen-Anderson-Modells.

### Die Non-crossing-Approximation

Da der hohe Wert der lokalen Coulombabstoßung eine Störungsentwicklung nach  $U$  sinnlos macht, ist es naheliegend, eine Störungstheorie nach der Hybridisierung  $V$  durchzuführen und den Coulombterm zum ungestörten Hamiltonoperator hinzuzunehmen. Dieser kann sowohl für endliche als auch für unendliche Werte von  $U$  durch Hubbard-Operatoren dargestellt werden, doch verhindern deren Vertauschungsrelationen die Anwendung des für die Entwicklung nach Feynman-Graphen notwendigen Wick'schen Theorems.

Diese Schwierigkeit kann mit Hilfe der Resolvententheorie umgangen werden, die

auf Arbeiten von Keiter und Kimball [Kei70] zurückgeht und ebenfalls durch Graphen veranschaulicht werden kann. Die Non-crossing-Approximation (NCA) ist nun dadurch definiert, daß in der Selbstenergie für die f-Propagatoren alle Graphen vernachlässigt werden, die kreuzende Leitungselektronenlinien enthalten.

Die Bestimmung der f-Propagatoren ist in einem selbstkonsistenten Gleichungssystem (der Dyson-Gleichung) auf einfache Weise möglich. Da die Propagatoren von der Selbstenergie über eine geometrische Reihe abhängen, enthalten sie automatisch Beiträge in allen Ordnungen von  $V^2/\nu_f$  ( $\nu_f$ : Entartung des f-Niveaus). Dadurch wird die NCA dem nichtperturbativen Charakter des Tieftemperaturzustandes des Störstellen-Anderson-Modells gerecht.

Die Motivation dieser Näherung liegt zum einen darin, daß die Berechnung der kreuzenden Graphen mit einem erheblichen Rechenaufwand verbunden ist (siehe dazu [Hac93]). Zum anderen wird im Grenzfall  $\nu_f \rightarrow \infty$  die NCA exakt, da die kreuzenden Graphen in einer  $1/\nu_f$ -Entwicklung um mindestens eine Ordnung höher liegen. Da die Graphen aber nicht wirklich nach Potenzen von  $1/\nu_f$  sortiert werden, ist die NCA nicht mit der in [Bic87] beschriebenen  $1/\nu_f$ -Entwicklung identisch. Für den exakt lösbaren Fall  $\nu_f = 1$  liefert die NCA jedoch Spektralfunktionen mit großen Abweichungen an der Fermikante und auch für  $\nu_f > 1$  ist ihre Aussagefähigkeit auf Temperaturen  $T \gtrsim T_K/10$  beschränkt. Der Vorteil der NCA besteht darin, daß sie die Berechnung dynamischer Größen in einem weiten Parameterbereich erlaubt (siehe z.B. [Koj84, Pru90]).

## Sonstige Methoden

Nicht erwähnt wurden bislang Arbeiten mit einem Variationsansatz von Gunnarson und Schönhammer [Gun83] sowie die Anwendung der Fermiflüssigkeitstheorie von Nozières [Noz74]. Außerdem existieren für  $U \lesssim 2.5\pi\Delta$  durchaus zuverlässige Resultate einer Störungstheorie in  $U$  von Horvatić et al. [Hor87]. Für all diese Arbeiten sei auf die Originalliteratur bzw. das Buch [Hew93] verwiesen.

## 3 Funktionalintegrale

Dieses Kapitel soll sowohl eine kurze Einführung in die Methode der Funktionalintegrale geben als auch Schwierigkeiten aufzeigen, die bereits bei der Untersuchung einfachster Systeme auftreten können. In Kap. 3.1 wird kurz auf die Entwicklung der Methode eingegangen, die im wesentlichen auf Feynman [Fey48] zurückgeht — sein Pfadintegralformalismus ermöglichte einen völlig neuen, alternativen Zugang zur nichtrelativistischen Quantenmechanik. In Kap. 3.2 wird die Erweiterung auf Systeme diskutiert, die durch Hamiltonoperatoren in zweiter Quantisierung beschrieben werden. Dazu ist die Einführung sog. kohärenter Zustände notwendig. Kap. 3.3 widmet sich schließlich einem fundamentalen Problem, das bei Darstellung der Wirkung im Frequenzraum auftreten kann. Es wird gezeigt, welcher Fehler zu Divergenzen führt, und wie diese Divergenzen vermieden werden können.

### 3.1 Funktionalintegrale — eine Einführung

Ein Funktional in dem Sinne, wie er hier gebraucht werden soll, ist eine Abbildung  $\Phi$  von einem Raum  $\mathcal{F}$  in die komplexen Zahlen  $\mathbb{C}$ , wobei  $\mathcal{F}$  beispielsweise den unendlichdimensionalen Raum der Funktionen  $x(t)$  darstellt.

$$\begin{aligned}\Phi : \mathcal{F} &\longrightarrow \mathbb{C} \\ x(t) &\longmapsto \Phi[x(t)]\end{aligned}$$

Über die Eigenschaften der Funktionen (insbesondere über deren Stetigkeit) sei zunächst noch nichts ausgesagt.

Da die Funktionen  $x(t)$  häufig durch eine endliche Zahl von Stützstellen approximiert werden (dies ist z.B. bei einer numerischen Auswertung unerlässlich), ist auch die Definition des Funktionals  $\Phi_N$  nötig.

$$\begin{aligned}\Phi_N : \mathbb{R}^N &\longrightarrow \mathbb{C} \\ (x_1, x_2, \dots, x_N) &\longmapsto \Phi[(x_1, x_2, \dots, x_N)]\end{aligned}$$

Oft ist die Verwendung von  $\Phi$  nur über den Limes  $N \rightarrow \infty$  des Funktionals  $\Phi_N$  definiert.

Ein „Funktionalintegral“ ist schließlich die Mittelung des Funktionals  $\Phi$  ( $\Phi_N$ ) über alle möglichen Funktionen ( $N$ -Tupel  $(x_1, x_2, \dots, x_N)$ ).

$$I = \int \mathcal{D}[x(t)] \Phi[x(t)] \quad (3.1)$$

$$\text{bzw. } I_N = \int dx_1 \dots \int dx_N \Phi[(x_1, x_2, \dots, x_N)] \quad (3.2)$$

Die Einführung der Funktionalintegrale in der Quantentheorie geht auf Dirac [Dir33] zurück, der die Frage aufwarf, warum noch keine Formulierung der Quantenmechanik gefunden wurde, die die klassische Lagrangesche Mechanik zum Ausgangspunkt hat (anders als die Schrödingersche Formulierung, welche von der Hamiltonschen Beschreibung ausgeht). Schließlich konnte Feynman [Fey48] zeigen, daß ein solcher alternativer Zugang – von ihm als Pfadintegralmethode bezeichnet – möglich ist. Aufbauend auf diesen Arbeiten gelang später die Formulierung der Quantenelektrodynamik, wofür jedoch eine Darstellung der Funktionalintegrale für Felder benötigt wird [Sch58]. Mittlerweile hat die Idee der Integration über Funktionale in vielen Bereichen der Physik einen festen Platz eingenommen und es sei an dieser Stelle nur repräsentativ auf zwei Bücher verwiesen, welche einen Überblick über die vielfältigen Anwendungen der Methode geben ([Pop83, Pap78]).

Das Feynmansche Pfadintegral stellt eine Vorschrift zur Berechnung der Matrixelemente des Zeitentwicklungsoperators

$$U(xt, x_0t_0) \equiv \langle x|U(t, t_0)|x_0 \rangle \quad (3.3)$$

dar. Sie lautet:

- Jeder Pfad  $x(t')$  mit  $x(t_0) = x_0$  und  $x(t) = x$  liefert einen komplexen Beitrag  $\Phi[x(t')]$  zu  $U$ .
- Alle Pfade tragen betragsmäßig gleich bei. Ihre Phasen entsprechen jedoch der klassischen Wirkung (in Einheiten von  $\hbar$ ).

$$\Phi[x(t')] = e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t')]} \quad (3.4)$$

Daraus folgt das Funktionalintegral für den Zeitentwicklungsoperator:

$$U(xt, x_0t_0) = \int \mathcal{D}[x(t')] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t')]} \quad (3.5)$$

Die Wirkung ist das Integral über die Lagrangefunktion

$$S[x(t')] = \int_{t_0}^t L(\dot{x}(t'), x(t')) dt' \quad , \quad (3.6)$$

wobei  $L$  für ein Teilchen in den einfachsten Fällen die Form

$$L(\dot{x}(t'), x(t')) = \frac{1}{2} m \dot{x}(t')^2 - V(x(t')) \quad (3.7)$$

annimmt.

Hier wird ein wesentlicher Unterschied zur klassischen Mechanik deutlich. Die klassische Bahn  $x_{\text{kl}}(t)$  extremalisiert das Wirkungsintegral. Die Gleichung (3.5) läßt sich nun so deuten, daß in einer quantenmechanischen Behandlung ein Teilchen sich auf allen Bahnen, auch den klassisch verbotenen, bewegen kann. Sollen die Eigenschaften eines solchen Teilchens richtig beschrieben werden, so muß das Pfadintegral alle dem Teilchen prinzipiell zugänglichen Bahnen enthalten. Der Beweis der Äquivalenz von Feynmanscher und Hamiltonscher Formulierung der Quantenmechanik findet sich z.B. in [Fey65, Neg88].

### 3.2 Funktionalintegrale für Operatoren in zweiter Quantisierung

Das Konzept der Funktionalintegrale in der Quantenmechanik beinhaltet die Ersetzung von Operatoren durch Zahlen. In der Herleitung des Feynmanschen Pfadintegrals treten (durch das Einschleusen von Impulseigenzuständen) die Eigenwerte  $p$  anstelle der Operatoren  $\hat{p}$ .

Für Probleme der Vielteilchenphysik (z.B. die Beschreibung von Elektronen im Festkörper) ist die Darstellung des Hamiltonoperators durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für einzelne Teilchen von großem Vorteil. Statistische Eigenschaften solcher Systeme werden mit den in Anhang A beschriebenen Green-Funktionen untersucht, für die wiederum Funktionalintegrale aufgestellt werden können. Durch welche Zahlen sind jedoch in einem solchen Funktionalintegral die Fermionen-Erzeugungs- und -Vernichtungsoperatoren zu ersetzen?

Der Vorzeichenwechsel beim Vertauschen zweier Fermionenoperatoren erzwingt, daß diese Zahlen Elemente einer Algebra mit ähnlichen Eigenschaften sein müssen — die üblicherweise verwendete Grassmann-Algebra wird in Anhang B diskutiert.

Das Funktionalintegral für die Zustandssumme wird also die Lagrangefunktion des Systems enthalten, wobei die Fermionenoperatoren durch Grassmann-Felder ersetzt werden. Die Ausintegration dieser Grassmann-Felder kann mit den in Anhang B angegebenen Formeln durchgeführt werden.

Diese Vorgehensweise ist analog zur Pfadintegralformulierung der klassischen Mechanik, kann aber nicht als *Beweis* betrachtet werden. Die exakte Herleitung verwendet sog. kohärente Zustände [Kla85]

$$|\psi_i\rangle = \left[1 + \frac{1}{2}\psi_i\psi_i^\dagger + \psi_i c_i^\dagger\right] |0\rangle \quad (3.8)$$

und wurde zum ersten Mal von Ohnuki und Kashima [Ohn78] durchgeführt. Die kohärenten Zustände existieren in einem Produktraum aus Grassmann-Algebra ( $\psi_i, \psi_i^\dagger \in \mathcal{G}$ ) und Hilbertraum ( $|0\rangle, c_i^\dagger|0\rangle \in \mathcal{H}$ ) und sind Eigenzustände zum Vernichtungsoperator  $c_i$ :

$$c_i |\psi_i\rangle = \psi_i |\psi_i\rangle \quad (3.9)$$

Diese Eigenschaft führt zur Ersetzung der Operatoren  $c_i, c_i^\dagger$  durch die Grassmann-Variablen  $\psi_i, \psi_i^\dagger$ . Eine genauere Beschreibung findet sich in [Neg88] bzw. in Kap. 4.1 für Fälle mit einer zusätzlichen Einschränkung des Hilbertraums. Für die Diskussion in Kap. 3.3 ist nur folgendes Ergebnis relevant:

Betrachtet werden soll das System eines einzelnen spinlosen Fermions mit der Energie  $\varepsilon$ , welches durch

$$H = \varepsilon c^\dagger c \quad (3.10)$$

definiert ist. Für die Zustandssumme ergibt sich:

$$Z = 1 + e^{-\beta\varepsilon} \quad (3.11)$$

Die Funktionalintegraldarstellung für die Zustandssumme lautet:

$$Z = \lim_{N \rightarrow \infty} Z_N \quad \text{mit} \quad (3.12)$$

$$Z_N = \int d\psi_N^\dagger d\psi_N \dots d\psi_1^\dagger d\psi_1 \exp \left[ S_N(\psi, \psi^\dagger) \right] \quad (3.13)$$

und der Wirkung

$$S_N(\psi, \psi^\dagger) = \sum_{n=1}^N \psi_n^\dagger (\psi_{n-1} - \psi_n) - \frac{\beta\varepsilon}{N} \sum_{n=1}^N \psi_n^\dagger \psi_{n-1} \quad (3.14)$$

### 3.3 Lösung von Funktionalintegralen im Frequenzraum

Für die Wirkung (3.14) hat sich im Limes  $N \rightarrow \infty$  folgende abkürzende Schreibweise etabliert:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} S_N(\psi, \psi^\dagger) = - \int_0^\beta d\tau \psi^\dagger(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \psi(\tau) - \varepsilon \int_0^\beta d\tau \psi^\dagger(\tau) \psi(\tau) \quad (3.15)$$

Hier wurden die mit  $n = 1, \dots, N$  indizierten Grassmann-Felder durch kontinuierliche Felder  $\psi^\dagger(\tau), \psi(\tau)$  im Intervall  $[0, \beta]$  ersetzt. Diese Wirkung läßt sich in den Frequenzraum transformieren, d.h. durch die mit

$$\psi(i\omega_n) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \psi(\tau) \quad , \quad \omega_n = \frac{\pi}{\beta}(2n-1) \quad , \quad n \in \mathbb{Z} \quad (3.16)$$

$$\psi(\tau) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n \tau} \psi(i\omega_n) \quad (3.17)$$

definierten Grassmann-Feldern  $\psi^\dagger(i\omega_n), \psi(i\omega_n)$  ausdrücken:

$$S(\psi, \psi^\dagger) = \beta \sum_{n=-\infty}^{\infty} (i\omega_n - \varepsilon) \psi^\dagger(i\omega_n) \psi(i\omega_n) \quad (3.18)$$

Die Ausintegration dieser Felder ergibt für die Zustandssumme

$$Z = \prod_{n=-\infty}^{\infty} \beta(-i\omega_n + \varepsilon) \quad , \quad (3.19)$$

ein Ausdruck, der im Gegensatz zu Gl. (3.11) divergiert.

Wo aber liegt der Fehler?

Wird die kontinuierliche Schreibweise richtig verstanden — nämlich als Abkürzung für den Limes  $N \rightarrow \infty$  —, so muß auch die Fouriertransformation zunächst für endliche  $N$  durchgeführt werden. Hin- und Rücktransformation haben nun die Form

$$\psi(i\omega_n) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N e^{i\omega_n \tau_l} \psi_l \quad , \quad \tau_l = (l-1) \frac{\beta}{N} \quad (3.20)$$

$$\psi_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{-i\omega_n \tau_l} \psi(i\omega_n) \quad (3.21)$$

wobei die Grassmann-Felder  $\psi^\dagger(i\omega_n), \psi(i\omega_n)$  nur für  $N$  Matsubara-Frequenzen  $\omega_n = (2n-1)\pi/\beta$  definiert sind. Für die Wirkung gilt damit:

$$S_N(\psi, \psi^\dagger) = - \sum_{n=1}^N \psi^\dagger(i\omega_n) \psi(i\omega_n) \left( 1 - \left( 1 - \frac{\beta\varepsilon}{N} \right) \exp \left[ i\omega_n \frac{\beta}{N} \right] \right) \quad (3.22)$$

Die Ausintegration der Grassmann-Felder liefert diesmal:

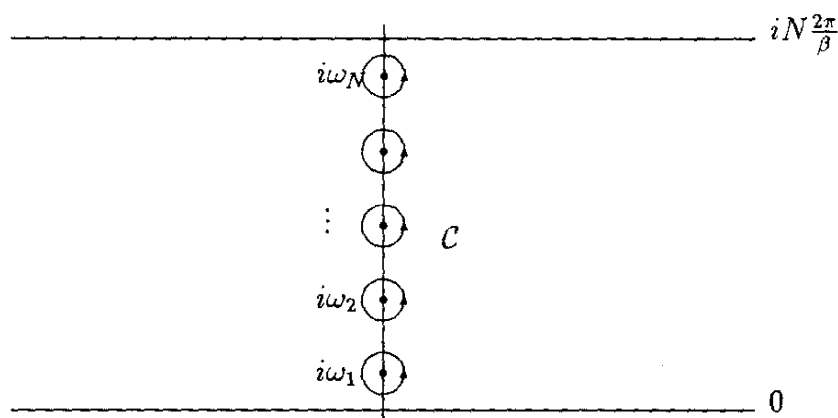
$$Z_N = \prod_{n=1}^N \left( 1 - \left( 1 - \frac{\beta \varepsilon}{N} \right) \exp \left[ i\omega_n \frac{\beta}{N} \right] \right) \quad (3.23)$$

Dieses Produkt kann geschrieben werden als:

$$Z_N = \exp [\ln Z_N] = \exp \left[ \sum_{n=1}^N \ln \left( 1 - \left( 1 - \frac{\beta \varepsilon}{N} \right) \exp \left[ i\omega_n \frac{\beta}{N} \right] \right) \right] \quad (3.24)$$

Die endliche Summe im Exponenten wird mit einer Poissonschen Summenformel ausgewertet.

### Poissonsche Summenformel für endliche Summen



**Abb. 3.1:** Integrationsweg in der komplexen Ebene zur Bestimmung von  $I$ .

Berechnet werden soll die Summe:

$$I = \frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^N F(i\omega_n) \quad , \quad \omega_n = \frac{\pi}{\beta}(2n-1) \quad (3.25)$$

Diese Summe kann durch ein Integral über den Weg  $C$  (siehe Abb. 3.1) ersetzt werden. Daraus resultiert die Poissonsche Summenformel für endliche Summen:

$$I = -\frac{1}{2\pi i} \int_C dz F(z) \frac{1}{1 + e^{\beta z}} \quad (3.26)$$

Die weitere Auswertung ist nur sinnvoll für Funktionen, die über  $\exp[z\beta/N]$  von  $z$  abhängen, d.h. folgende Periodizitätseigenschaft besitzen:

$$F\left(z + ikN \frac{2\pi}{\beta}\right) = F(z) \quad , \quad k \in \mathbb{Z} \quad (3.27)$$



Das Zusammenziehen des Weges  $C$  soll an dem Beispiel

$$F(z) = \ln \left( 1 - a \exp \left[ z \frac{\beta}{N} \right] \right) \quad (3.28)$$

vorgeführt werden. Steht  $\ln$  in (3.28) für den Hauptzweig des Logarithmus, so ist  $F(z)$  überall analytisch, außer im Intervall  $[-\frac{N}{\beta} \ln a, \infty[$ , sowie den Intervallen, die sich aus diesem durch Verschieben um  $ikN2\pi/\beta$  ( $k \in \mathbb{Z}$ ) ergeben. Abb. 3.2 zeigt, wie der Weg zusammengezogen werden kann. Die nicht gezeigten Verbindungen der Wege  $C_1, C_2$  und  $C_3, C_4$  im Unendlichen geben keinen Beitrag zum Integral. Die Beiträge von  $C_1$  und  $C_2$  heben sich auf.

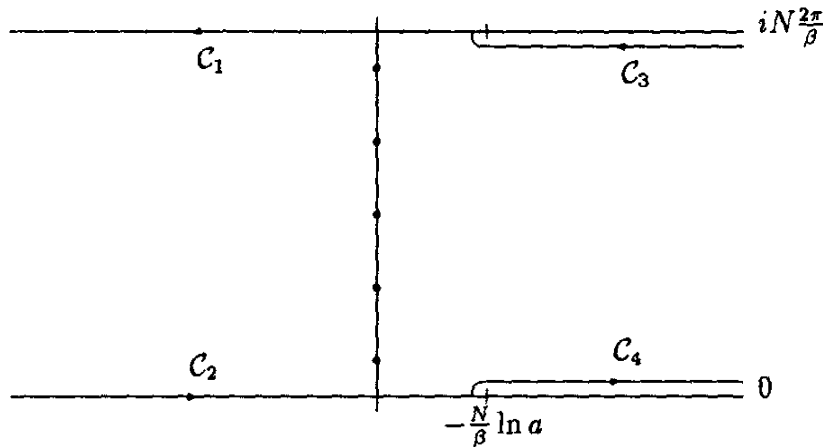
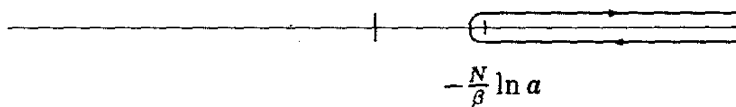


Abb. 3.2: Für die Funktion  $F(z)$  aus Gl. (3.28) kann der Weg  $C$  auf diese Weise zusammengezogen werden.

Übrig bleibt also folgender Beitrag:



$$I = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\frac{N}{\beta} \ln a}^{\infty} d\omega [F(\omega + i\delta) - F(\omega - i\delta)] \frac{1}{1 + e^{\beta\omega}} \quad (3.29)$$

Die Differenz der Funktionswerte oberhalb und unterhalb des Schnittes ergibt gerade  $-2\pi i$ :

$$I = \int_{-\frac{N}{\beta} \ln a}^{\infty} d\omega \frac{1}{1 + e^{\beta\omega}} = \frac{1}{\beta} \ln (1 + a^N) \quad (3.30)$$

Damit folgt für die Zustandssumme

$$Z_N = \exp \left[ \ln \left( 1 + \left( 1 - \frac{\beta\varepsilon}{N} \right)^N \right) \right] = 1 + \left( 1 - \frac{\beta\varepsilon}{N} \right)^N \quad (3.31)$$

und im Limes  $N \rightarrow \infty$

$$Z = \lim_{N \rightarrow \infty} Z_N = 1 + e^{-\beta\varepsilon} \quad , \quad (3.32)$$

in Übereinstimmung mit dem exakten Ergebnis von Gl. (3.11).

### Green-Funktionen im Frequenzraum

In den Diagonaldarstellungen (3.18) bzw. (3.22) ergeben sich die Green-Funktionen aus den Inversen der Diagonalelemente.

$$G(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon} \quad \text{kontinuierliche Darstellung} \quad (3.33)$$

$$G_N(i\omega_n) = \frac{\beta}{N} \frac{1}{\left(1 - \left(1 - \frac{\beta\varepsilon}{N}\right) \exp\left[i\omega_n \frac{\beta}{N}\right]\right)} \quad \text{diskrete Darstellung} \quad (3.34)$$

Wird die Tatsache, daß die Zustandssumme (3.19) divergiert, außer acht gelassen, so liefert die kontinuierliche Darstellung das exakte Ergebnis für die Green-Funktion. Das Resultat der diskreten Darstellung (3.34) ist im Limes  $N \rightarrow \infty$  mit (3.33) identisch. Jedoch ist zu beachten, daß die Ersetzung

$$\exp\left[i\omega_n \frac{\beta}{N}\right] \rightarrow \left(1 + i\omega_n \frac{\beta}{N}\right) \quad (3.35)$$

nur für festgehaltenes  $n$  korrekt ist! Für z.B.  $n = N/2$  ( $N$  geradzahlig) gilt hingegen:

$$\exp\left[i\omega_n \frac{\beta}{N}\right] \rightarrow -1 \quad (3.36)$$

Die diskrete Darstellung bietet somit die Möglichkeit, Funktionalintegrale auch im Frequenzraum auszuwerten. Die dabei auftretenden endlichen Summen können mit Hilfe einer modifizierten Poissonschen Summenformel berechnet werden.

## 4 Die Theorie und erste einfache Anwendungen

Betrachten wir zunächst einen einfachen Hamiltonoperator der Form

$$H = \sum_{\sigma} \varepsilon_f f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + U f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} f_{\downarrow}^{\dagger} f_{\downarrow} \quad . \quad (4.1)$$

Die Fermionenoperatoren  $f_{\sigma}^{\dagger}$  und  $f_{\sigma}$  erzeugen bzw. vernichten ein Fermion (z.B. ein Elektron) mit Spin  $\sigma = \uparrow$  oder  $\sigma = \downarrow$  in einem Zustand der Energie  $\varepsilon_f$ . Diese Energie wird relativ zum chemischen Potential  $\mu$  gemessen, welches hier und im folgenden gleich Null gesetzt wird. Der zweite Term beschreibt die Coulombwechselwirkung, die bei gleichzeitiger Besetzung des Zustands mit zwei Elektronen die Energie des Systems um den Wert  $U$  erhöht.

Vier Zustände spannen den Hilbertraum auf:

$$\mathcal{H} = \{|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle\} \quad (4.2)$$

Mit der in Kap. 3.2 kurz beschriebenen Theorie läßt sich das Funktionalintegral für z.B. die Zustandssumme des durch (4.1) definierten Systems leicht aufstellen. Die Wirkung enthält jedoch Produkte aus vier Grassmann-Feldern — Ausdrücke dieser Art sind alles andere als einfach zu behandeln (siehe z.B. [Sou91]; dort werden solche Terme direkt ausgewertet). Sie können zwar mit Hilfe der Hubbard-Stratonovich-Transformation [Str57, Hub59] auf Ausdrücke mit nur je zwei Grassmann-Feldern zurückgeführt werden, doch müssen komplexe Felder eingeführt werden, die weitere Integrationen erfordern.

Wie in Kap. 2.1 diskutiert, ist es für viele Systeme (insbesondere solche mit 4f-Zuständen) sinnvoll, einen hohen Wert für  $U$  anzunehmen. Damit geraten aber die auf die Hubbard-Stratonovich-Transformation beruhenden (v.a. numerischen) Methoden in Schwierigkeiten.

Viel günstiger wäre es also, gleich den Limes  $U \rightarrow \infty$  zu betrachten, in dem die Doppelbesetzung des Zustands komplett ausgeschlossen wird. Der Hilbertraum reduziert

sich damit auf

$$\mathcal{H}' = \{|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\} \quad . \quad (4.3)$$

Wird das Doppelbesetzungsverbot auf geeignete Weise gewährleistet, so kann der  $U$ -Term im Hamiltonoperator (4.1) weggelassen werden.

Mit Hilfe der Hubbardoperatoren [Hub64, Hub66] (auch „Standardbasisoperatoren“)

$$X_{ij} = |i\rangle\langle j| \quad (i, j = 0, \uparrow, \downarrow) \quad , \quad (4.4)$$

die von sich aus wegen

$$X_{ij}|\uparrow\downarrow\rangle = 0 \quad (i, j = 0, \uparrow, \downarrow) \quad (4.5)$$

das Doppelbesetzungsverbot erfüllen, schreibt sich der Hamiltonoperator als

$$H = \sum_{\sigma} \varepsilon_{\sigma} X_{\sigma 0} X_{0\sigma} \quad . \quad (4.6)$$

Jedoch gelten für die Operatoren  $X_{ij}$  nicht mehr die Fermionenvertauschungsrelationen, wodurch die Anwendung von Standardverfahren für Fermionenprobleme nicht mehr oder nur in stark abgewandelter Form möglich ist.

In Kap. 2.3 wurde schon beschrieben, wie durch die Ersetzung der  $X_{ij}$  durch ein Produkt aus Fermi- und Bose-Operatoren ein Funktionalintegral aufgestellt werden kann, das jedoch eine zusätzliche Delta-Funktion enthalten muß. Damit sind ebenfalls Schwierigkeiten verbunden. Wie können diese umgangen werden?

Weller [Wel90] entwickelte eine Theorie, in der das Funktionalintegral mit Hilfe kohärenter Zustände hergeleitet wird, die so beschaffen sind, daß sie das Doppelbesetzungsverbot implizit enthalten. Diese Theorie und die daraus folgenden Formeln für die Zustandssumme  $Z$  und die thermodynamische Green-Funktion  $G(\tau)$  werden in Kap. 4.1 genau diskutiert.

Die Wellersche Methode ist im Prinzip anwendbar auf alle Modelle stark korrelierter Elektronensysteme, die Doppelbesetzungsverbote enthalten. Um die Theorie zunächst anhand einfacher, analytisch exakt lösbarer Modelle zu überprüfen, werden in Kap. 4.2 und 4.3 ein Einzustands- bzw. ein Zweizustandsmodell untersucht. Die Tatsache, daß Zustandssummen und Green-Funktionen korrekt bestimmt werden können, unterstreicht die Richtigkeit des verwendeten Ansatzes. In Kap. 4.4 werden dann Anwendungen auf das ein- [Wel90a] bzw. zweidimensionale [Zha91] Hubbard-Modell diskutiert.

In Kap. 4.5 wird schließlich beschrieben, wie innerhalb der Theorie zeitabhängige Green-Funktionen bestimmt werden können. Die Kenntnis dieser Funktionen hätte gegenüber der Kenntnis der thermodynamischen Green-Funktionen den Vorteil, daß aus ihnen direkt die physikalisch relevanten Spektralfunktionen bestimmt werden können (siehe dazu auch die Diskussion in Kap. 5.3).

## 4.1 Die Theorie von Weller

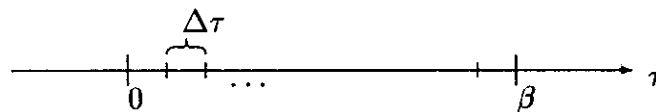
Ziel dieses Abschnitts ist es, eine Funktionalintegraldarstellung zu finden, die das in stark korrelierten Elektronensystemen auftretende Doppelbesetzungsverbot implizit enthält. Ausgangspunkt bildet dabei ein Hamiltonoperator z.B. der Form (4.6), in dem die Fermionenoperatoren bereits durch Hubbard-Operatoren ersetzt wurden. Im folgenden sind jeweils nur die wichtigsten Rechenschritte angegeben; Nebenrechnungen sind in Anhang C zu finden.

### Zustandssumme

Berechnet werden soll zunächst die Zustandssumme

$$Z = \text{Sp} \left[ e^{-\beta H} \right] \quad (4.7)$$

mit  $\beta = 1/(k_B T)$  ( $k_B$ : Boltzmann-Konstante,  $T$ : Temperatur), wobei die Spur auf  $\mathcal{H}'$  (4.3) eingeschränkt ist<sup>1</sup>. Das Intervall  $[0, \beta]$  wird in  $N$  gleiche „Zeitschritte“  $\Delta\tau = \beta/N$  zerlegt:



Damit gilt:

$$e^{-\beta H} = e^{-\Delta\tau H} e^{-\Delta\tau H} \dots e^{-\Delta\tau H} \quad (4.8)$$

Bei dieser Formel handelt es sich wohlgerneht *nicht* um die Trotter-Zerlegung [Tro59]

$$e^{A+B} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ e^{\frac{A}{N}} e^{\frac{B}{N}} \right]^N \quad (4.9)$$

welche (falls  $[A, B] \neq 0$ ) nur im Limes  $N \rightarrow \infty$  erfüllt ist, sondern um eine für alle Werte von  $N$  wegen  $[H, H] = 0$  exakt erfüllte Relation!

<sup>1</sup>Der Operator  $\exp(-\beta H)$  allein kann den Zustand  $|\uparrow\downarrow\rangle$  nicht herausprojizieren.

Zwischen den  $e^{-\Delta\tau H}$  werden nun Identitätsoperatoren im reduzierten Hilbertraum eingeschoben:

$$Z = \text{Sp} \left[ e^{-\Delta\tau H} \mathbb{I}_N e^{-\Delta\tau H} \mathbb{I}_{N-1} \dots \mathbb{I}_2 e^{-\Delta\tau H} \right] \quad (4.10)$$

mit

$$\mathbb{I}_n = |0\rangle\langle 0| + |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| \quad (n = 2, \dots, N) \quad (4.11)$$

(Der Sinn der Nummerierung wird später offensichtlich.) Diese Identitäten lassen sich nun ähnlich wie im Fall ohne Doppelbesetzungsverbot [Neg88] durch kohärente Zustände darstellen. Der Ansatz

$$\mathbb{I}_n = \int_{b_n} \int d\psi_n^\dagger d\psi_n |\psi_n, b_n\rangle\langle\psi_n, b_n| \quad (4.12)$$

mit den kohärenten Zuständen

$$|\psi_n, b_n\rangle = \left[ 1 + \frac{1}{2}\psi_n\psi_n^\dagger + \sum_\sigma \psi_n b_{\sigma n} X_{\sigma 0} \right] |0\rangle = \exp \left[ \frac{1}{2}\psi_n\psi_n^\dagger + \sum_\sigma \psi_n b_{\sigma n} X_{\sigma 0} \right] |0\rangle \quad (4.13)$$

ist der Darstellung (4.11) äquivalent, wenn von den komplexen  $b$ -Feldern gefordert wird:

$$\int_{b_n} b_{\sigma n}^* b_{\sigma' n} = \delta_{\sigma, \sigma'} \quad \sigma, \sigma' = \uparrow, \downarrow \quad (4.14)$$

$$\int_{b_n} 1 = 1 \quad (4.15)$$

Ähnlich wie  $\int d\psi$  als eine Vorschrift zu verstehen ist, wie das Grassmann-Feld  $\psi$  auszuintegrieren ist, muß  $\int_{b_n}$  als Symbol aufgefaßt werden, welches erst bei einer konkreten Darstellung der  $b$ -Felder in ein wirkliches Integral umgewandelt werden kann (siehe (4.32-39)).

Die kohärenten Zustände sind Eigenzustände des Operators  $X_{0\sigma}$

$$X_{0\sigma} |\psi_n, b_n\rangle = \psi_n b_{\sigma n} |\psi_n, b_n\rangle \quad (4.16)$$

Diese Eigenschaft ermöglicht im Funktionalintegral die Ersetzung der Operatoren durch „Zahlen“ im weitesten Sinne — eben dem Produkt aus einem Grassmann-Feld und einer komplexen Zahl. Dies erinnert an die in Kap. 2.3 beschriebene Slave-boson Methode (zum Vergleich der beiden Methoden siehe weiter unten).

Zu beachten ist, daß wegen der Einschränkung des Hilbertraums nur noch *ein* fermionischer Freiheitsgrad pro Zeitschritt  $n$  betrachtet werden muß (die Grassmann-Felder  $\psi_n$  hängen nicht mehr vom Spin ab), welcher die An- bzw. Abwesenheit eines Elektrons beschreibt. Die restlichen Freiheitsgrade müssen durch spinabhängige komplexe

Felder  $b_{\sigma n}$  repräsentiert werden. Dies entspricht der physikalischen Idee der Trennung von Ladungs- und Spinfreiheitsgraden.

Die Spur über den reduzierten Hilbertraum kann ebenfalls exakt durch einen Erwartungswert zwischen kohärenten Zuständen dargestellt werden:

$$\begin{aligned} \text{Sp}[\dots] &= \langle 0 | \dots | 0 \rangle + \langle \uparrow | \dots | \uparrow \rangle + \langle \downarrow | \dots | \downarrow \rangle \\ &= \int_{b_1} \int d\psi_1^\dagger d\psi_1 \langle -\psi_1, b_1 | \dots | \psi_1, b_1 \rangle \end{aligned} \quad (4.17)$$

Das Minuszeichen in  $\langle -\psi_1, b_1 |$  wird im folgenden durch die Definition  $\psi_1^\dagger \psi_0 \equiv -\psi_1^\dagger \psi_N$  berücksichtigt. Somit sind nur noch Matrixelemente der Form  $\langle \psi_n, b_n | e^{-\Delta\tau H} | \psi_{n-1}, b_{n-1} \rangle$  zu berechnen. Für den Hamiltonoperator (4.6) ist dies exakt möglich, in nichttrivialen Fällen (siehe z.B. (2.1)) nur bis zu Termen der Ordnung  $\Delta\tau$ . In dieser Ordnung kann  $\exp(-\Delta\tau H)$  durch den entsprechenden normalgeordneten Operator  $:\exp(-\Delta\tau H):$  ersetzt werden, der sich von dem ursprünglichen Operator nur dadurch unterscheidet, daß (ohne Rücksicht auf Vertauschungsrelationen) alle Erzeuger vor den Vernichtern stehen. Dies hat den Vorteil, daß die Erzeugungsoperatoren nach links auf die kohärenten Zustände angewendet werden können und die Vernichtungsoperatoren entsprechend nach rechts.

Damit folgt:

$$\begin{aligned} \langle \psi_n, b_n | : e^{-\Delta\tau H} : | \psi_{n-1}, b_{n-1} \rangle = \\ \langle \psi_n, b_n | \psi_{n-1}, b_{n-1} \rangle \exp \left[ -\Delta\tau H(X_{\sigma 0} \rightarrow \psi_n^\dagger b_{\sigma n}^*, X_{0\sigma} \rightarrow \psi_{n-1} b_{\sigma n-1}) \right] \end{aligned} \quad (4.18)$$

Die kohärenten Zustände sind nicht orthogonal aufeinander, sondern ergeben einen Beitrag zum Funktionalintegral:

$$\langle \psi_n, b_n | \psi_{n-1}, b_{n-1} \rangle = \exp \left[ \frac{1}{2} \psi_n \psi_n^\dagger + \frac{1}{2} \psi_{n-1} \psi_{n-1}^\dagger + \psi_n^\dagger \psi_{n-1} \sum_{\sigma} b_{\sigma n}^* b_{\sigma n-1} \right] \quad (4.19)$$

Diese Gleichungen führen zur Funktionalintegraldarstellung für die Zustandssumme

$$Z = \int_b \int \mathcal{D}\psi^\dagger \mathcal{D}\psi \exp \left[ S(\psi, \psi^\dagger, b) \right] \quad (4.20)$$

mit der von Grassmann-Variablen und komplexen Feldern abhängigen Wirkung

$$\begin{aligned} S(\psi, \psi^\dagger, b) &= \sum_{n=1}^N \psi_n^\dagger \left( \psi_{n-1} \left( \sum_{\sigma} b_{\sigma n}^* b_{\sigma n-1} \right) - \psi_n \right) \\ &\quad - \Delta\tau \sum_{n=1}^N H \left( X_{\sigma 0} \rightarrow \psi_n^\dagger b_{\sigma n}^*, X_{0\sigma} \rightarrow \psi_{n-1} b_{\sigma n-1} \right) \end{aligned} \quad (4.21)$$

Die Integralsymbole sind jeweils Abkürzungen für Vielfachintegrationen:

$$\int \mathcal{D}\psi^\dagger \mathcal{D}\psi = \int d\psi_N^\dagger d\psi_N d\psi_{N-1}^\dagger d\psi_{N-1} \dots d\psi_1^\dagger d\psi_1 \quad (4.22)$$

$$\int_b = \int_{b_N} \int_{b_{N-1}} \dots \int_{b_1} \quad (4.23)$$

Der Term  $\sum_\sigma b_{\sigma n}^* b_{\sigma n-1}$  im ersten Teil (dem kinetischen Teil) der Wirkung (4.21) verdient eine besondere Betrachtung. Er verhindert die im Limes  $N \rightarrow \infty$  übliche Darstellung als Zeitableitung:

$$\sum_{n=1}^N \psi_n^\dagger (\psi_{n-1} - \psi_n) \rightarrow \int d\tau \psi^\dagger(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \psi(\tau) \quad (4.24)$$

Damit wird klar, daß diese Form der Wirkung auf keinen Fall über einen Hamiltonoperator mit normalen Fermionen- und Bosonenoperatoren erhalten werden kann. Die Suche nach einem solchen Ersatz-Hamiltonoperator ist also aussichtslos. Diese Struktur der Wirkung unterscheidet die Wellersche Methode auch klar von der Slaveboson-Methode, in der die kinetischen Terme sowohl der Grassmann- als auch der komplexen Felder als Zeitableitung geschrieben werden können (siehe z.B. [Wel90]). Dafür entfällt hier die Delta-Funktion im Integralmaß. Auch haben die  $b$ -Felder in der Wellerschen Theorie keine direkte physikalische Bedeutung (entsprechen also nicht Erzeugern oder Vernichtern für leere Zustände). Sie sind im wesentlichen nur dafür verantwortlich, die Spin-Multiplizität des höchstens einfach besetzten Zustands richtig zu zählen.

Wie später noch diskutiert wird, bringt der Term  $\sum_\sigma b_{\sigma n}^* b_{\sigma n-1}$  auch gewisse Nachteile in analytischen und numerischen Auswertungen.

### Thermodynamische Green-Funktion

In der Herleitung des Funktionalintegrals für die thermodynamische Green-Funktion

$$-G(\tau) = \langle X_{0\sigma}(\tau) X_{\sigma 0}(0) \rangle = \frac{1}{Z} \text{Sp} \left[ e^{-\beta H} X_{0\sigma}(\tau) X_{\sigma 0}(0) \right] \quad (4.25)$$

mit

$$X_{\sigma 0}(\tau) = e^{\tau H} X_{\sigma 0} e^{-\tau H} \quad (4.26)$$

ist es zweckmäßig,  $\tau$  auf die Werte  $\tau = (n-1) \frac{\beta}{N}$ ,  $n = 1 \dots N$  einzuschränken, damit die Exponentialfunktionen nur Vielfache von  $-\Delta\tau H$  enthalten. Die Zerlegung lautet dann:

$$\left[ e^{-\beta H} X_{\sigma 0}(\tau) X_{0\sigma}(0) \right] = \left[ \underbrace{e^{-\Delta\tau H} \dots e^{-\Delta\tau H}}_{(N-n+1) \text{ mal}} X_{0\sigma} \underbrace{e^{-\Delta\tau H} \dots e^{-\Delta\tau H}}_{(n-1) \text{ mal}} X_{\sigma 0} \right] = \dots \quad (4.27)$$



Die Einheitsoperatoren müssen vor  $X_{\sigma_0}$  und nach  $X_{0\sigma}$  eingeschoben werden.

$$\dots = \left[ e^{-\Delta\tau H} \mathbb{I}_{N-1} e^{-\Delta\tau H} \dots e^{-\Delta\tau H} X_{0\sigma} \mathbb{I}_n e^{-\Delta\tau H} \dots e^{-\Delta\tau H} \mathbb{I}_1 X_{\sigma_0} \right] \quad (4.28)$$

Die Operatoren in (4.28) können nun wegen (4.16) sofort durch Produkte aus Grassmann-Variablen und komplexen Feldern ersetzt werden. Wird die Spur durch

$$\text{Sp}[\dots] = \int_{b_N} \int d\psi_N^\dagger d\psi_N \langle \psi_N, b_N | \dots | -\psi_N, b_N \rangle \quad (4.29)$$

dargestellt, unterscheidet sich das Funktionalintegral für den Zähler der Green-Funktion nur durch den Ausdruck  $\psi_n b_{\sigma n} \psi_1^\dagger b_{\sigma 1}^*$  vom Funktionalintegral für die Zustandssumme. Es gilt also:

$$-G(\tau) = \frac{1}{Z} \int_b \int \mathcal{D}\psi^\dagger \mathcal{D}\psi \psi_n b_{\sigma n} \psi_1^\dagger b_{\sigma 1}^* \exp \left[ S(\psi, \psi^\dagger, b) \right] \quad (4.30)$$

Diese Vorgehensweise scheitert jedoch für  $\tau = \beta$ . In diesem Fall können nämlich die beiden Bedingungen für das Einschoben der Einheitsoperatoren — die  $\mathbb{I}_i$  müssen vor  $X_{\sigma_0}$  und nach  $X_{0\sigma}$  eingeschoben werden; zwischen zwei Operatoren  $\exp(-\Delta\tau H)$  steht jeweils ein  $\mathbb{I}_i$  — nicht gleichzeitig erfüllt werden. Dieses Problem wird einfach dadurch gelöst, daß die Relation

$$G(0) + 2G(\beta) = 1 \quad (4.31)$$

(siehe Anhang A) zur Bestimmung von  $G(\beta)$  herangezogen wird.

Die Form der Funktionalintegrale für die Zustandssumme (4.20) und die Green-Funktion (4.30) impliziert, daß bei deren Berechnung zunächst von einem endlichen  $N$  ausgegangen wird und anschließend (falls dies möglich ist) der Limes  $N \rightarrow \infty$  durchgeführt wird.

### Darstellungen für die $b$ -Felder

Eine Stärke der Wellerschen Methode liegt darin, daß eine Vielzahl verschiedenster Darstellungen die für die  $b$ -Felder geforderten Beziehungen (4.14/15) erfüllen. Diese Darstellungen sind zum Teil eher für eine numerische Auswertung oder eher für analytische Näherungsverfahren geeignet. Nur in Ausnahmefällen (siehe Kap. 4.2 und 4.3) können die Gleichungen (4.14/15) ohne eine explizite Darstellung berücksichtigt werden.

In [Wel90] wurden vier Darstellungen vorgeschlagen, von denen drei hier genauer diskutiert werden sollen.

## a) Ising-Darstellung

Für numerische Untersuchungen ist es am günstigsten, das Integral über das  $b$ -Feld durch eine Summe aus möglichst wenig Konfigurationen von  $b_{\uparrow}$  und  $b_{\downarrow}$  zu ersetzen. Die Mindestzahl an Konfigurationen beträgt zwei und die in [Wel90] vorgeschlagene (auch in Kap. 5.2 verwendete) Darstellung lautet:

$$b_{\uparrow} \equiv 1 \quad b_{\downarrow} = \pm 1 \quad (4.32)$$

$$\int_b \dots = \frac{1}{2} \sum_{b_{\uparrow} = \pm 1} \dots \quad (4.33)$$

Sie enthält scheinbar eine Unsymmetrie in der Behandlung von Spin  $\uparrow$  und  $\downarrow$ . Trotzdem dürfen die Ergebnisse für z.B. die Besetzung in einem Fall ohne Magnetfeld nicht vom Spin abhängen. Eine symmetrische Darstellung ist:

$$(b_{\uparrow}^i, b_{\downarrow}^i) = \begin{cases} (1, 0) & : i = 1 \\ (0, 1) & : i = 2 \end{cases} \quad (4.34)$$

mit

$$\int_b \dots = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \dots \quad (4.35)$$

b)  $U(1)$ -Darstellung

Für analytische Untersuchungen insbesondere Sattelpunktnäherungen sind diskrete Darstellungen nicht geeignet. Die einfachste Integraldarstellung ersetzt die  $b$ -Felder durch eine Phase  $\exp(\pm i\varphi)$  und das Symbol  $\int_b$  durch eine Integration über den Winkel  $\varphi$ :

$$b_{\uparrow} = b_{\downarrow}^* = e^{i\varphi} \quad (4.36)$$

$$\int_b \dots = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\varphi \dots \quad (4.37)$$

In Kap. 4.3 wird diese Ersetzung den Ausgangspunkt für den Versuch einer Sattelpunktnäherung bilden.

## c) Darstellung in der ganzen komplexen Ebene

Sie lautet

$$b_{\uparrow} = b_{\downarrow}^* \quad (4.38)$$

$$\int_b \dots = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d \operatorname{Re} b_{\uparrow} d \operatorname{Im} b_{\uparrow} e^{-|b_{\uparrow}|^2} \dots \quad (4.39)$$

und kann — genau wie die Darstellung zuvor — als Ausgangspunkt für Sattelpunktnäherungen dienen. Rechnungen mit dieser Darstellung sind nicht in der vorliegenden Arbeit aufgenommen worden.

Bei den letzten beiden Fällen ist zu beachten, daß jeweils das Integralmaß explizit angegeben werden kann, und dadurch eine exakte Auswertung z.B. der Zustandssumme überhaupt erst möglich ist — im Gegensatz zu Funktionalintegralmethoden, die nicht auf kohärenten Zuständen beruhen (siehe z.B. [Pop83]).

### Erweiterung auf höhere Spinrentartungen

Im Falle eines mehr als zweifach entarteten Niveaus inklusive des Doppelbesetzungsverbots hat der Hamiltonoperator (4.6) exakt dieselbe Form, aber  $\sigma$  umfaßt nicht mehr nur die zwei Einstellungen  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ , sondern  $\nu_f$  verschiedene Spinrentstände  $\sigma = 1, 2, \dots, \nu_f$ . Der eingeschränkte Hilbertraum  $\mathcal{H}'$  hat dann die Dimension  $\nu_f + 1$  und die Identität in  $\mathcal{H}'$  lautet:

$$\mathbb{I}_n = |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| + \dots + |\nu_f\rangle\langle \nu_f| \quad (4.40)$$

Die kohärenten Zustände haben dieselbe Form wie in (4.13), nur die von den  $b$ -Feldern zu erfüllenden Gleichungen (4.14/15) müssen allgemeiner geschrieben werden:

$$\int_{b_n} b_{\sigma n}^* b_{\sigma' n} = \delta_{\sigma, \sigma'} \quad \sigma, \sigma' = 1, \dots, \nu_f \quad (4.41)$$

$$\int_{b_n} 1 = 1 \quad (4.42)$$

Da der Fall  $\nu_f > 2$  in dieser Arbeit nicht weiter behandelt wird, wurde auch nicht der Versuch unternommen, explizite Darstellungen für die Gleichungen (4.41/42) zu entwickeln.

## 4.2 Anwendung auf das Einzustandsmodell

Nachdem im vorherigen Kapitel die Theorie bis hin zu den Funktionalintegraldarstellungen für die Zustandssumme  $Z$  und die thermodynamische Green-Funktion  $G(\tau)$  ausgearbeitet wurde, sollen diese Größen für das einfache System eines einzelnen, zweifach spinrentarteten Niveaus mit Doppelbesetzungsverbot berechnet werden (siehe auch Gl. (4.6)):

$$H = \sum_{\sigma} \varepsilon_f X_{\sigma 0} X_{0\sigma} \quad (4.43)$$

Die analytisch durch z.B. direkte Erwartungswertbildung leicht herzuleitenden Ergebnisse lauten:

$$Z = 1 + 2e^{-\beta\varepsilon_f} \quad (4.44)$$

$$-G(\tau) = \frac{1}{Z} e^{-\tau\varepsilon_f} \quad (4.45)$$

Die Wirkung hat nach (4.21) die Form

$$\begin{aligned} S(\psi, \psi^\dagger, b) &= \sum_{n=1}^N \psi_n^\dagger \left( \psi_{n-1} \left( \sum_{\sigma} b_{\sigma n}^* b_{\sigma n-1} \right) - \psi_n \right) \\ &\quad - \Delta\tau\varepsilon_f \sum_{n=1}^N \psi_n^\dagger \psi_{n-1} \sum_{\sigma} b_{\sigma n}^* b_{\sigma n-1} \\ &= - \sum_{nm} \psi_n^\dagger M_{nm}(b) \psi_m \end{aligned} \quad (4.46)$$

mit

$$M_{nm}(b) = \delta_{nm} - (1 - \Delta\tau\varepsilon_f) \sum_{\sigma} b_{\sigma n}^* b_{\sigma n-1} \delta_{n-1, m} \quad (4.47)$$

### Berechnung der Zustandssumme

Nach (4.20) gilt:

$$Z = \int_b \int \mathcal{D}\psi^\dagger \mathcal{D}\psi \exp \left[ - \sum_{nm} \psi_n^\dagger M_{nm}(b) \psi_m \right] \quad (4.48)$$

An dieser Stelle der Auswertung können im Prinzip zwei Wege gewählt werden.

- Zuerst werden die komplexen Felder unter Verwendung einer speziellen Darstellung ausintegriert. Dieser Weg hat sich jedoch als problematisch erwiesen, da entweder die Integrale nicht aufgelöst werden können oder als Ergebnis Ausdrücke mit grassmannwertigen Nennern liefern. Dieser Weg soll daher weder hier, noch im weiteren Verlauf der Arbeit verfolgt werden.
- Zuerst werden die Grassmann-Felder ausintegriert. Dieser Weg ist auf jeden Fall der zweckmäßigere, denn zum einen stehen für Integrale über Grassmann-Felder einfache Formeln zur Verfügung (siehe Anhang B), zum anderen ist nach der Integration der rein komplexwertige Ausdruck für die numerische oder analytische Weiterbehandlung wesentlich günstiger.

Somit folgt für die Zustandssumme

$$Z = \int_b \det M(b) \quad (4.49)$$

Die Determinante ergibt lediglich das Produkt aus allen Diagonalelementen plus dem Produkt aus den Nebendiagonalelementen.

$$\det M(b) = 1 + (1 - \Delta\tau\varepsilon_f)^N \prod_{n=1}^N \sum_{\sigma} b_{\sigma n}^* b_{\sigma n-1} \quad (4.50)$$

Der zweite Term führt zwar auf  $2^N$  Terme mit jeweils einem Produkt aus  $2N$   $b$ -Feldern, doch wegen Gl. (4.14/15) verschwinden nur zwei dieser Terme nicht.

$$Z = \int_b 1 + (1 - \Delta\tau\varepsilon_f)^N \int_b \sum_{\sigma} \prod_{n=1}^N b_{\sigma n}^* b_{\sigma n-1} \quad (4.51)$$

$$= 1 + 2 \left(1 - \frac{\beta\varepsilon_f}{N}\right)^N \quad (4.52)$$

Im Limes  $N \rightarrow \infty$  ergibt sich das bekannte Ergebnis:

$$Z = 1 + 2e^{-\beta\varepsilon_f} \quad (4.53)$$

### Berechnung der Green-Funktion $G(\tau)$

Nach Gl. (4.30) gilt:

$$-G(\tau) = \frac{1}{Z} \int_b \int \mathcal{D}\psi^\dagger \mathcal{D}\psi \psi_n b_{\sigma n} \psi_1^\dagger b_{\sigma 1}^* \exp \left[ - \sum_{ij} \psi_i^\dagger M_{ij}(b) \psi_j \right] \quad (4.54)$$

Die Grassmann-Felder im Integranden können dadurch berücksichtigt werden, daß  $G(\tau)$  als Ableitung eines Erzeugenden Funktionals nach zusätzlichen Feldern aufgefaßt wird (siehe Anhang B). Damit ergibt sich:

$$-G(\tau) = \frac{1}{Z} \int_b b_{\sigma n} b_{\sigma 1}^* \left( M^{-1}(b) \right)_{n1} \det M(b) \quad (4.55)$$

Die Matrixelemente der inversen Matrix haben die Form:

$$\left( M^{-1}(b) \right)_{n1} \det M(b) = \begin{cases} 1 & : n = 1 \\ (1 - \Delta\tau\varepsilon_f)^{n-1} \prod_{l=1}^{n-1} \sum_{\sigma'} b_{\sigma' l} b_{\sigma' 1}^* & : n \neq 1 \end{cases} \quad (4.56)$$

Der Produktterm liefert — ähnlich wie bei der Zustandssumme —  $2^{n-1}$  Terme; wegen der Regeln zur Ausintegration der  $b$ -Felder bleibt nur ein einziger Term übrig. Damit folgt in Übereinstimmung mit Gl. (4.45)

$$-G(\tau) = \frac{1}{Z} e^{-\tau\varepsilon_f} \quad (4.57)$$

### Versuch einer Sattelpunktnäherung

Die Theorie liefert also in diesem einfachen Fall korrekte Ergebnisse, ohne daß eine spezielle Darstellung für die  $b$ -Felder gewählt wurde. Ist es aber möglich, dieses Resultat innerhalb einer bestimmten Darstellung mit Hilfe der Sattelpunktmethode [Neg88] näherungsweise zu erhalten? Eine solche Vorgehensweise wäre bei der Behandlung nicht mehr exakt lösbarer Probleme wünschenswert.

Ausgehend von der Gleichung (4.49/50) für die Zustandssumme

$$Z = \int_b \left( 1 + (1 - \Delta\tau\varepsilon_f)^N \prod_{n=1}^N \sum_{\sigma} b_{\sigma n}^* b_{\sigma n-1} \right) \quad (4.58)$$

soll dieser Weg innerhalb der  $U(1)$ -Darstellung der  $b$ -Felder verfolgt werden. Mit (4.36) folgt:

$$\sum_{\sigma} b_{\sigma n}^* b_{\sigma n-1} = 2 \cos(\varphi_n - \varphi_{n-1}) \quad (4.59)$$

Zur Durchführung der Sattelpunktnäherung muß die Zustandssumme auf die Form

$$Z = \int \mathcal{D}\Phi e^{S_{\text{eff}}(\Phi)} \quad (4.60)$$

gebracht werden. Dies gelingt mit

$$S_{\text{eff}}(\Phi) = \ln \left[ 1 + (1 - \Delta\tau\varepsilon_f)^N \prod_{n=1}^N 2 \cos(\varphi_n - \varphi_{n-1}) \right] \quad (4.61)$$

und

$$\int \mathcal{D}\Phi = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{d\varphi_1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{d\varphi_2}{\pi} \dots \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{d\varphi_N}{\pi} \quad (4.62)$$

Die Wirkung (4.61) ist noch invariant unter einer Winkelverschiebung  $\varphi'_n = \varphi_n + \Delta\varphi$  für  $n = 1, \dots, N$ . Aufgrund dieser Eigenschaft kann ein Winkel aus dem Funktionalintegral eliminiert werden. Die Transformation

$$\varphi'_1 = \varphi_1 \quad (4.63)$$

$$\varphi'_n = \varphi_n - \varphi_1 \quad n \neq 1 \quad (4.64)$$

führt auf

$$Z = \int \mathcal{D}\Phi' e^{S_{\text{eff}}(\Phi')} \quad (4.65)$$

mit der von  $\varphi'_1$  unabhängigen Wirkung

$$S_{\text{eff}}(\Phi') = \ln \left[ 1 + (1 - \Delta\tau\varepsilon_f)^N \left( 2 \cos(\varphi'_2) 2 \cos(\varphi'_N) \prod_{n=3}^N 2 \cos(\varphi'_n - \varphi'_{n-1}) \right) \right] \quad (4.66)$$

Diese effektive Wirkung nimmt ihr absolutes Maximum bei

$$\varphi'_2 = \varphi'_3 = \dots = \varphi'_N = 0 \quad (4.67)$$

an. Dieser „Sattelpunkt“ hat also selbst keine Bedeutung (siehe im Gegensatz dazu die Vorgehensweise in [Sch90]). Daher müssen — um ein sinnvolles Ergebnis für die Zustandssumme zu erhalten — Abweichungen vom Extremum berücksichtigt werden. Dies geschieht in einer Sattelpunktnäherung dadurch, daß die effektive Wirkung durch ihre Entwicklung bis zweiter Ordnung um dieses Extremum ersetzt wird

$$S_{\text{eff}}(\Phi') \simeq S_{\text{eff}}(\Phi' = 0) + \frac{1}{2} \sum_{n=2}^N \left[ \frac{\partial^2}{\partial \varphi'_n{}^2} S_{\text{eff}}(\Phi') \right]_{\Phi'=0} (\varphi'_n)^2 \quad , \quad (4.68)$$

wobei die Qualität dieser Ersetzung umso höher ist, je stärker die Funktion  $S_{\text{eff}}(\Phi')$  um das Maximum abfällt. Für die zweiten Ableitungen ergibt sich im Limes  $N \rightarrow \infty$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left[ \frac{\partial^2}{\partial \varphi'_n{}^2} S_{\text{eff}}(\Phi') \right]_{\Phi'=0} = -2 \quad n = 2, \dots, N \quad (4.69)$$

und damit für die Zustandssumme:

$$Z \simeq \frac{1}{\pi^N} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\varphi'_1 e^{S_{\text{eff}}(\Phi'=0)} \prod_{n=2}^N \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\varphi'_n e^{-\varphi_n'^2} \quad (4.70)$$

Nach einer weiteren Näherung für die Integrale folgt:

$$Z \simeq \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ \frac{1}{\sqrt{\pi}^{N-1}} + 2 \left(1 - \frac{\beta \varepsilon_f}{N}\right)^N \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}}\right)^{N-1} \right] \quad (4.71)$$

Dieses Ergebnis ist dem exakten (4.52) zwar auf den ersten Blick ähnlich, doch völlig unbrauchbar, da für  $N \rightarrow \infty$  der erste Term völlig verschwindet und der zweite divergiert!

Damit ist leider die Hoffnung zunichte gemacht, daß die soeben beschriebene Sattelpunktnäherung für kompliziertere Systeme qualitative Aussagen machen könnte. Die Frage, ob eine andere Darstellung der  $b$ -Felder sinnvolle Sattelpunktnäherungen ermöglichen könnte, ist jedoch offen. Zumindest für die Darstellung c) (Gl. (4.38/39)) führten Untersuchungen auf ganz ähnliche Probleme.

Interessant ist die Tatsache, daß die Ersetzung

$$\sum_{\sigma} b_{\sigma n}^* b_{\sigma n-1} \rightarrow 2^{1/N} \quad (4.72)$$

in Gleichung (4.51) für die Zustandssumme genau das richtige Ergebnis liefert. Alle Versuche, diese Vorgehensweise innerhalb einer Sattelpunktnäherung zu motivieren scheiterten jedoch (siehe auch [Wel90a]).

Ein weiterer sonst sinnvoller Ausgangspunkt wäre es, in der Wirkung eine diskrete Fouriertransformation bezüglich  $\tau$  durchzuführen. Im Fall ohne zusätzliche  $b$ -Felder erleichtert dies die Auswertung, da die Wirkung dadurch diagonalisiert wird und bei der Determinantenbildung nur die Diagonalelemente miteinander zu multipliziert werden brauchen (siehe auch Kap. 3.3). Mit den zusätzlichen  $b$ -Feldern treten jedoch nach der Fouriertransformation Produkte aus Feldern mit vier verschiedenen Frequenzen in der Wirkung auf — die damit verbundenen Schwierigkeiten konnten nicht gemeistert werden.

Für all diese Probleme ist der ungewöhnliche kinetische Term in der Wirkung verantwortlich, der auch später (siehe Kap. 5.2), bei dem Versuch einer Monte-Carlo-Berechnung der Green-Funktion, unangenehme Folgen haben wird.

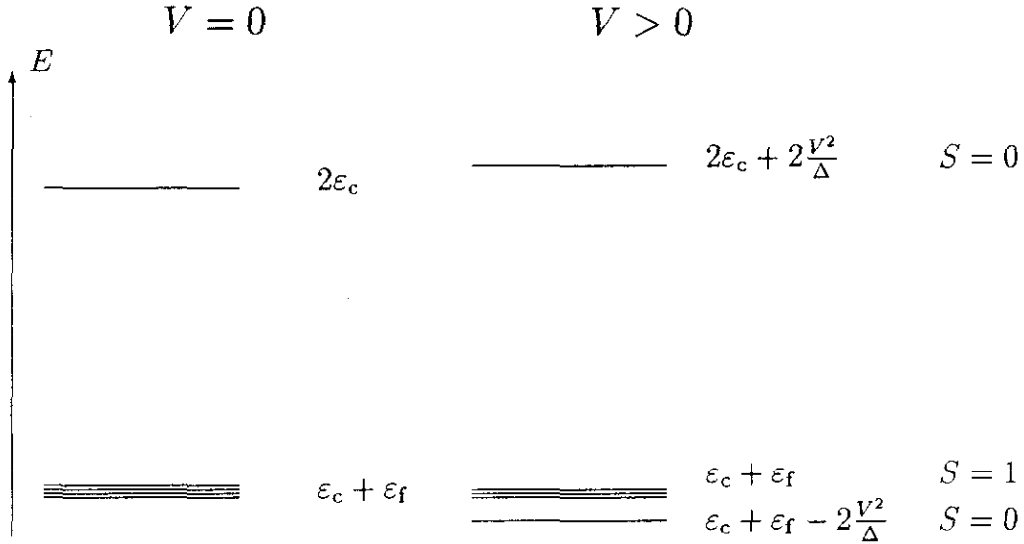
### 4.3 Anwendung auf ein Zweizustandsmodell

In diesem Kapitel soll ein Zweizustandsmodell untersucht werden, das sich vom Störstellen-Anderson-Modell nur dadurch unterscheidet, daß die Störstelle nicht an ein ganzes Band von Leitungselektronen, sondern an ein einziges Leitungselektronen-Niveau ankoppelt. Inklusive des Doppelbesetzungsverbots für das  $f$ -Niveau lautet der Hamiltonoperator:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\sigma} \varepsilon_f X_{\sigma 0} X_{0\sigma} + \sum_{\sigma} \varepsilon_c c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} \\
 & + \sum_{\sigma} V (X_{\sigma 0} c_{\sigma} + c_{\sigma}^{\dagger} X_{0\sigma})
 \end{aligned}
 \tag{4.73}$$

Die Bedeutung dieses Modells liegt darin, daß es auf einfache Weise die Bildung eines unmagnetischen Singulett-Grundzustandes erklärt. Abbildung 4.1 zeigt, wie sich das Niveauschema bei Erhöhung der Hybridisierung  $V$  ändert, wenn sich zwei Elektronen im System befinden. Während für  $V = 0$  Singulett- und Triplett-Zustände noch entartet sind, liegt für  $V \neq 0$  der Singulett-Zustand um die Energie  $2V^2/\Delta$  ( $\Delta = \varepsilon_c - \varepsilon_f$ ,  $\varepsilon_c > \varepsilon_f$ ) unter dem Triplett-Zustand. Ein solcher Singulett-Grundzustand findet sich auch beim Störstellen-Anderson-Modell. Lediglich der Wert der Energieabsenkung hat dort eine völlig andere Form. Das Zweizustandsmodell ist exakt lösbar, weil das System höchstens vier (bei  $U = \infty$  höchstens drei) Elektronen aufnehmen kann. Der





**Abb. 4.1:** Änderung der Energieniveaus des Zweizustandsmodells bei Einschalten der Hybridisierung. Rechts ist der Spin der Zustände angegeben. Für  $V > 0$  bildet sich ein Singulett-Grundzustand heraus.

Hilbertraum der möglichen Zustände hat somit die Dimension  $2^4$  (bzw.  $2^3$ ) und die Bildung der Erwartungswerte mit allen Zuständen kann leicht analytisch vorgenommen werden. Dies führt für die Berechnung der Zustandssumme auf:

$$Z = Z_0 + Z_1 + Z_2 + Z_3 \quad (4.74)$$

$$Z_0 = 1 \quad (4.75)$$

$$Z_1 = 2 \exp \left[ -\beta \left( \varepsilon_f - \frac{V^2}{\Delta} \right) \right] + 2 \exp \left[ -\beta \left( \varepsilon_c + \frac{V^2}{\Delta} \right) \right] \quad (4.76)$$

$$Z_2 = 2 \exp \left[ -\beta \left( 2\varepsilon_c + \frac{2V^2}{\Delta} \right) \right] + 3 \exp \left[ -\beta (\varepsilon_c + \varepsilon_f) \right] \\ + \exp \left[ -\beta \left( \varepsilon_c + \varepsilon_f - \frac{2V^2}{\Delta} \right) \right] \quad (4.77)$$

$$Z_3 = 2 \exp \left[ -\beta (2\varepsilon_c + \varepsilon_f) \right] \quad (4.78)$$

Der Einfachheit halber ist das Resultat nur bis zur Ordnung  $V^2$  angegeben. Der Index entspricht der Teilchenzahl im System.

Im folgenden soll die Zustandssumme mit Hilfe der in Kap. 4.1 beschriebenen Funktionalintegralmethode berechnet werden. Das Funktionalintegral für die Zustands-

summe lautet:

$$Z = \int_b \int \mathcal{D}\psi^\dagger \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\chi^\dagger \mathcal{D}\chi \exp \left[ S(\psi, \psi^\dagger, \chi, \chi^\dagger, b) \right] \quad (4.79)$$

mit

$$\begin{aligned} S(\psi, \psi^\dagger, \chi, \chi^\dagger, b) &= \sum_n \psi_n^\dagger \left( \psi_{n-1} \left( \sum_\sigma b_{\sigma n}^* b_{\sigma n-1} \right) - \psi_n \right) \\ &\quad - \Delta\tau \varepsilon_f \sum_n \psi_n^\dagger \psi_{n-1} \sum_\sigma b_{\sigma n}^* b_{\sigma n-1} \\ &\quad + \sum_{\sigma n} \chi_{\sigma n}^\dagger \left[ \chi_{\sigma n-1} (1 - \Delta\tau \varepsilon_c) - \chi_{\sigma n} \right] \\ &\quad - \Delta\tau V \sum_{\sigma n} \left( \psi_n^\dagger b_{\sigma n}^* \chi_{\sigma n-1} + \chi_{\sigma n}^\dagger \psi_{n-1} b_{\sigma n-1} \right) \end{aligned} \quad (4.80)$$

Die ersten beiden Terme entsprechen der Wirkung des Einzustandsmodells (4.46). Der dritte und vierte Term enthält die spinabhängigen Grassmann-Felder  $\chi_{\sigma n}^\dagger$  und  $\chi_{\sigma n}$ , die anstelle der Operatoren  $c_\sigma^\dagger$  und  $c_\sigma$  treten.

Die Ausintegration der Fermionen führt auf die Determinante einer  $(3N \times 3N)$  Matrix:

$$Z = \int_b \det M \quad \text{mit} \quad M = \begin{vmatrix} \mathbb{I} & & & & A_N \\ -A_1 & \mathbb{I} & & & \\ & -A_2 & \mathbb{I} & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & -A_{N-1} & \mathbb{I} \end{vmatrix} \quad (4.81)$$

und

$$A_n = \begin{vmatrix} (1 - \Delta\tau \varepsilon_f) \sum_\sigma b_{\sigma n+1}^* b_{\sigma n} & -\Delta\tau V b_{\uparrow n+1}^* & -\Delta\tau V b_{\downarrow n+1}^* \\ -\Delta\tau V b_{\uparrow n} & 1 - \Delta\tau \varepsilon_c & 0 \\ -\Delta\tau V b_{\downarrow n} & 0 & 1 - \Delta\tau \varepsilon_c \end{vmatrix} \quad (4.82)$$

Die Determinante von  $M$  läßt sich auf die einer  $3 \times 3$  Matrix zurückführen.

$$Z = \int_b \det (\mathbb{I} + A_N A_{N-1} \dots A_1) = \int_b \det \left( \mathbb{I} + \prod_{n=N}^1 A_n \right) \quad (4.83)$$

Die Determinante einer solchen Matrix kann entwickelt werden [Zha91]:

$$\det(\mathbb{I} + X) = 1 + \text{Sp}X + \dots + \det X \quad (4.84)$$

Für eine  $L \times L$  Matrix enthält diese Reihe  $L + 1$  Terme. Falls  $X$  invertierbar ist, läßt sich der vorletzte Term schreiben als

$$(\det X) \text{Sp}(X^{-1}) \quad (4.85)$$

Die Entwicklung der Zustandssumme lautet also:

$$\begin{aligned}
Z &= \int_b 1 + \int_b \text{Sp} \prod_{n=N}^1 A_n \\
&+ \int_b \left( \det \prod_{n=N}^1 A_n \right) \text{Sp} \left( \prod_{n=N}^1 A_n \right)^{-1} + \int_b \det \prod_{n=N}^1 A_n \quad (4.86)
\end{aligned}$$

Die vier Terme auf der rechten Seite entsprechen den  $Z_0$  bis  $Z_3$  von Gleichung (4.74) und werden im folgenden einzeln ausgewertet. Diese Vorgehensweise versagt jedoch für  $L > 3$  und ist insbesondere beim Störstellen-Anderson-Modell, welches unendlich viele Freiheitsgrade besitzt, prinzipiell nicht durchführbar.

#### Auswertung der einzelnen Beiträge

a)  $l = 0$

$$Z_0 = \int_b 1 = 1 \quad (4.87)$$

b)  $l = 1$

$$Z_1 = \int_b \text{Sp} \prod_{n=N}^1 A_n = \text{Sp} \int_b \prod_{n=N}^1 A_n \quad (4.88)$$

Die  $b$ -Felder können sukzessive ausintegriert werden, da die  $A_n$  nur  $b$ -Felder zu den Zeiten  $n$  und  $n + 1$  enthalten. Die Matrizen  $\tilde{A}_n$  werden folgendermaßen definiert:

$$\tilde{A}_2 = \int_{b_2} A_2 A_1 \quad , \quad \tilde{A}_3 = \int_{b_3} A_3 \tilde{A}_2 \quad \dots \quad \tilde{A}_N = \int_{b_N} A_N \tilde{A}_{N-1} \quad (4.89)$$

Die letzte Integration ergibt:

$$\tilde{A} = \int_{b_1} \tilde{A}_N \quad (4.90)$$

Bei der Auswertung wird ausgenutzt, daß alle  $\tilde{A}_n$  dieselbe Struktur haben:

$$\tilde{A}_n = \begin{vmatrix} \alpha(n) \sum_{\sigma} b_{\sigma n+1}^* b_{\sigma 1} & \gamma(n) b_{\uparrow n+1}^* & \gamma(n) b_{\downarrow n+1}^* \\ \bar{\gamma}(n) b_{\uparrow 1} & \delta(n) & 0 \\ \bar{\gamma}(n) b_{\downarrow 1} & 0 & \delta(n) \end{vmatrix} \quad (4.91)$$

Für die Koeffizienten gelten folgende Rekursionsformeln:

$$\begin{pmatrix} \alpha(n) \\ \bar{\gamma}(n) \end{pmatrix} = \begin{vmatrix} 1 - \Delta\tau\varepsilon_f & -\Delta\tau V \\ -\Delta\tau V & 1 - \Delta\tau\varepsilon_c \end{vmatrix} \begin{pmatrix} \alpha(n-1) \\ \bar{\gamma}(n-1) \end{pmatrix} \quad (4.92)$$

$$\begin{pmatrix} \delta(n) \\ \gamma(n) \end{pmatrix} = \begin{vmatrix} 1 - \Delta\tau\varepsilon_c & -\Delta\tau V \\ -\Delta\tau V & 1 - \Delta\tau\varepsilon_f \end{vmatrix} \begin{pmatrix} \delta(n-1) \\ \gamma(n-1) \end{pmatrix} \quad (4.93)$$

Wegen

$$Z_1 = \text{Sp} \tilde{A} = 2\alpha(N) + 2\delta(N) \quad (4.94)$$

müssen lediglich  $\alpha(N)$  und  $\delta(N)$  berechnet werden. Dies erfolgt durch Diagonalisieren der Matrizen in (4.92) und (4.93). Im Limes  $N \rightarrow \infty$  und in einer Entwicklung bis  $V^2$  ergibt sich:

$$\alpha(N) = \exp \left[ -\beta \left( \varepsilon_f - \frac{V^2}{\Delta} \right) \right] \quad (4.95)$$

$$\delta(N) = \exp \left[ -\beta \left( \varepsilon_c + \frac{V^2}{\Delta} \right) \right] \quad (4.96)$$

woraus das in (4.76) angegebene Resultat folgt.

c)  $l = 2$

Zunächst wird  $Z_2$  umgeschrieben:

$$Z_2 = \int_b \left( \prod_{n=N}^1 \det A_n \right) \text{Sp} \left( \prod_{n=1}^N (A_n)^{-1} \right) = \int_b \text{Sp} \left( \prod_{n=1}^N X_n \right) \quad (4.97)$$

mit

$$X_n = (\det A_n) A_n^{-1} \quad (4.98)$$

Analog zum Fall  $l=1$  gelingt mit

$$\tilde{X}_n = \int_{b_n} \tilde{X}_{n-1} X_n \quad (4.99)$$

auch hier die sukzessive Ausintegration der  $b$ -Felder. Das Ergebnis stimmt schließlich mit (4.77) überein.

d)  $l = 3$

$$Z_3 = \int_b \det \prod_{n=N}^1 A_n = \int_b \prod_{n=N}^1 \det A_n \quad (4.100)$$

Das Ergebnis (4.78) folgt durch Berechnung der Determinante.

Alle Terme stimmen also mit Gleichung (4.75-78) überein. Die in Kap. 4.1 entwickelte Theorie liefert für das Zweizustandsmodell die richtige Zustandssumme. Auf eine analytische Berechnung der Green-Funktionen wurde hier jedoch verzichtet, da dafür der rechnerische Aufwand noch um ein Vielfaches höher wäre.

Einschränkend muß noch erwähnt werden, daß — wie bereits beim Einzustandsmodell — keine *näherungsweise* Berechnung der Zustandssumme durchgeführt werden konnte.

## 4.4 Weitere Anwendungen

Die Wellersche Methode ist im Prinzip anwendbar auf alle Modelle für stark korrelierte Elektronensysteme, in denen die Einführung eines Doppelbesetzungsverbots für Zustände mit der Spinartung zwei sinnvoll ist. Dazu gehört das Hubbard-Modell, welches bereits von anderen Arbeitsgruppen mit dieser Methode untersucht wurde. Diese Ansätze sollen im folgenden kurz beschrieben werden.

### Anwendung auf das eindimensionale Hubbard-Modell

In [Wel90a] wurden die Zustandssumme und die Impulsverteilung  $n(k)$  des eindimensionalen Hubbard-Modells mit  $U = \infty$  berechnet. Die Impulsverteilung ist wichtig für die Unterscheidung, ob das betreffende System Fermi-Flüssigkeitsverhalten aufweist oder nicht. Der zentrale Punkt in [Wel90a] ist die Ersetzung der komplexen Felder durch einen konstanten Ausdruck:

$$\sum_{\sigma} b_{i\sigma n}^* b_{j\sigma n-1} \rightarrow 2^{1/N} \quad (4.101)$$

Diese Näherung ähnelt der Sattelpunktnäherung und liefert z.B. für das Einzustandsmodell die richtige Zustandssumme. Es wurde bewiesen, daß diese Ersetzung für das Hubbard-Modell mit unendlichem  $U$  auf einem Ring exakt ist. Dazu ist notwendig, daß sich Trajektorien verschiedener Elektronen auf einem Ring nicht kreuzen können. Diese Argumentation versagt natürlich für Dimensionen  $d \geq 2$ . Außerdem wurde gezeigt, daß Trajektorien, die einer Verschiebung aller Elektronen auf dem Ring entsprechen, keinen Beitrag zum Funktionalintegral liefern.

Durch die Ersetzung (4.101) folgt ein einfach zu handhabendes Funktionalintegral, das dem eines Modells mit spinlosen Fermionen entspricht. Die resultierende Impulsverteilung zeigt ein weiches Verhalten für  $T \rightarrow 0$  an der Fermikante, woraus geschlossen werden kann, daß in diesem Grenzfall kein Fermi-Flüssigkeitsverhalten vorliegt. Bei dem Vergleich mit den Ergebnissen von Ogata und Shiba [Oga90] ist jedoch Vorsicht geboten. In [Oga90] wurde zuerst  $T = 0$  gesetzt und dann der Limes  $U \rightarrow \infty$  durchgeführt — in [Wel90a] gerade umgekehrt. Aus diesem Grund erhielten Ogata und Shiba eine Impulsverteilung, die an der Fermikante einem Potenzgesetz gehorcht,

also ein Verhalten, das dem einer Fermi-Flüssigkeit wesentlich näher kommt.

Den Autoren gelang es jedoch nicht, die Ersetzung (4.101) durch eine Sattelpunktnäherung zu motivieren. Dies entspricht den Überlegungen in Kap. 4.2. Die Ersetzung muß also ad hoc eingeführt werden — eine Vorgehensweise, die beim Störstellen-Anderson-Modell keine vernünftigen Ergebnisse liefert (siehe Kap 5.5).

### Anwendung auf das zweidimensionale Hubbard-Modell

Zhang et al. [Zha91, Zha91a] entwickelten eine Theorie, welche exakt der Wellerschen Theorie für den Spezialfall der Ising-Darstellung der  $b$ -Felder entspricht. Damit untersuchten sie das zweidimensionale Hubbard-Modell auf einem  $L \times L$  Gitter mit  $L = (2, 4, 6)$ . Die Zahl der Zeitschritte betrug bei den numerischen Untersuchungen  $N = 20$ . Aufgrund der endlichen Teilchenzahl im System ist es möglich, ähnlich wie in Kap. 4.3, die bei Ausintegration der Grassmann-Felder resultierende Determinante zu schreiben als:

$$\det M = \det(\mathbb{1} + \prod_i M_i) \quad (4.102)$$

Es muß also nicht die Determinante einer  $NL \times NL$  Matrix berechnet werden, sondern nur mehr die einer  $L \times L$  Matrix. Da eine analytische Auswertung selbst auf einem  $2 \times 2$  Gitter kaum mehr möglich ist, und eine Aufsummation aller Beiträge auch numerisch nicht mehr durchführbar ist, wurde zur Auswertung ein Monte-Carlo-Verfahren gewählt. Dieses ist verwandt mit einer von Hirsch [Hir83] entwickelten Methode, und macht sich die Tatsache zunutze, daß bei einer Veränderung der Konfiguration der Hilfsfelder der Ausdruck  $\prod_i M_i$  nicht komplett neu berechnet werden muß, was die Rechenzeit erheblich reduziert. Weit entfernt von der Halbfüllung trat auch hier das berühmte Minuszeichenproblem [Suz93] auf, das eine Auswertung bei tiefen Temperaturen wesentlich erschwert.

Berechnet wurde die Teilchendichte des Systems in Abhängigkeit vom chemischen Potential. Dynamische Größen wurden nicht berechnet, damit traten auch nicht die in Kap. 5.3 diskutierten Probleme der analytischen Fortsetzung auf. Die Ergebnisse für das  $2 \times 2$  Gitter standen in guter Übereinstimmung mit durch exakte Diagonalisierung gewonnenen Resultaten.

Soweit es mir bekannt ist, wurde von den beiden erwähnten Arbeitsgruppen die Wellersche Methode aufgrund der enormen analytischen und numerischen Probleme nicht mehr angewendet.

## 4.5 Zur Berechnung von $G(t)$

Zum Abschluß dieses Kapitels über die Funktionalintegraltheorie soll noch kurz dargelegt werden, wie sich die Berechnung einer zeitabhängigen Korrelationsfunktion von der Berechnung der thermodynamischen Green-Funktion innerhalb des Funktionalintegralformalismus unterscheidet.

Wie in Kap. 5.3 offensichtlich wird, wäre die Kenntnis der Funktion

$$C^>(t) = \langle X_{0\sigma}(t) X_{\sigma 0} \rangle \quad (4.103)$$

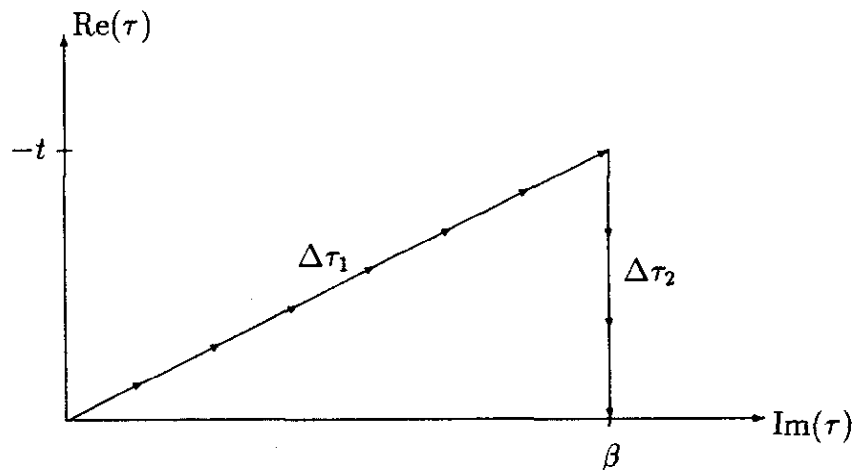
für die Berechnung der Spektralfunktion wesentlich günstiger. Denn  $A(\omega)$  ergibt sich aus (4.103) durch eine einfache Fouriertransformation (siehe Anhang A):

$$A(\omega) = \frac{1}{2\pi} (1 + e^{-\beta\omega}) \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} C^>(t) \quad (4.104)$$

Der einzige Unterschied zu Kap. 4.1 besteht darin, daß die Exponenten in

$$C^>(t) = \frac{1}{Z} \text{Sp} \left[ e^{(it-\beta)H} X_{0\sigma} e^{-itH} X_{\sigma 0} \right] \quad (4.105)$$

in verschiedene komplexwertige Intervalle unterteilt werden müssen:



**Abb. 4.2:** Die für die Berechnung der Korrelationsfunktion (4.103) benötigte Aufteilung des Weges in der komplexen  $\tau$ -Ebene.

$$\left[ e^{(it-\beta)H} X_{0\sigma} e^{-itH} X_{\sigma 0} \right] = \left[ \underbrace{e^{-\Delta\tau_1 H} \dots e^{-\Delta\tau_1 H}}_{N_1 \text{ mal}} X_{0\sigma} \underbrace{e^{-\Delta\tau_2 H} \dots e^{-\Delta\tau_2 H}}_{N_2 \text{ mal}} X_{\sigma 0} \right] \quad (4.106)$$

$$\text{mit } \Delta\tau_1 = \frac{\beta - it}{N_1} \quad \text{und} \quad \Delta\tau_2 = \frac{it}{N_2} \quad (4.107)$$

In Abb. 4.2 ist diese Unterteilung graphisch in der komplexen Ebene dargestellt. Die weitere Auswertung läuft völlig analog zu Kap. 4.1, lediglich die Matrizen  $M(b)$  sind komplexwertig.

Ein gravierendes Problem tritt jedoch bei numerischen Rechnungen auf, in denen die Summe der Intervalle auf etwa  $N_1 + N_2 \simeq 20$  beschränkt ist: Die Korrelationsfunktion kann nur in einem sehr kleinen Zeitintervall berechnet werden. Für z.B. das Einzustandsmodell (4.43) liefert die Fouriertransformation dieser  $C(t)$ -Daten dann für  $A(\omega)$  eine stark oszillierende Funktion — im Gegensatz zum exakten Ergebnis:  $A(\omega) \propto \delta(\omega - \varepsilon_f)$ .



## 5 Das Störstellen-Anderson-Modell — Green-Funktionen

Nachdem die Anwendbarkeit der Wellerschen Theorie auf einfache, analytisch lösbare Probleme gezeigt wurde, soll nun das in Kap. 2 eingeführte Störstellen-Anderson-Modell untersucht werden.

In Kap. 5.1 wird zunächst die Wirkung des  $U = \infty$  Störstellen-Anderson-Modells aufgestellt. Aufgrund der einfachen Form des Hybridisierungsterms ist es möglich, die unendlich vielen Freiheitsgrade der Leitungselektronen auszuintegrieren. Daraus resultiert eine effektive Wirkung, welche den Ausgangspunkt für die im Abschnitt 5.2 beschriebene numerische Untersuchung bildet. Die am einfachsten zu berechnende dynamische Größe — die thermodynamische Green-Funktion — wird mit Hilfe der Ising-Darstellung für die  $b$ -Felder ausgewertet. Dadurch wird das Funktionalintegral in eine Summe über alle möglichen Konfigurationen der  $b$ -Felder umgewandelt. Eine solche Summe bietet im Prinzip die Möglichkeit, Quanten-Monte-Carlo-Verfahren anzuwenden — dies scheitert jedoch in dem hier betrachteten Fall aus Gründen, die am Ende von Abschnitt 5.2 erläutert werden.

Die thermodynamische Green-Funktion hat den Nachteil, daß von ihr nicht direkt auf die physikalisch relevante Spektralfunktion geschlossen werden kann. Diese Problematik wird in Kap. 5.3 eingehend diskutiert. Außerdem wird ein Fitverfahren zur Bestimmung der Spektralfunktion vorgestellt, dessen Aussagefähigkeit allerdings gewissen Grenzen unterworfen ist.

Die in Kap. 5.2 und 5.3 erhaltenen Green-Funktionen und Spektralfunktionen werden in Kap. 5.4 mit Ergebnissen aus Rechnungen innerhalb einer Non-crossing-Approximation verglichen. Die nur geringen Abweichungen sind zum Teil auf die endliche Zahl von Zeitschritten zurückzuführen.

Abschließend sollen in Kap. 5.5 andere analytische Ansatzpunkte diskutiert werden,

welche jedoch im Fall des Störstellen-Anderson-Modells zu keinen sinnvollen Resultaten führen. Da sie eventuell bei der Untersuchung anderer Modelle von Nutzen sein könnten, werden sie dennoch in diese Arbeit aufgenommen.

## 5.1 Wirkung des $U = \infty$ Störstellen-Anderson-Modells

Im folgenden Abschnitt soll eine effektive Wirkung für die f-Elektronen im  $U = \infty$  Störstellen-Anderson-Modell mit Hilfe der in Kap. 4.1 entwickelten Theorie aufgestellt werden. Diese Wirkung  $S_{\text{eff}}$  enthält keine Freiheitsgrade der Leitungselektronen mehr und kann als Ausgangspunkt analytischer und numerischer Rechnungen verwendet werden.

Die Leitungselektronenoperatoren in (2.1) können, da deren Hilbertraum nicht eingeschränkt ist, nach dem Standardverfahren (siehe Kap. 3.2) durch Grassmann-Felder  $\chi_{k\sigma}^\dagger$  und  $\chi_{k\sigma}$  ersetzt werden. Mit Gl. (4.21) folgt für die Wirkung des Störstellen-Anderson-Modells:

$$\begin{aligned} S(\psi, \psi^\dagger, \chi, \chi^\dagger, b) &= S_f(\psi, \psi^\dagger, b) \\ &+ \sum_{nk\sigma} \chi_{k\sigma n}^\dagger ((1 - \Delta\tau\epsilon_k)\chi_{k\sigma n-1} - \chi_{k\sigma n}) \\ &- \Delta\tau V \sum_{nk\sigma} (\psi_n^\dagger b_{\sigma n}^* \chi_{k\sigma n-1} + \chi_{k\sigma n}^\dagger \psi_{n-1} b_{\sigma n-1}) \end{aligned} \quad (5.1)$$

mit

$$S_f(\psi, \psi^\dagger, b) = \sum_n \psi_n^\dagger \left( (1 - \Delta\tau\epsilon_f)\psi_{n-1} \sum_\sigma b_{\sigma n}^* b_{\sigma n-1} - \psi_n \right) \quad (5.2)$$

Für die Berechnung der Zustandssumme muß über alle Felder integriert werden:

$$Z = \int_b \int \mathcal{D}\psi^\dagger \mathcal{D}\psi \int \mathcal{D}\chi^\dagger \mathcal{D}\chi \exp [S(\psi, \psi^\dagger, \chi, \chi^\dagger, b)] \quad (5.3)$$

Die Integrationen können im Prinzip in beliebiger Reihenfolge vorgenommen werden, es empfiehlt sich jedoch, die komplexen Felder zuletzt auszuintegrieren (siehe Kap 4.2). Da wir an den Eigenschaften der Störstellenzustände interessiert sind, wird im ersten Schritt mit Hilfe der Formel (siehe Anhang B)

$$\begin{aligned} &\int \mathcal{D}\chi^\dagger \mathcal{D}\chi \exp \left[ - \sum_{ij} \chi_i^\dagger H_{ij} \chi_j + \sum_i (\xi_i^\dagger \chi_i + \chi_i^\dagger \xi_i) \right] = \\ &(\det H) \exp \left[ \sum_{ij} \xi_i^\dagger (H^{-1})_{ij} \xi_j \right] \end{aligned} \quad (5.4)$$

die Integration über die (unendlich vielen) Freiheitsgrade der Leitungselektronen durchgeführt. Die dazu notwendigen Hilfsfelder haben die Form:

$$\xi_{k\sigma n} = -\Delta\tau V\psi_{n-1}b_{\sigma n-1} \quad (5.5)$$

$$\xi_{k\sigma n}^\dagger = -\Delta\tau V\psi_{n+1}^\dagger b_{\sigma n+1}^* \quad (5.6)$$

Hier ist zu beachten, daß auf den rechten Seiten dieser beiden Gleichungen durchaus verschiedene Indizes stehen dürfen, da die  $\xi$  und  $\xi^\dagger$  voneinander unabhängige Elemente der Grassmann-Algebra sind.

Für die durch

$$\exp[S_{\text{eff}}(\psi, \psi^\dagger, b)] = \frac{1}{\det H} \int \mathcal{D}\chi^\dagger \mathcal{D}\chi \exp[S(\psi, \psi^\dagger, \chi, \chi^\dagger, b)] \quad (5.7)$$

definierte effektive Wirkung  $S_{\text{eff}}$  ergibt sich damit

$$S_{\text{eff}}(\psi, \psi^\dagger, b) = S_I(\psi, \psi^\dagger, b) + \sum_{k\sigma n, k'\sigma'n'} \xi_{k\sigma n}^\dagger (H^{-1})_{k\sigma n, k'\sigma'n'} \xi_{k'\sigma'n'} \quad (5.8)$$

Die Matrix  $H$  ist diagonal in  $k$  und  $\sigma$

$$H_{k\sigma n, k'\sigma'n'} = H_{nn'}(k) \delta_{kk'} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (5.9)$$

und ist folgendermaßen besetzt:

$$H_{nn'}(k) = \begin{vmatrix} 1 & & & & a_k \\ -a_k & 1 & & & \\ & -a_k & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & -a_k & 1 \end{vmatrix} \quad (5.10)$$

mit

$$a_k = (1 - \Delta\tau\varepsilon_k) \quad (5.11)$$

Die invertierte Matrix hat die Form

$$(H^{-1})_{k\sigma n, k'\sigma'n'} = (H^{-1})_{nn'}(k) \delta_{kk'} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (5.12)$$

mit

$$(H^{-1})_{nn'}(k) = \frac{1}{1 + a_k^N} \begin{vmatrix} 1 & -a_k^{N-1} & \dots & & -a_k \\ a_k & 1 & & & \\ a_k^2 & a_k & 1 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ a_k^{N-1} & & a_k^2 & a_k & 1 \end{vmatrix} \quad (5.13)$$

Schließlich lautet das Ergebnis für die effektive Wirkung:

$$S_{\text{eff}}(\psi, \psi^\dagger, b) = S_f(\psi, \psi^\dagger, b) + \left(\frac{\beta V}{N}\right)^2 \sum_{\sigma n m} \psi_{n+1}^\dagger b_{\sigma n+1}^* \psi_{m-1} b_{\sigma m-1} \sum_k (H^{-1})_{nm}(k) \quad (5.14)$$

Dieses Resultat ergibt sich auch, wenn die Grassmann-Felder  $\chi$  zuerst in den Frequenzraum transformiert und dann ausintegriert werden. Eine komplette Darstellung der effektiven Wirkung im Frequenzraum ist jedoch wegen den in Kap. 4.2 erwähnten Gründen wenig sinnvoll.

Für die weitere Auswertung ist die Bildung der  $k$ -Summe über die Matrixelemente von  $H^{-1}$  notwendig. Diese Summe kann jedoch im allgemeinen nicht analytisch berechnet werden.

Die Wirkung  $S_{\text{eff}}$  enthält die Grassmann-Felder  $\psi^\dagger$  und  $\psi$  nur bilinear, so daß deren Ausintegration mit der Formel

$$\int \mathcal{D}\psi^\dagger \mathcal{D}\psi \exp \left[ - \sum_{nm} \psi_n^\dagger M_{nm} \psi_m \right] = \det M \quad (5.15)$$

und der Matrix

$$\begin{aligned} M_{nm}(b) &= \delta_{nm} - \left(1 - \frac{\beta}{N} \varepsilon_f\right) \sum_\sigma b_{\sigma n}^* b_{\sigma n-1} \delta_{n-1,m} \\ &\quad - \left(\frac{\beta V}{N}\right)^2 \sum_\sigma b_{\sigma n}^* b_{\sigma m} \sum_k (H^{-1})_{n-1,m+1}(k) \end{aligned} \quad (5.16)$$

leicht möglich ist. Für die Zustandssumme und die thermodynamische Green-Funktion ergibt sich völlig analog zu Kap. 4.2:

$$Z = (\det H) \int_b \det M(b) \quad (5.17)$$

$$-G(\tau) = \frac{(\det H)}{Z} \int_b b_{\sigma n} b_{\sigma 1}^* \left(M^{-1}(b)\right)_{n1} \det M(b) \quad (5.18)$$

Der die Hybridisierung mit den Leitungselektronen beschreibende, letzte Term in (5.16) koppelt die  $\psi^\dagger$  und  $\psi$  zu allen Zeiten miteinander. Diese Kopplung wird durch  $\sum_k H^{-1}(k)$  vermittelt, eine Größe, die dem ungestörten Propagator der Leitungselektronen  $G_c^0(\tau) = \sum_k G_{ck}^0(\tau)$  entspricht.

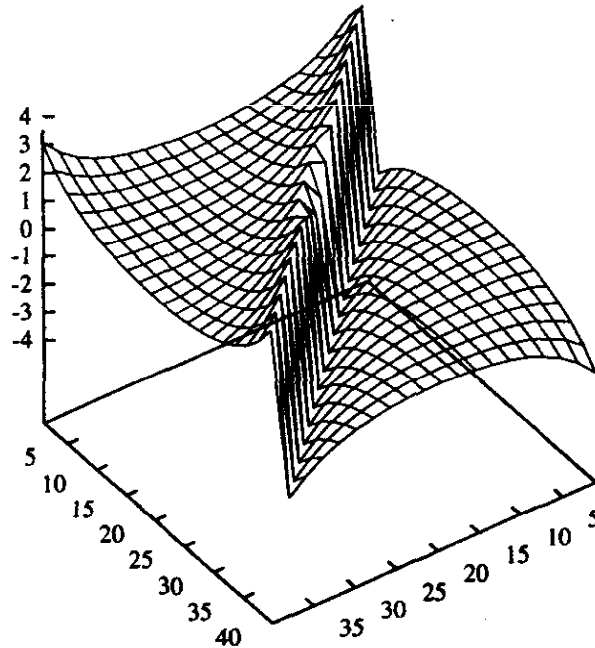
## 5.2 Numerische Berechnung von $G(\tau)$

Zuerst soll die Summe über die Green-Funktionen der Leitungselektronen unter der Annahme einer konstanten Zustandsdichte  $\rho$  im Intervall  $[-D, D]$  ausgeführt werden:

$$\sum_k (H^{-1})_{nm}(k) = \int d\varepsilon \rho(\varepsilon) (H^{-1})_{nm}(\varepsilon) = \rho \int_{-D}^D d\varepsilon (H^{-1})_{nm}(\varepsilon) \quad (5.19)$$

Die halbe Bandbreite wird auf den Wert  $D = 3.5$  gesetzt und  $\rho = 1$  gewählt. Die Zustandsdichte  $\rho(\varepsilon)$  könnte an dieser Stelle durch jede andere Form ersetzt werden, da die Berechnung des Integrals ohnehin nur numerisch möglich ist.

In Abb. 5.1 ist die Besetzung der Matrix für die inverse Temperatur  $\beta = 3$  und  $N = 40$  graphisch dargestellt. Aufgrund der Periodizität der thermodynamischen



**Abb. 5.1:** Besetzung der Matrix  $H^{-1}$ .

Green-Funktion

$$G(\tau - \beta) = -G(\tau) \quad \text{für } 0 \leq \tau < \beta \quad (5.20)$$

tritt um die Diagonalelemente ein Vorzeichenwechsel auf. Wegen Gl. (5.20) ist von vornherein ausgeschlossen, daß die Matrixelemente mit wachsender Entfernung von

der Diagonalen stark abfallen. Nur dann wäre aber eine Näherung, in der nur wenige Nebendiagonalen mitgenommen werden, sinnvoll.

Die Integrationen (5.19) sind alle unabhängig von den  $b$ -Feldern und brauchen demnach nur einmal — zu Beginn des Programms — berechnet werden. Die für eine numerische Auswertung der Green-Funktion (5.18) günstigste Darstellung für die  $b$ -Felder ist die Ising-Darstellung (4.32/33):

$$b_{\uparrow n} \equiv 1 \quad b_{\downarrow n} = \pm 1 \quad (5.21)$$

$$\int_{b_n} \dots = \frac{1}{2} \sum_{b_{\uparrow n} = \pm 1} \dots \quad (5.22)$$

Es muß also über  $2^N$  Konfigurationen summiert werden:

$$\int_b \dots = \frac{1}{2^N} \sum_{\{b\}} \dots \quad (5.23)$$

Ähnlich wie in Kap. 4.2 kann wegen der Symmetrie der Wirkung ein  $b$ -Wert konstant gesetzt werden, so daß im Programm nur  $2^{N-1}$  Konfigurationen berücksichtigt werden müssen, welche durch die Integer-Zahlen  $i$  ( $i = 0, \dots, (2^{N-1} - 1)$ ) charakterisiert sind. Die aktuelle Konfiguration wird dann einfach dadurch ermittelt, daß die Zahl  $i$  in die entsprechende binäre Darstellung zerlegt wird<sup>1</sup>.

Für jede der  $b$ -Konfigurationen muß die Matrix  $M$  gemäß Gl. (5.16) belegt werden. Die  $b$ -Felder treten nur in der Form

$$\sum_{\sigma} b_{\sigma n}^* b_{\sigma m} = b_{\uparrow n}^* b_{\uparrow m} + b_{\downarrow n}^* b_{\downarrow m} = 1 \pm 1 \quad (5.24)$$

auf. Dieser Term kann also nur die Werte 0 oder 2 — je nach Konfiguration — annehmen.

Die Berechnung der für (5.17) und (5.18) erforderlichen Determinante bzw. Inversen von  $M$  wird mit Hilfe der NAG-Routinen F03AAF und F01AAF durchgeführt, welche für reelle Matrizen ohne eine besondere Struktur konzipiert sind.

Nicht unerwähnt bleiben sollen die Auswirkungen, die die scheinbare Unsymmetrie der gewählten Ising-Darstellung zur Folge hat. Während für die Berechnung von  $G_{\uparrow\uparrow}$  die  $b$ -Felder im Integranden immer gleich 1 gesetzt werden können, ergibt dieses Produkt bei der Berechnung von  $G_{\downarrow\downarrow}$  entweder den Wert +1 oder -1. Es wurde

<sup>1</sup>Auf die wesentlich elegantere Verwendung eines sogenannten Gray-Codes [Rei77] wird wegen der minimalen Ersparnis an Rechenzeit verzichtet.

numerisch geprüft, daß  $G_{\sigma\sigma}$  im Fall ohne äußeres Magnetfeld unabhängig vom Spin ist. Der absolute Wert der Zustandssumme ist nicht von Interesse, daher braucht  $\det H$  nicht berechnet zu werden. Diese Größe entspricht der Zustandssumme des Leitungselektronensystems und würde sogar divergieren, wenn von unendlich vielen Freiheitsgraden für die Leitungselektronen ausgegangen wird.

Das soeben beschriebene Programm ist mit wenigen hundert Zeilen in die Programmiersprache FORTRAN übersetzt. Das wesentliche Problem der numerischen Rechnung ist jedoch die exponentiell anwachsende Rechenzeit  $t$ . In Abb. 5.2 ist  $t$  für die Berechnung der Green-Funktion  $G(\tau)$  in Abhängigkeit von der Zahl der Zeitschritte  $N$  angegeben.

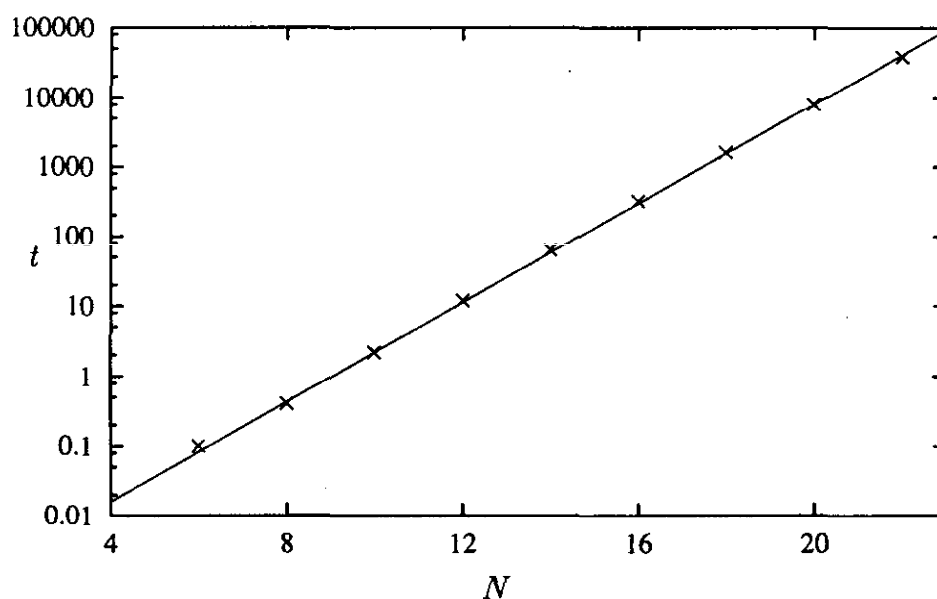


Abb. 5.2: Abhängigkeit der Rechenzeit von der Zahl der Zeitschritte; die Werte folgen sehr gut einem Exponentialgesetz.

Da sich die Zahl der  $b$ -Konfigurationen beim Übergang von  $N$  auf  $N + 1$  verdoppelt, und auch die NAG-Routinen für die etwas größeren Matrizen mehr CPU-Zeit verbrauchen, ergibt sich die Relation

$$t \simeq 0.0006s \cdot 2.27^N \quad (5.25)$$

Ein sinnvoller Wert ist demnach  $N = 20$ , für den das Programm auf einer SUN Sparc-Station IPX, auf der die Rechnungen dieser Arbeit durchgeführt wurden, ca. 8000 Sekunden Rechenzeit benötigt.

Die Frage, ob es sich denn nicht lohne, das Programm auf einem Großrechner (z.B. einer CRAY) zu starten, kann hier eindeutig verneint werden. Selbst wenn sich die Rechenzeit damit um einen Faktor  $2^3$  bis  $2^5$  verringern ließe, wäre dies lediglich mit einer Erhöhung der Zahl der Zeitschritte von z.B.  $N=20$  auf  $N=23$  oder  $25$  gleichbedeutend und würde die Genauigkeit der numerischen Ergebnisse nur unwesentlich erhöhen.

Nachdem die Zahl der Zeitschritte in etwa festgelegt ist, folgen bereits Einschränkungen für die im folgenden verwendeten Parametersätze.

### Die Parametersätze

Der Hybridisierungsterm in (5.14) kann exakt nur im Limes  $\beta V/N \rightarrow 0$  berücksichtigt werden. Aus  $\beta V/N \lesssim 0.1$  und  $N \simeq 20$  folgt, daß die Temperatur auf Werte der Hybridisierung (oder darüber) beschränkt ist. Existiert nun ein Parametersatz, bei dem die Hybridisierung im Bereich der Kondo-Temperatur liegt?

Nach Gl. (2.8) ist dies für folgende Werte im Prinzip möglich:

<p><b>Parametersatz I</b></p> $\beta = 3.0 \quad , \quad V = 0.22 \quad , \quad \varepsilon_f = -0.2$
---

Doch befindet sich ein System mit diesen Werten nicht wirklich im Kondo-Regime des Störstellen-Anderson-Modells, denn dazu müßte noch die Bedingung  $V \ll |\varepsilon_f|$  bzw.  $1 - n_f \ll 1$  erfüllt sein. Daher ist es fraglich, ob in der Spektralfunktion für den Parametersatz I die Abrikosov-Suhl-Resonanz auftritt oder nicht.

Durch folgende Werte wird ein System im Regime gemischter Valenzen (Mixed-valence-Regime) definiert:

<p><b>Parametersatz II</b></p> $\beta = 2.0 \quad , \quad V = \text{variabel} \quad , \quad \varepsilon_f = 0.0$
--

Hier liegt die f-Besetzung immer weit unter  $n_f = 1$  — eine Abrikosov-Suhl-Resonanz ist nicht zu erwarten.



### Numerische Resultate

Das Ergebnis der numerischen Berechnung von  $G(\tau)$  für den Parametersatz I und  $N = 20$  ist in Abb. 5.3 dargestellt. Welche Informationen können aus dieser Kurve direkt abgeleitet werden? Nach (A.28/29) gilt für die Besetzungszahlen für das leere

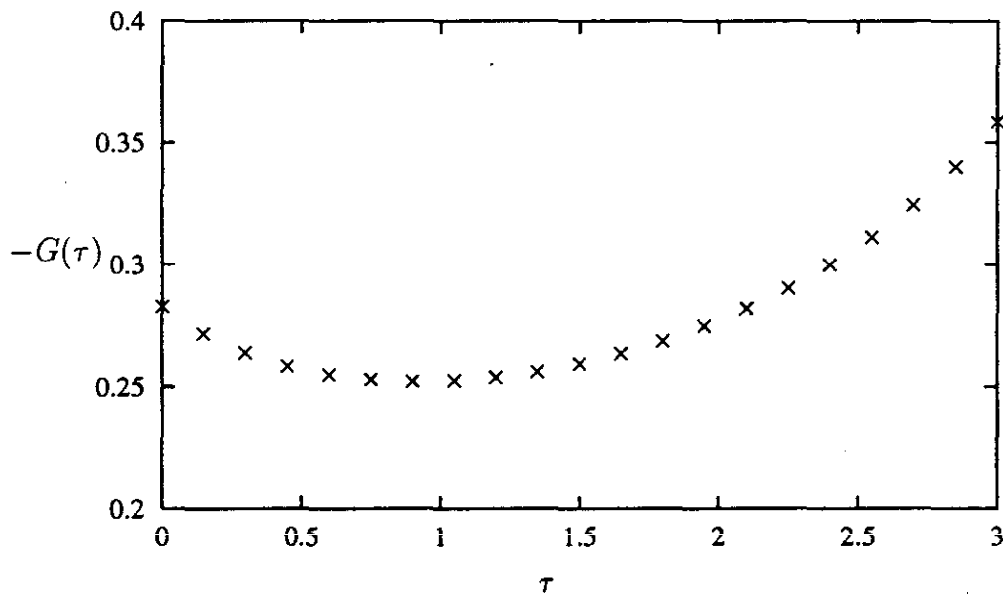


Abb. 5.3: Numerisches Ergebnis für die thermodynamische Green-Funktion (Parametersatz I).

bzw. einfach besetzte f-Niveau:

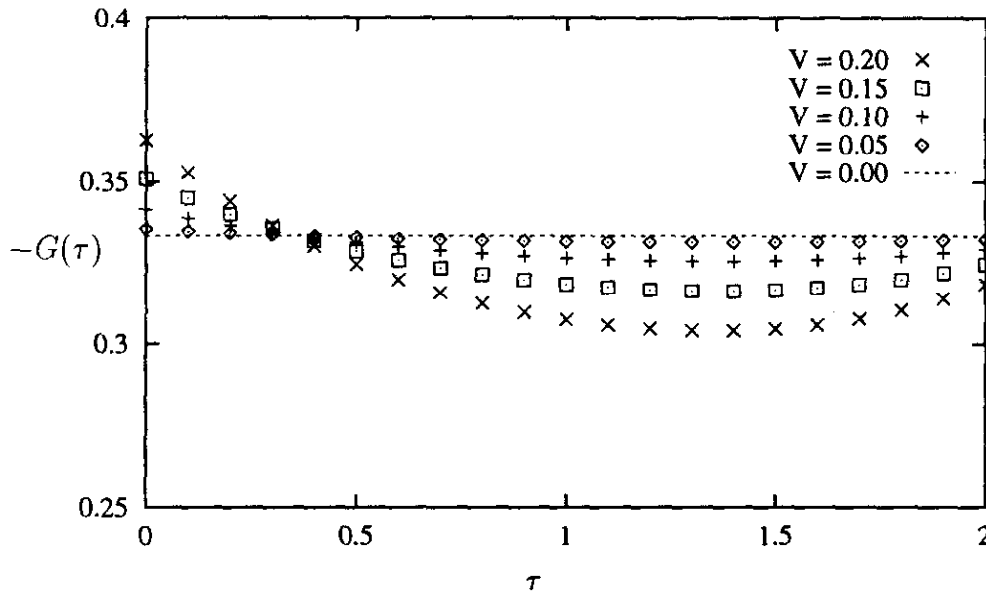
$$n_0 = -G(0) = 0.282 \quad (5.26)$$

$$n_\sigma = -G(\beta) = 0.359 \quad (5.27)$$

Daraus folgt für die f-Besetzung  $n_f = n_\uparrow + n_\downarrow = 0.718$ , ein Wert, der aufgrund der relativ hohen Temperatur weit von  $n_f \approx 1$  — dem eigentlichen Kondo-Regime — entfernt ist.

Welche Anstrengungen erforderlich sind, um aus den  $G(\tau)$ -Daten die Spektralfunktion zu berechnen, wird in Kap. 5.3 beschrieben. Die negative Steigung der thermodynamischen Green-Funktion für  $\tau \rightarrow 0$  läßt wegen (5.34) bereits darauf schließen, daß  $A(\omega)$  auch oberhalb der Fermienergie endlich ist.

Abb. 5.4 zeigt die numerisch berechneten  $G(\tau)$ -Daten für den Parametersatz II und  $N = 20$  bei verschiedenen Werten der Hybridisierung. Im Falle  $V = 0$  sind die Wahr-



**Abb. 5.4:** Numerisches Ergebnis für die thermodynamische Green-Funktion (Parametersatz II).

scheinlichkeiten für den leeren bzw. einfach besetzten Störstellenplatz identisch:

$$n_0 = n_{\uparrow} = n_{\downarrow} = \frac{1}{3} \quad (5.28)$$

und die Green-Funktion ist unabhängig von  $\tau$ . Die zugehörige Spektralfunktion besteht aus einem Peak genau an der Fermienergie. Bei Erhöhung der Hybridisierung sind mehrere Effekte zu beobachten. Die f-Besetzung nimmt mit zunehmender Hybridisierung ab (siehe Abb. 5.5). Diese Abnahme ist proportional zu  $V^2$  — dies würde sich auch aus einer Störungsrechnung in  $V$  ergeben. Gleichzeitig muß natürlich wegen  $n_0 + \sum_{\sigma} n_{\sigma} = 1$  der Wert von  $G(0)$  zunehmen. Dieser Effekt läßt sich anschaulich leicht verstehen: je höher die Hybridisierung, umso mehr wird sich die Wellenfunktion des lokalisierten Elektrons auf Zustände des Leitungselektronensystems ausdehnen. Diese Delokalisierung ist energetisch günstiger als der bei  $V = 0$  rein lokalisierte Zustand — analog einem Elektron in einem Potentialtopf, dessen Grundzustandsenergie sich mit zunehmender Breite des Potentialtopfs absenkt. Folglich nimmt die f-Besetzung mit wachsender Hybridisierung ab.

Die mit  $V$  zunehmende negative Steigung der Green-Funktion bei  $\tau = 0$  deutet bereits auf das im nächsten Abschnitt bestimmte Verhalten der Spektralfunktion hin: ihr Gewicht verschiebt sich mehr und mehr zu höheren Energien.

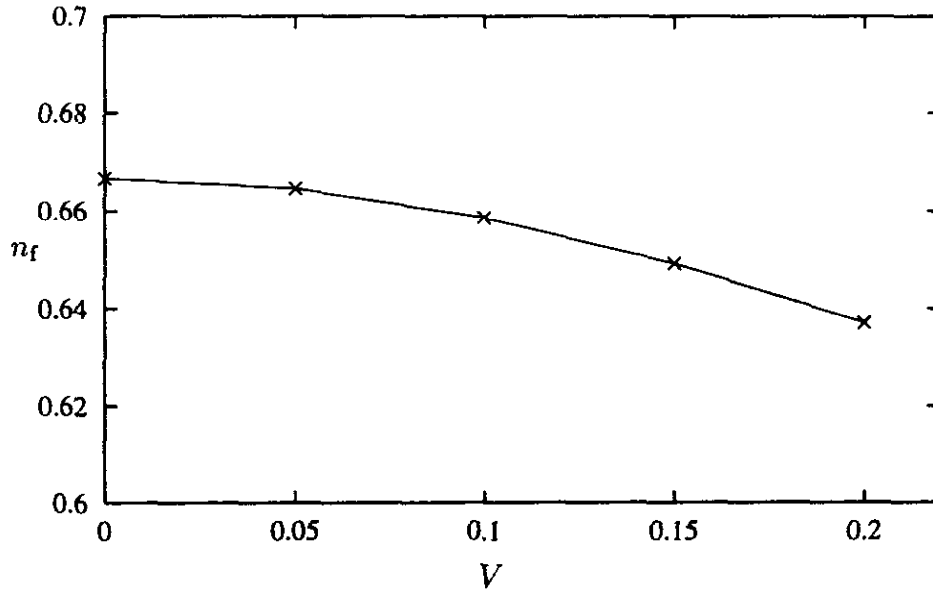


Abb. 5.5: Abhängigkeit der f-Besetzung von der Hybridisierung

### Versuch einer Monte-Carlo-Berechnung von $G(\tau)$

Läßt sich das Problem der mit  $N$  (Zahl der Zeitschritte) exponentiell anwachsenden Rechenzeit bewältigen? Wenn, dann nur durch eine Einschränkung in der Zahl der aufzusummierenden Beiträge. In den letzten Jahren hat sich — insbesondere in der theoretischen Untersuchung stark korrelierter Elektronensysteme — die Monte-Carlo-Methode [Von92] als ein nützliches Werkzeug erwiesen, solche Schwierigkeiten zu meistern.

Das Prinzip der Monte-Carlo-Methode besteht darin, ein hochdimensionales Integral (in unserem Fall eine Summe über die Konfigurationen der  $b$ -Felder) durch eine Summe mit einer relativ geringen, aber repräsentativen Anzahl von Beiträgen zu approximieren:

$$I = \int d^d x f(\vec{x}) P(\vec{x}) \simeq X = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M f(\vec{x}_i) \quad (5.29)$$

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P(\vec{x})$  hat die Eigenschaft

$$\int d^d x P(\vec{x}) = 1 \quad (5.30)$$

und hat bei der Behandlung von Funktionalintegralen typischerweise die Form<sup>2</sup>

$$P(\vec{x}) = \frac{1}{Z} \exp[-S(\vec{x})] \quad \text{mit} \quad Z = \int d^d x \exp[-S(\vec{x})] \quad . \quad (5.31)$$

Wie werden aber die Punkte  $\vec{x}_i$  ausgewählt, an denen die Funktionswerte bestimmt werden müssen, deren Summe eine Näherung für das Integral ergibt? Eine Möglichkeit besteht in der Anwendung des Metropolis-Algorithmus [Met53], der eine Markov-Kette  $\{\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots\}$  nach folgenden Regeln erzeugt (Details siehe [Neg88]):

- seien  $n$  Elemente der Markov-Kette bereits gegeben, so wird zunächst ein Punkt  $\vec{y}$  willkürlich aus der Menge der prinzipiell möglichen Punkte ausgewählt;
- falls  $S(\vec{y}) \leq S(\vec{x}_n)$  bildet  $\vec{y}$  das  $(n+1)$ -te Glied der Markov-Kette;
- falls  $S(\vec{y}) > S(\vec{x}_n)$  wird der neue Wert nur mit der Wahrscheinlichkeit  $\exp[S(\vec{x}_n) - S(\vec{y})]$  akzeptiert;
- falls  $\vec{y}$  nicht akzeptiert wird, folgt  $\vec{x}_{n+1} = \vec{x}_n$ .

Dieses Konzept soll nun zur Berechnung der thermodynamischen Green-Funktion

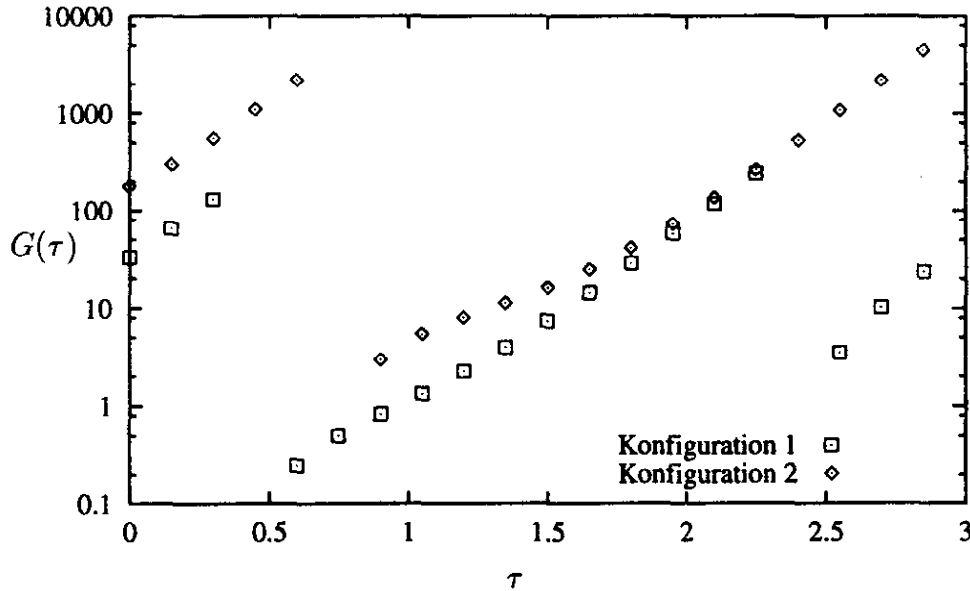
$$-G(\tau) = \int_b b_{\sigma_n} b_{\sigma_1}^* (M^{-1}(b))_{n1} P(b) \quad (5.32)$$

im Falle der Ising-Darstellung für die  $b$ -Felder angewendet werden. Dabei gilt:

$$P(b) = \frac{\det H}{Z} \det M(b) \quad ; \quad \int_b P(b) = 1 \quad (5.33)$$

Es ergeben sich jedoch fundamentale Probleme, die bislang nicht gelöst werden konnten. In Abb. 5.6 sind die Beiträge zweier  $b$ -Konfigurationen logarithmisch dargestellt. Zum einen fällt auf, daß deren Form nichts mit der Summe aller Konfigurationen (siehe Abb. 5.3) gemeinsam hat. Zum anderen verteilen sich die Werte der Beiträge zu  $G(\tau)$  über mehrere Größenordnungen — wie kann bei solchen Eigenschaften die Summe aus nur einem Teil der Beiträge dem exakten Ergebnis nahe kommen? Das andere Problem tritt bei der Bildung der Markov-Kette auf. Ausgehend von einer willkürlich gewählten Konfiguration wird die Markov-Kette ziemlich schnell auf eine der Konfigurationen  $\{b_{i1} = +1, i = 1, \dots, N\}$  oder  $\{b_{i1} = -1, i = 1, \dots, N\}$  zulaufen, die beide extrem stabil gegenüber kleinen Änderungen sind. Die Wahrscheinlichkeit, daß

<sup>2</sup>Hier wurde im Gegensatz zu Kap. 4 und 5.1 die übliche Vorzeichenkonvention der Wirkung im Exponenten gewählt.



**Abb. 5.6:** Beiträge zweier Konfigurationen zu  $G(\tau)$  (Parametersatz I). Im Gegensatz zu Abb. 5.3 wurde eine logarithmische Auftragung gewählt.

eine Änderung dieser Konfigurationen an einer einzigen Position akzeptiert wird, beträgt  $P \approx 0.005$  (Parametersatz I). Der Metropolis-Algorithmus ist also außerstande, den Phasenraum hinreichend gut zu überdecken.

Ein Ausweg aus diesem Dilemma wurde noch nicht gefunden, eventuell könnte erst eine andere Darstellung für die  $b$ -Felder diese Schwierigkeiten vermeiden. Somit bleibt nichts anderes übrig, als die  $G(\tau)$ -Daten exakt aufzusummieren und die Einschränkung in Kauf zu nehmen, daß die niedrigste Temperatur auf Werte in der Größenordnung der Hybridisierung beschränkt ist.

### 5.3 Berechnung der Spektralfunktion

Da die thermodynamische Green-Funktion  $G(\tau)$  kaum direkte Rückschlüsse auf dynamische Größen zuläßt, soll in diesem Abschnitt gezeigt werden, wie aus ihr die bereits in Kap. 2 mehrfach diskutierte Spektralfunktion  $A(\omega)$  berechnet werden kann. In Anhang A wird folgender Zusammenhang bewiesen:

$$-G(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-\omega\tau} \frac{A(\omega)}{1 + e^{-\beta\omega}} \quad (5.34)$$

Für eine gegebene positive Spektralfunktion läßt sich damit leicht die thermodynamische Green-Funktion bestimmen, außerdem werden sofort einige Eigenschaften von  $G(\tau)$  offensichtlich. Zum Beispiel muß  $(-G(\tau))$  immer positiv gekrümmt sein, woraus bereits folgt, daß diese Größe — im Gegensatz zur entsprechenden Spektralfunktion — keine prägnanten Strukturen aufweisen kann (für weitere Eigenschaften siehe Anhang A).

Läßt sich nun die Gleichung (5.34) nach der Spektralfunktion auflösen? Nein, jedenfalls nicht ohne größere Anstrengungen. Im Prinzip existiert zwar zu einem gegebenen  $G(\tau)$  genau eine Spektralfunktion  $A(\omega)$ , doch in der numerischen Auswertung sind zum einen die berechneten Werte mit kleinen Fehlern behaftet, zum anderen ist die thermodynamische Green-Funktion nicht für alle, sondern nur für z.B.  $N = 20$  Punkte im Intervall  $[0, \beta]$  bekannt. Wie im folgenden gezeigt wird, folgt aus dieser kleinen Unsicherheit in  $G(\tau)$  eine sehr große Unsicherheit in der Spektralfunktion.

Eine Möglichkeit, die Integralgleichung (5.34) zu invertieren, besteht darin, von der diskreten Fouriertransformierten  $A(i\omega_n)$  auszugehen (siehe auch Anhang A):

$$A(i\omega_n) = \Delta\tau \sum_{m=1}^N \exp[i\omega_n\tau_m] G(\tau_m) \quad , \quad \tau_m = (m-1)\Delta\tau \quad (5.35)$$

Wegen der Periodizität der Green-Funktion ist die Funktion  $A(i\omega_n)$  nur auf diskreten Punkten in der komplexen Ebene, den Matsubara-Frequenzen

$$i\omega_n = i(2n-1)\frac{\pi}{\beta} \quad , \quad n = 1, \dots, N \quad (5.36)$$

definiert. Mit einer analytischen Fortsetzung von den endlich vielen Punkten auf der imaginären Frequenzachse auf die reelle Achse könnte die Spektralfunktion  $A(\omega)$  also bestimmt werden.

Doch existiert bislang kein wirklich zuverlässiges Verfahren, diese analytische Fortsetzung durchzuführen. Die am häufigsten verwendete Methode ist die Pade-Approximation [Hey92], in der die Koeffizienten eines rationalen Polynoms an die vorgegebenen Daten angepaßt werden. Dieses Polynom ergibt dann die gesuchte Funktion auf der reellen Achse. Doch sind die Ergebnisse oft alles andere als eindeutig und es ist viel Erfahrung notwendig, um diese Approximation sinnvoll anzuwenden.

### Die Maximum-entropy-Methode

Das in der aktuellen Literatur [Sil90, Gub91, Jar92, Jar93] zur Zeit am häufigsten verwendete Verfahren zur Inversion von Gl. (5.34) ist die Maximum-entropy-Methode.

Eine ausführliche Beschreibung dieser Methode, ihrer Möglichkeiten und Grenzen findet sich in [Gub91] anhand des Beispiels des Störstellen-Anderson-Modells (zu den Ergebnissen siehe Kap. 2.3). Die Eingabedaten sind zum einen die numerisch berechneten  $G(\tau)$ -Daten, zum anderen eine sogenannte Modell-Spektralfunktion  $m(\omega)$ . Diese erfüllt mehrere Aufgaben:

- die Definition der Entropie

$$S[A, m] = \int d\omega \left\{ A(\omega) - m(\omega) - A(\omega) \ln \frac{A(\omega)}{m(\omega)} \right\}, \quad (5.37)$$

wobei  $A(\omega)$  der gesuchten Spektralfunktion entspricht. Die Lösung  $A(\omega)$  soll die Entropie (5.37) maximieren, unter der Nebenbedingung, gemäß Gl. (5.34) die gegebenen  $G(\tau)$ -Daten möglichst gut anzufitten;

- sie bietet die Möglichkeit, Vorwissen (über z.B. Positivität, eventuelle Symmetrien oder asymptotisches Verhalten) bei der Suche nach der richtigen Lösung auszunutzen.

Hängt aber das Ergebnis von dem gewählten Modell  $m(\omega)$  ab? Hier kommt eine Stärke der Maximum-entropy-Methode zum Tragen, die es erlaubt, den Fehler des resultierenden  $A(\omega)$  abzuschätzen. In Abb. 5.7 sind die Ergebnisse für zwei verschiedene Modell-Spektralfunktionen dargestellt. Ein ungünstig gewähltes Modell (ein konstantes  $m(\omega)$ ; im Bild F DM) führt auf eine stark oszillierende Spektralfunktion mit sehr großen Fehlerbalken (im Bild QMC-ME). Ein Modell, daß einer Störungsrechnung [Hor87] entnommen wurde (im Bild L DM), liefert ein nur mit sehr kleinen Fehlern behaftetes Resultat (im Bild HZ&QMC-ME). Dieses  $A(\omega)$  ist im Sinne der Maximum-entropy-Methode die richtige Spektralfunktion. Die Unabhängigkeit von  $m(\omega)$  drückt sich dadurch aus, daß bei *kleinen* Fehlern die Lösung für die Spektralfunktion eindeutig ist.

Die Maximum-entropy-Methode ist jedoch nur für die Analyse von a priori verrauschten Daten geeignet, wie sie von Quanten-Monte-Carlo-Verfahren automatisch geliefert werden. Sie ist in gewisser Hinsicht in der Lage, die im Rauschen der Daten enthaltene Information bei der Konstruktion der richtigen Lösung auszunutzen. Daher kann die Maximum-entropy-Methode auch nicht auf die hier berechneten  $G(\tau)$ -Daten angewendet werden, deren kleiner Fehler nicht statistischen, sondern (aufgrund des endlichen  $N$ ) systematischen Ursprungs ist.

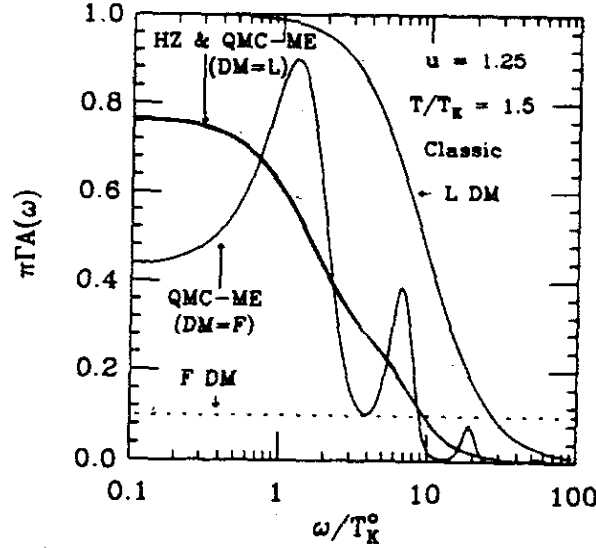


Abb. 5.7: Mit dem Maximum-entropy-Verfahren [Gub91] berechnete Spektralfunktion für zwei verschiedene Modell-Spektralfunktionen.

Es soll (nach [Jar93a]) sogar Ansätze geben, exakt gewonnene Daten mit einem statistischen Rauschen zu überlagern. Diese Vorgehensweise zielt jedoch nur darauf ab, die vorhandenen Computer-Programme zu verwenden und ist in keinsten Weise begründet.

### Fit mit ein bzw. zwei Lorentzfunktionen

Nun soll das Verfahren vorgestellt werden, welches in dieser Arbeit zur Inversion der Gl. (5.34) verwendet wurde. Nach den Ausführungen von Kap. 2 ist mit hoher Wahrscheinlichkeit anzunehmen, daß die Spektralfunktion für den Parametersatz I sich als eine Summe (höchstens) zweier Lorentzfunktionen darstellen läßt:

$$A(\omega) = \frac{g_1}{\pi} \frac{b_1}{(\omega - p_1)^2 + b_1^2} + \frac{g_2}{\pi} \frac{b_2}{(\omega - p_2)^2 + b_2^2} \quad (5.38)$$

Eine der beiden Lorentzkurven entspricht dem Peak am f-Niveau, die andere der Abrikosov-Suhl-Resonanz an der Fermikante. Der dritte Peak bei  $\varepsilon_f + U$  ist wegen  $U \rightarrow \infty$  ins Unendliche hinausgeschoben. Die Summe der Gewichte  $g = g_1 + g_2$  ist durch  $g = -G(0) - G(\beta)$  vorgegeben. Somit hängt  $A(\omega)$  noch von fünf Parametern ab: dem Relativgewicht  $g_1 - g_2$ , den Breiten  $b_1, b_2$  und den Positionen  $p_1, p_2$ .

Die gesuchte Spektralfunktion ist nun diejenige, welche die Abweichung  $Q(\bar{G}, G)$  der nach Gl. (5.34) aus  $A(\omega)$  bestimmten Funktion  $\bar{G}(\tau)$  von den numerischen Daten  $G(\tau)$  minimiert. Das Maß für die Abweichung wird üblicherweise (z.B. bei den



Maximum-entropy-Verfahren) als

$$Q(\bar{G}, G) \propto \sum_i (\bar{G}(\tau_i) - G(\tau_i))^2 \quad (5.39)$$

definiert. Es hat sich jedoch gezeigt, daß dieses Maß Lösungen erlaubt, die die Werte in der Mitte des Intervalls  $[0, \beta]$  zwar sehr gut reproduzieren, dafür aber bei  $\tau = 0$  oder  $\tau = \beta$  starke Abweichungen ergeben. Aus diesem Grund wird hier als Maß das Maximum der Beträge der relativen Abweichungen an jedem  $\tau$ -Wert bevorzugt:

$$Q(\bar{G}, G) = \max \left| \frac{1}{G(\tau_i)} (\bar{G}(\tau_i) - G(\tau_i)) \right| \quad (5.40)$$

Das Fitprogramm zur Bestimmung von  $A(\omega)$  läuft folgendermaßen ab:

- der Computer wählt zufällig innerhalb sinnvoller Intervalle eine Anfangskonfiguration  $\{g_1 - g_2, b_1, b_2, p_1, p_2\}$  aus;
- die einzelnen Größen werden solange variiert, bis die Konfiguration einem lokalen Minimum von  $Q(\bar{G}, G)$  ( $= Q_{\min}$ ) entspricht;
- diese Konfigurationen und  $Q_{\min}$  werden gespeichert und das Verfahren mit einer anderen Konfiguration wiederholt;
- nach ca. 1000 Durchläufen werden die Konfigurationen mit den besten, d.h. niedrigsten  $Q_{\min}$  weiter ausgewertet.

Für den Parametersatz I ergibt sich folgendes Bild (siehe Abb. 5.8 und 5.9). Es finden sich eine Reihe deutlich verschiedener Spektralfunktionen, die alle die  $G(\tau)$ -Daten sehr gut anfitzen ( $Q(\bar{G}, G) < 0.006$ ). In Abb. 5.8 ist eine Auswahl solcher Spektralfunktionen (bezeichnet als Fit 1 – 3) dargestellt. Die zugehörigen  $\bar{G}(\tau)$  sind in Abb. 5.9 im Vergleich zu den numerisch berechneten Daten zu sehen.

Offensichtlich ist in allen drei Fällen die Übereinstimmung mit  $G(\tau)$  so gut, daß es wenig Sinn macht, nach Spektralfunktionen zu suchen, die die Daten noch besser anfitzen. Schließlich sind die  $G(\tau)$ -Daten selbst mit einem kleinen Fehler behaftet, zum einen wegen der endlichen Auflösung des Computers, zum anderen wegen der Tatsache, daß  $N$  nicht unendlich gesetzt werden kann. Somit ist es *nicht* möglich, aus den gegebenen Daten für die thermodynamische Green-Funktion mehr als die grobe Struktur der Spektralfunktion zu extrahieren.

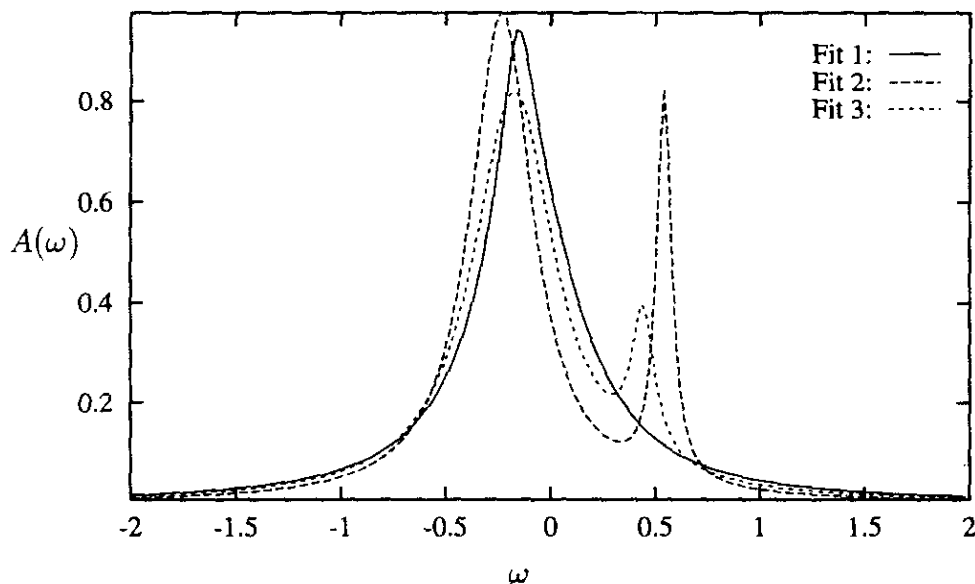


Abb. 5.8: Drei verschiedene Spektralfunktionen, die alle die berechneten  $G(\tau)$ -Daten sehr gut anfiten.

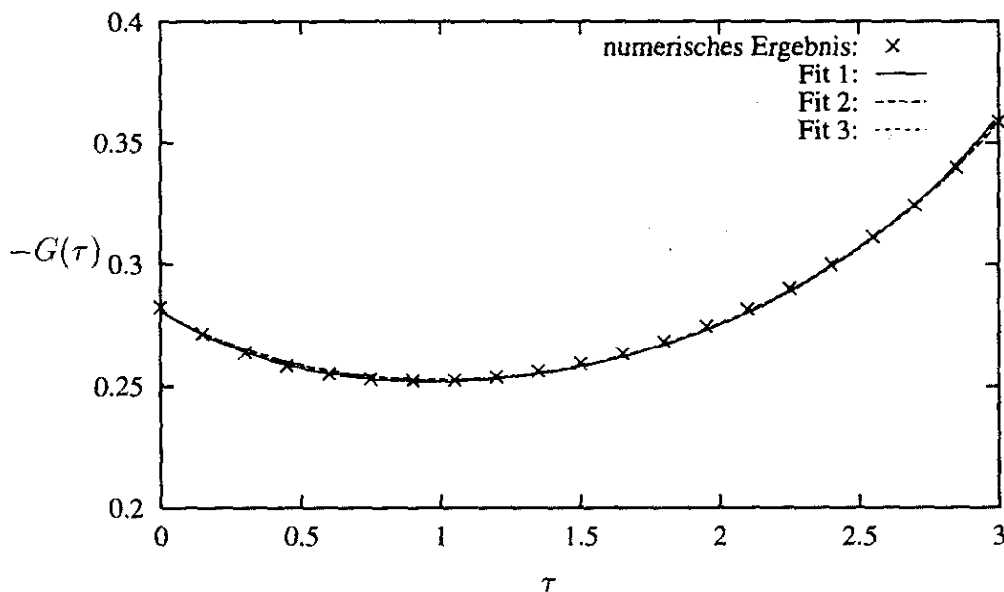


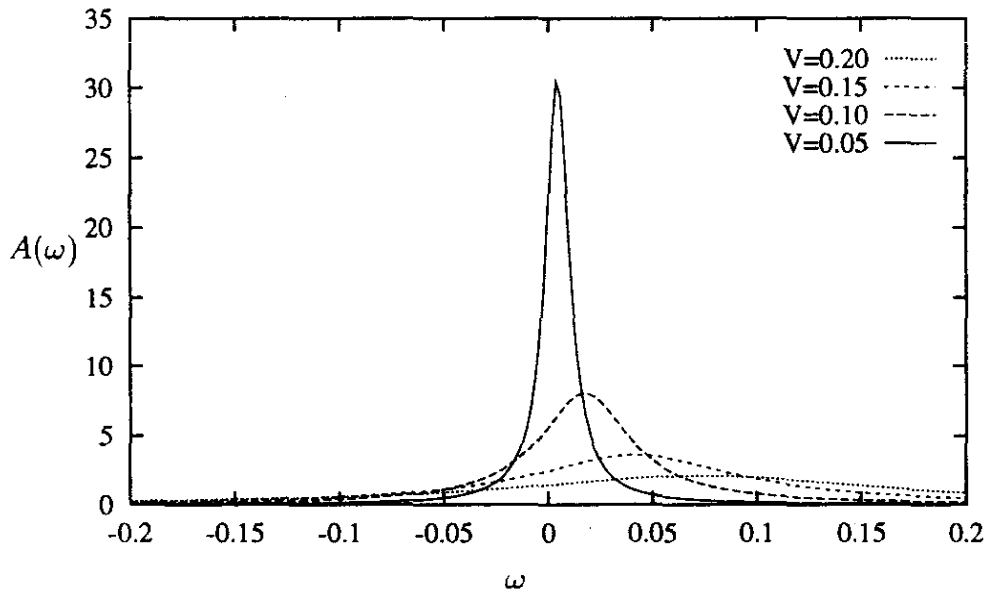
Abb. 5.9: Vergleich der  $G(\tau)$ -Werte aus Abb. 5.3 mit den  $\bar{G}(\tau)$ -Werten, die aus den Spektralfunktionen der Abb. 5.8 bestimmt wurden.

Die Spektralfunktionen für den Parametersatz II sollten, da sich das f-Niveau genau an der Fermikante befindet, im wesentlichen aus nur einer Lorentzfunktion bestehen. Wegen der relativ geringen Besetzung  $n_f = 2/3$  spielen Spin-flip-Prozesse der Leitungselektronen nur eine geringe Rolle — die Abrikosov-Suhl-Resonanz verschwindet.

Für das oben beschriebene Fitverfahren reicht also eine einzige Lorentzfunktion als Eingabe aus:

$$A(\omega) = \frac{g}{\pi} \frac{b}{(\omega - p)^2 + b^2} \quad (5.41)$$

Das Gewicht ist wieder durch  $g = -G(0) - G(\beta)$  vorbestimmt, weshalb nur mehr zwei Parameter zu variieren sind. Im Gegensatz zum Fall I sind hier die Ergebnisse mit den geringsten Abweichungen  $Q(\bar{G}, G)$  unabhängig von den Ausgangsdaten  $b$  und  $p$ . In Abb. 5.10 sind die aus den  $G(\tau)$ -Daten der Abb. 5.4 resultierenden Spektralfunktionen dargestellt. Für  $V = 0$  würde sich eine  $\delta$ -Funktion genau an der Fermikante ergeben. Mit zunehmender Hybridisierung verbreitert sich der Peak und verschiebt sich zu höheren Frequenzen. Diese beiden Effekte sind proportional zu  $V^2$ .



**Abb. 5.10:** Die zu den  $G(\tau)$ -Daten aus Abb. 5.4 gehörenden Spektralfunktionen.

Die Verschiebung der Spektralfunktion kann folgendermaßen verstanden werden. Aus  $n_0 + 2n_\sigma = 1$  folgt bei einer Abnahme von  $n_\sigma$  um  $\delta n$  eine Zunahme von  $n_0$  um  $2\delta n$ :

$$n'_\sigma = n_\sigma - \delta n \quad (5.42)$$

$$n'_0 = n_0 + 2\delta n \quad (5.43)$$

Gleichzeitig gilt nach (A.20)

$$n'_0 + n'_\sigma = \int d\omega A'(\omega) = n_0 + n_\sigma + \delta n \quad (5.44)$$

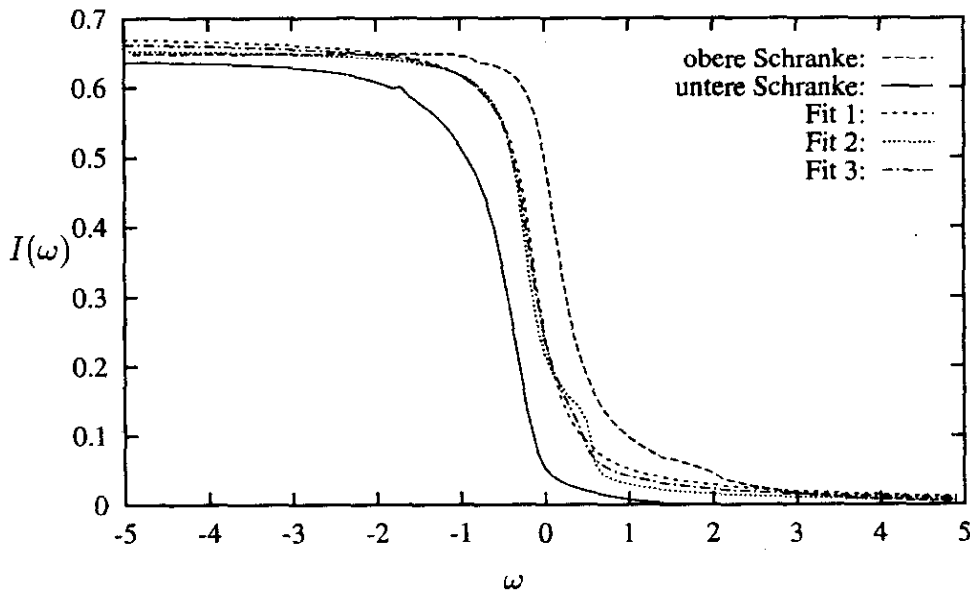
Wegen

$$n'_\sigma = \int d\omega f(\omega) A'(\omega) \quad (5.45)$$

soll sowohl  $\int d\omega A'(\omega)$  zunehmen als auch  $\int d\omega f(\omega) A'(\omega)$  abnehmen, was nur möglich ist, wenn sich die Lorentzfunktion nach rechts verschiebt.

Da die Übereinstimmung der  $\bar{G}(\tau)$  mit den  $G(\tau)$  ebenso gut ist wie bei Parametersatz I, wird auf den Vergleich dieser beiden Kurven hier verzichtet. Zu erwähnen ist jedoch, daß mit zunehmendem  $V$  die Abweichungen immer größer werden, was darauf hindeutet, daß die Näherung einer einzelnen Lorentzfunktion ab ca.  $V = 0.15$  nicht mehr in dem Maße gerechtfertigt ist, wie für kleinere Hybridisierungen.

### Ein Schrankenformalismus



**Abb. 5.11:** Obere und untere Schranke für die aufintegrierte Spektralfunktion, die den  $G(\tau)$ -Werten aus Abb. 5.3 entspricht. Im Vergleich dazu die aufintegrierten Spektralfunktionen aus Abb. 5.8 .

Ein weiterer Ansatzpunkt, die Integralgleichung (5.34) zu invertieren, wird in [Bra92] beschrieben. Brandt und Urbanek erhalten exakte obere und untere Schranken für die integrierte Spektralfunktion

$$I(\omega) = \int_{-\infty}^{\omega} d\omega' A(\omega') \quad (5.46)$$

bei gegebenen  $G(\tau)$ -Werten. Falls in bestimmten Frequenzbereichen beide Schranken übereinstimmen, kann dort direkt auf die gesuchte Spektralfunktion geschlossen werden. Freundlicherweise wurden von M. Urbanek diese Schranken für die  $G(\tau)$ -Daten aus Abb. 5.3 (Parametersatz I) berechnet.

In Abb. 5.11 sind die Ergebnisse zusammen mit den aufintegrierten Spektralfunktionen von Abb. 5.8 dargestellt. Die erhaltenen Schranken liegen so weit auseinander, daß keine der drei gezeigten Möglichkeiten ausgeschlossen werden kann. Somit eignet sich dieser Formalismus leider nicht zur Analyse der hier berechneten  $G(\tau)$ -Daten.

## 5.4 Vergleich mit NCA-Resultaten

In diesem Abschnitt sollen die gerade berechneten Green-Funktionen und Spektralfunktionen mit den Ergebnissen der (in einem weiten Parameterbereich sehr zuverlässigen) Non-crossing-Approximation (NCA) verglichen werden.

Die NCA-Spektralfunktion für den Parametersatz I weist keine Abrikosov-Suhl-Resonanz auf und ist zusammen mit dem Fit 1 von Abb. 5.8 in Abb. 5.12 dargestellt. Die gefittete Spektralfunktion ist gegenüber dem NCA-Resultat leicht zu niedrigeren Frequenzen hin verschoben. Diese Diskrepanz erklärt sich zum Teil aus dem

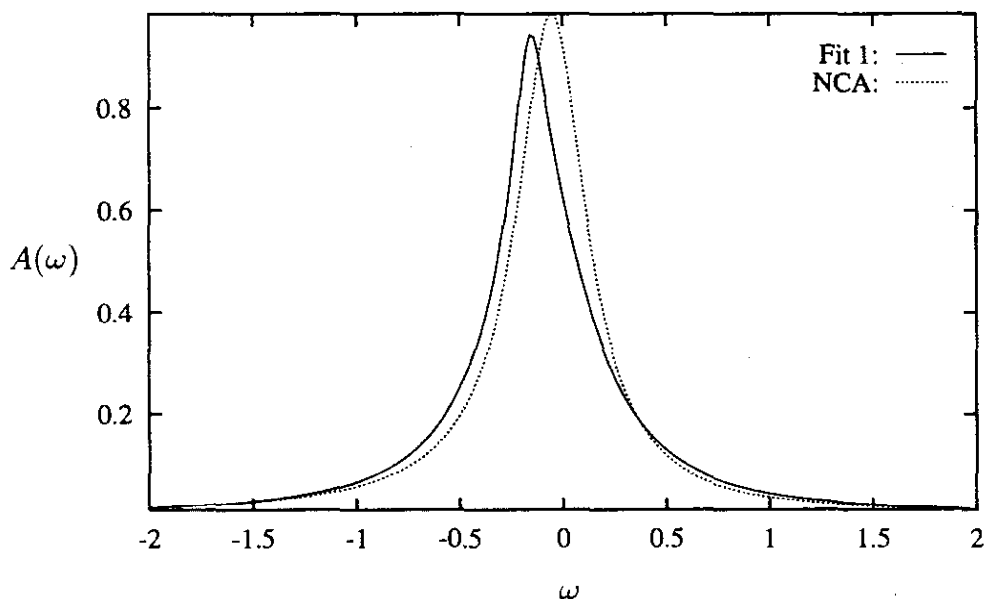


Abb. 5.12: Vergleich der NCA-Spektralfunktion mit Fit 1 aus Abb. 5.8.

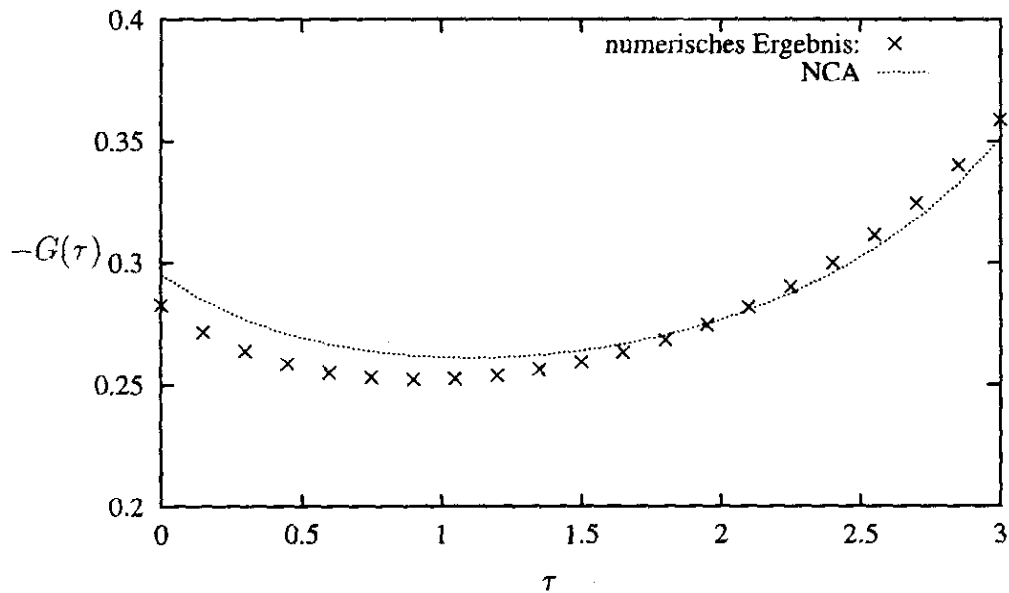


Abb. 5.13: Vergleich der Funktionalintegral- und NCA-Resultate für  $G(\tau)$  (Parametersatz I).

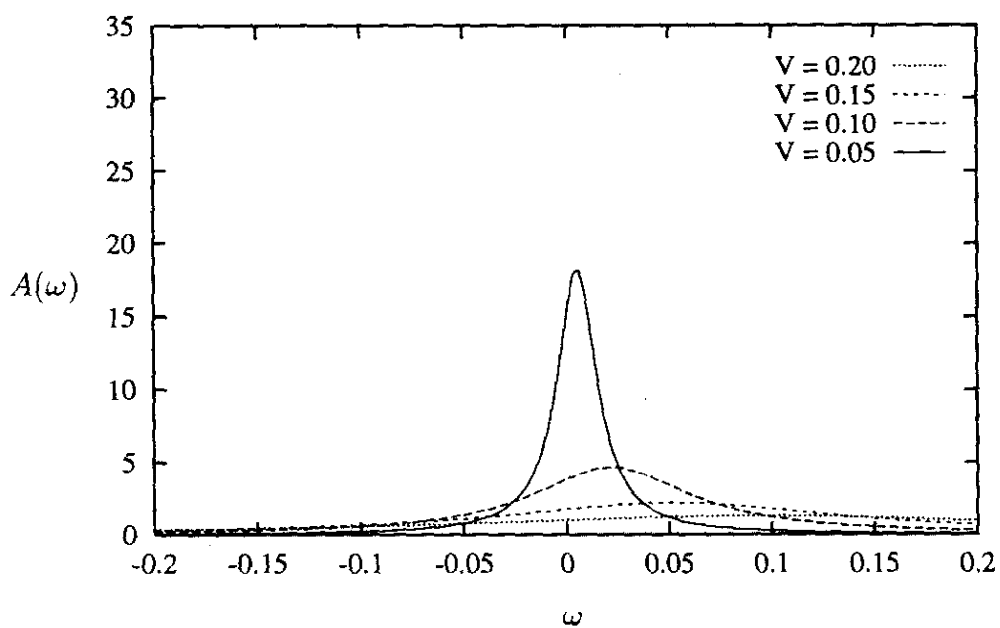
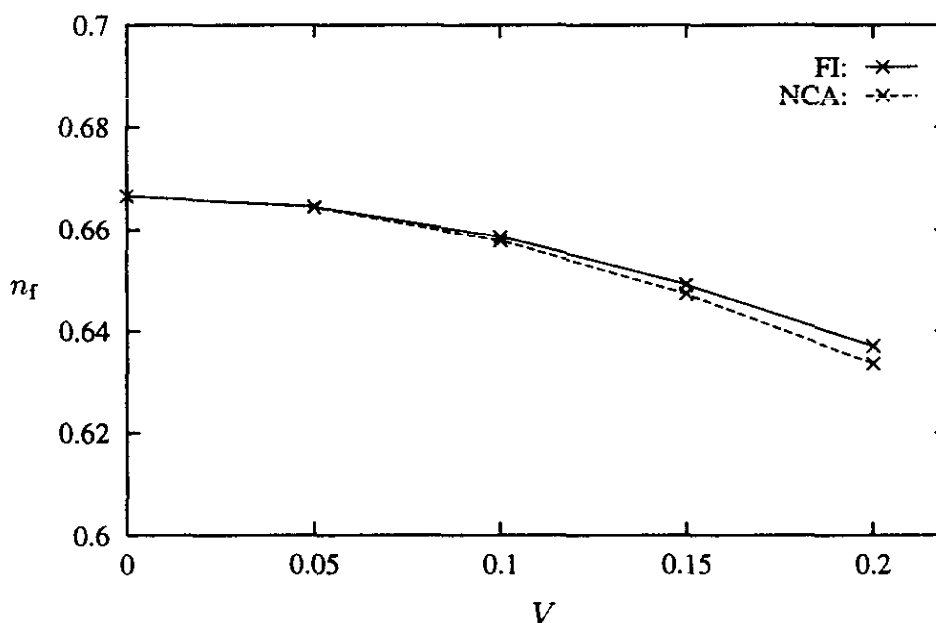


Abb. 5.14: NCA-Spektralfunktionen für Parametersatz II.

Vergleich der  $G(\tau)$ -Daten aus Abb. 5.3 mit denen gemäß Gl. (5.34) aus der NCA-Spektralfunktion berechneten Green-Funktion  $G_{\text{NCA}}(\tau)$  (siehe Abb. 5.13). Zwar beträgt der Unterschied zwischen  $G(\tau)$  und  $G_{\text{NCA}}(\tau)$  bei  $\tau = 0$  ca. 4% und bei  $\tau = \beta$  ca. 2%, es hat sich jedoch gezeigt, daß eine Extrapolation der numerisch berechneten Werte für  $N \rightarrow \infty$  diesen Unterschied in etwa halbiert. Die Frage, ob die Differenz zwischen  $G(\tau)$  und  $G_{\text{NCA}}(\tau)$  für  $N \rightarrow \infty$  wirklich bestehen bleibt, kann aber nicht mit Sicherheit beantwortet werden.

Für den Parametersatz II sind die NCA-Spektralfunktionen gegenüber den Spektralfunktionen aus Abb. 5.10 etwas verbreitert (siehe Abb. 5.14). Die daraus resultierende f-Besetzung ergibt für die NCA-Resultate einen stärkeren Abfall mit zunehmendem  $V$  (siehe Abb. 5.15).



**Abb. 5.15:** Vergleich der Abhängigkeit der f-Besetzung von der Hybridisierung für die Funktionalintegral- und NCA-Resultate.

Abschließend ist zu sagen, daß sich im Rahmen der durch die endliche Zahl an Zeitschritten bedingten Ungenauigkeit, eine gute Übereinstimmung zwischen den Funktionalintegral- und NCA-Resultaten ergibt.

## 5.5 Weitere Ansatzpunkte

In diesem Abschnitt soll gezeigt werden, daß ein enger Zusammenhang zwischen der Determinantenformel zur Berechnung der Zustandssumme (5.17) und einer Entwicklung der Zustandssumme nach Graphen besteht. Diese Erkenntnis beinhaltet jedoch nicht die Möglichkeit, bestimmte Graphen aufgrund der Struktur ihrer Selbstenergie (wie in der NCA) wegzulassen. Lediglich eine globale Näherung für die Spingewichte aller Graphen kann durchgeführt werden. Diese Näherung führt beim Störstellen-Anderson-Modell aber zu keinen sinnvollen Resultaten.

Betrachtet werden soll die Gleichung

$$Z = \int_b \det M(b) \quad (5.47)$$

zur Berechnung der Zustandssumme des Störstellen-Anderson-Modells ( $\det H$  wurde der Einfachheit halber weggelassen). Nach der Formel

$$\det M(b) = \sum_P (-1)^P \prod_{i=1}^N M(b)_{iP(i)} \quad (5.48)$$

( $P(i)$  ist eine Permutation der Zahlen  $i = 1, \dots, N$ ) entspricht die Determinante einer Summe von  $N!$  Termen, wobei jeder einzelne Term — wie im folgenden gezeigt wird — als Graph interpretiert werden kann.

Nach (5.16) sind alle  $M(b)_{ij}$  proportional dem Term  $\sum_{\sigma} b_{\sigma i}^* b_{\sigma j}$  mit Ausnahme der Diagonalelemente, die eine zusätzliche 1 enthalten. Überraschenderweise können die  $b$ -Integrationen in

$$Z = \sum_P (-1)^P \int_b \prod_{i=1}^N M(b)_{iP(i)} \quad (5.49)$$

sehr einfach ausgeführt werden. Für jeden Zyklus der Permutation mit einer Länge  $> 1$  (d.h. mit Ausnahme der Fixpunkte) ergeben sie einen Faktor 2, so daß folgende modifizierte Determinantenformel folgt

$$Z = \sum_P (-1)^P 2^{s(P)} \prod_{i=1}^N \tilde{M}_{iP(i)} \quad (5.50)$$

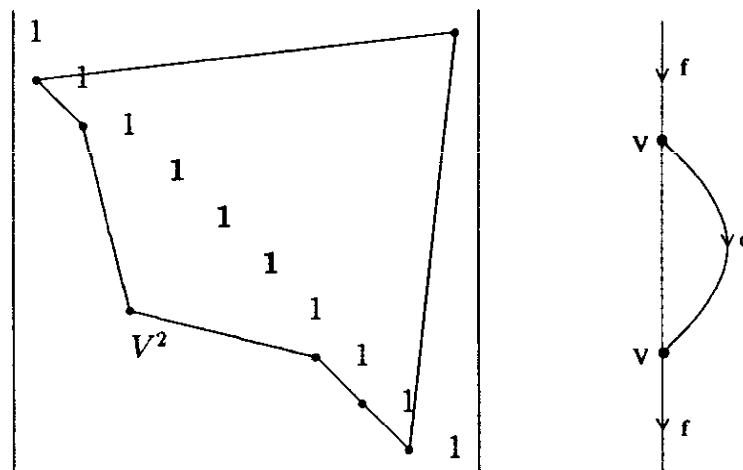
( $s(P)$ : Zyklenanzahl minus Zahl der Fixpunkte der Permutation).  $\tilde{M}_{ij}$  wird aus  $M(b)_{ij}$  dadurch erhalten, daß die  $\sum_{\sigma} b_{\sigma i}^* b_{\sigma j}$  in den Nichtdiagonalelementen gleich 1 und in den Diagonalelementen gleich 2 gesetzt werden. Trotz der Ähnlichkeit von Gl. (5.50) mit der normalen Determinantenformel (5.48) ist dieser Ausdruck weder



analytisch noch numerisch einfach zu behandeln. Vor allem das weitaus drastischere Ansteigen von  $N!$  gegenüber  $2^N$  läßt es wenig sinnvoll erscheinen, zur Berechnung der Zustandssumme die Gl. (5.50) dem in Kap. 5.2 beschriebenen Verfahren vorzuziehen. Die Interpretation der Summanden in (5.49) bzw. (5.50) als Graphen soll an Beispielen bis zur Ordnung  $V^6$  veranschaulicht werden.

In der Ordnung  $V^0$  gibt es nur zwei mögliche Graphen: das Produkt der Einsen in der Diagonalen ( $s(P) = 0$ ) und das Produkt der  $(1 - \Delta\tau\epsilon_f)$ -Terme in der Nebendiagonalen ( $s(P) = 1$ ). Deren Beiträge sind identisch mit der Zustandssumme des Einzustandsmodells (4.44).

Ein Beitrag der Ordnung  $V^2$  ist in Abb. 5.16 seinem entsprechenden Graphen gegenübergestellt. Die Einsen deuten die Diagonalelemente an, von denen die fett



**Abb. 5.16:** Beitrag der Ordnung  $V^2$  als Produkt der Matrixelemente von  $M(b)$  ( $s(P) = 1$ ) und als Graph.

gedruckten (die Fixpunkte) dem unbesetzten Propagator entsprechen; dieser ist im Graph als gestrichelte Linie dargestellt. Die Elemente in der Nebendiagonalen entsprechen dem besetzten Propagator — der mit  $f$  bezeichneten, durchgezogenen Linie im Graphen. Das eine, vom Hybridisierungsterm stammende Matrixelement kann als Leitungselektronenpropagator aufgefaßt werden. Der komplette Zyklus der Permutation ist in der Matrix als durchgezogene Linie veranschaulicht.

Die Abbildungen 5.17 und 5.18 zeigen zwei Beiträge der Ordnung  $V^4$  mit  $s(P) = 1$  bzw.  $s(P) = 2$ .

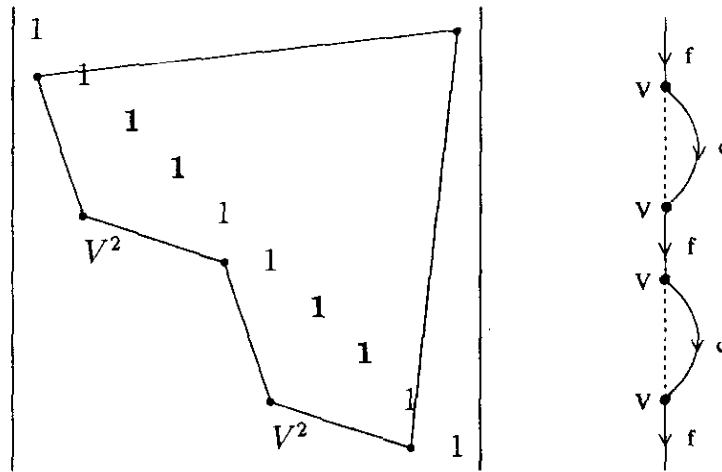


Abb. 5.17: Beitrag der Ordnung  $V^4$  als Produkt der Matrixelemente von  $M(b)$  ( $s(P) = 1$ ) und als Graph.

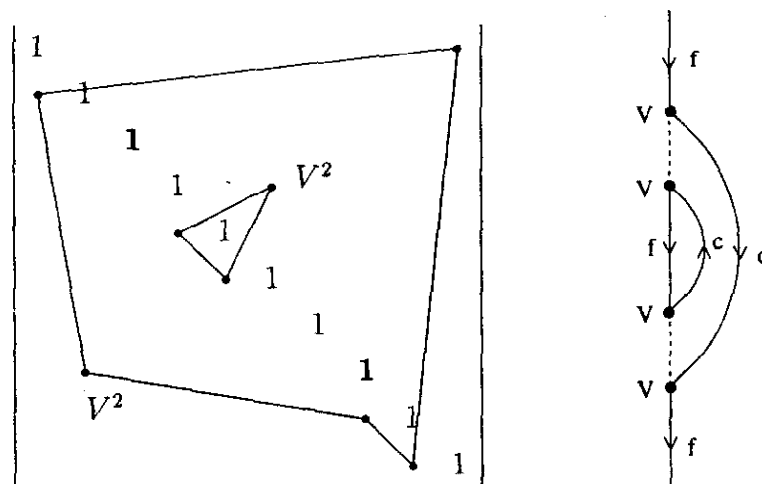
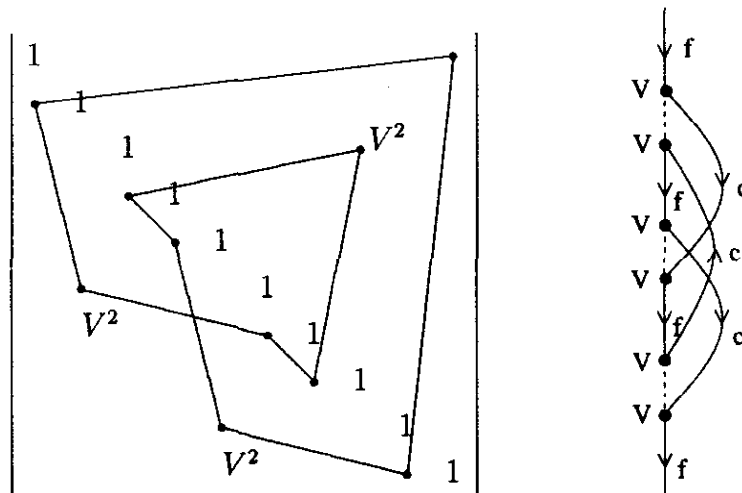


Abb. 5.18: Beitrag der Ordnung  $V^4$  als Produkt der Matrixelemente von  $M(b)$  ( $s(P) = 2$ ) und als Graph.

In Abb. 5.19 ist schließlich ein Beitrag der Ordnung  $V^6$  mit  $s(P) = 1$  dargestellt. Dieser kreuzende Graph würde in einer Non-crossing-Approximation weggelassen



**Abb. 5.19:** Beitrag der Ordnung  $V^6$  als Produkt der Matrixelemente von  $M(b)$  ( $s(P) = 1$ ) und als Graph.

werden. Es ist jedoch nicht möglich, einen solchen Beitrag aufgrund der Struktur seiner Selbstenergie in Gl. (5.50) zu vernachlässigen. Welche Näherung ist aber überhaupt durchführbar?

In Kap. 4.2 und 4.4. wurde bereits auf die Tatsache aufmerksam gemacht, daß die Ersetzung

$$\sum_{\sigma} b_{\sigma i}^* b_{\sigma j} \rightarrow \alpha^{1/N} \simeq \left(1 + \frac{\ln \alpha}{N}\right) \quad (5.51)$$

(dort mit  $\alpha = 2$ ) in der Matrix  $M$  in manchen Fällen die korrekte Berechnung der Zustandssumme erlaubt.

Diese Näherung hat folgende Bedeutung: jeder Beitrag erhält denselben Faktor  $\alpha$ , ohne Rücksicht auf die wirkliche Zahl der Zyklen der Permutation, die den Faktor  $2^{s(P)}$  ergeben würde. Inwieweit ist diese Näherung für das Störstellen-Anderson-Modell sinnvoll?

Nach (5.14) folgt für die Wirkung mit der Ersetzung (5.51):

$$\begin{aligned} S(\psi, \psi^\dagger) &= \sum_n \psi_n^\dagger \left( \left(1 - \Delta\tau \left(\varepsilon_f - \frac{\ln \alpha}{\beta}\right)\right) \psi_{n-1} - \psi_n \right) \\ &+ \left(\frac{\beta V}{N}\right)^2 \alpha^{1/N} \sum_{nm} \psi_{n+1}^\dagger \psi_{m-1} \sum_k (H^{-1})_{nm}(k) \end{aligned} \quad (5.52)$$

Diese Wirkung entspricht dem ursprünglichen Modell, jedoch ohne Coulombwechselwirkung und mit einem um  $\frac{\ln \alpha}{\beta}$  verschobenen f-Niveau, während die Hybridisierung (für  $N \rightarrow \infty$ ) unverändert bleibt — im Gegensatz zum Ergebnis einer Mean-field-Theorie, die das f-Niveau an die Fermikante rückt sowie eine drastische Reduzierung der Hybridisierung ergibt.

Die vorgestellte Näherung ist also für das Störstellen-Anderson-Modell zum einen unbegründet und liefert zum anderen keine vernünftigen Resultate. Doch wie das in Kap. 4.4 zitierte Beispiel zeigt, ist es nicht ausgeschlossen, daß dieser Ansatz bei der Behandlung anderer Systeme zu Erfolgen führen könnte.

## 6 Das Störstellen-Anderson-Modell — Suszeptibilität

In Kap. 2 wurde bereits beschrieben, wie das magnetische Moment des lokalisierten Zustands aufgrund der Wechselwirkung mit den Leitungselektronen für  $T \rightarrow 0$  verschwindet. Im folgenden soll das effektive magnetische Moment  $\mu_{\text{eff}}(T)$  untersucht werden, das über das Curie-Gesetz mit der magnetischen Suszeptibilität  $\chi_m(T)$  zusammenhängt:

$$\chi_m(T) = \frac{g\mu_B}{k_B T} \mu_{\text{eff}}(T) \quad (6.1)$$

Dabei wurde vorausgesetzt, daß das reale magnetische Moment des Elektrons im Störstellenniveau konstant an das äußere Magnetfeld ankoppelt:

$$H_B = -g\mu_B B (f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} - f_{\downarrow}^{\dagger} f_{\downarrow}) \quad (6.2)$$

Die statische magnetische Suszeptibilität ist definiert als die Antwort der Magnetisierung  $m = (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})$  auf das äußere Magnetfeld im Limes  $B \rightarrow 0$ :

$$\chi_m = \left. \frac{\partial m}{\partial B} \right|_{B=0} \quad (6.3)$$

Im Kap. 6.1 wird gezeigt, wie die in Kap. 4 und 5 entwickelte Theorie modifiziert werden muß, um die Besetzungszahlen  $n_{\uparrow}$  und  $n_{\downarrow}$  in Anwesenheit des zusätzlichen Magnetfelds zu berechnen. Ergebnisse für das effektive magnetische Moment in Abhängigkeit der Temperatur und der Hybridisierung werden in Kap. 6.2 vorgestellt.

Die Größe  $\chi_m$  könnte auch über die Gleichung

$$\chi_m = g\mu_B \int_0^{\beta} d\tau \langle m[\tau]m \rangle - \beta g\mu_B \langle m \rangle^2 \quad (6.4)$$

aus der Korrelationsfunktion  $\langle m[\tau]m \rangle$  berechnet werden. Diese Vorgehensweise würde jedoch einen erheblich höheren Rechenaufwand bedeuten.

## 6.1 Funktionalintegral mit zusätzlichem Magnetfeld

Das zusätzliche Magnetfeld ändert in der Wirkung (5.14) nicht den Hybridisierungsterm, sondern nur den reinen f-Anteil:

$$S_f^B(\psi, \psi^\dagger, b) = \sum_n \psi_n^\dagger \psi_{n-1} \left[ (1 - \Delta\tau(\varepsilon_f - g\mu_B B)) b_{\uparrow n}^* b_{\uparrow n-1} + (1 - \Delta\tau(\varepsilon_f + g\mu_B B)) b_{\downarrow n}^* b_{\downarrow n-1} \right] - \sum_n \psi_n^\dagger \psi_n \quad (6.5)$$

In der durch

$$S_{\text{eff}}^B(\psi, \psi^\dagger, b) = - \sum_{nm} \psi_n^\dagger M_{nm}^B \psi_m \quad (6.6)$$

definierten Matrix  $M^B$  tritt nur in der Nebendiagonalen eine Änderung auf:

$$M_{nm}^B(b) = - \left[ (1 - \Delta\tau(\varepsilon_f - g\mu_B B)) b_{\uparrow n}^* b_{\uparrow n-1} + (1 - \Delta\tau(\varepsilon_f + g\mu_B B)) b_{\downarrow n}^* b_{\downarrow n-1} \right] \delta_{n-1,m} + \delta_{nm} - \left( \frac{\beta V}{N} \right)^2 \sum_\sigma b_{\sigma n}^* b_{\sigma m} \sum_k (H^{-1})_{n-1, m+1}(k) \quad (6.7)$$

In der Ising-Darstellung für die  $b$ -Felder kann der erste Term nur die Werte  $2(1 - \Delta\tau\varepsilon_f)$  oder  $2\Delta\tau g\mu_B B$  annehmen.

## 6.2 Numerische Ergebnisse

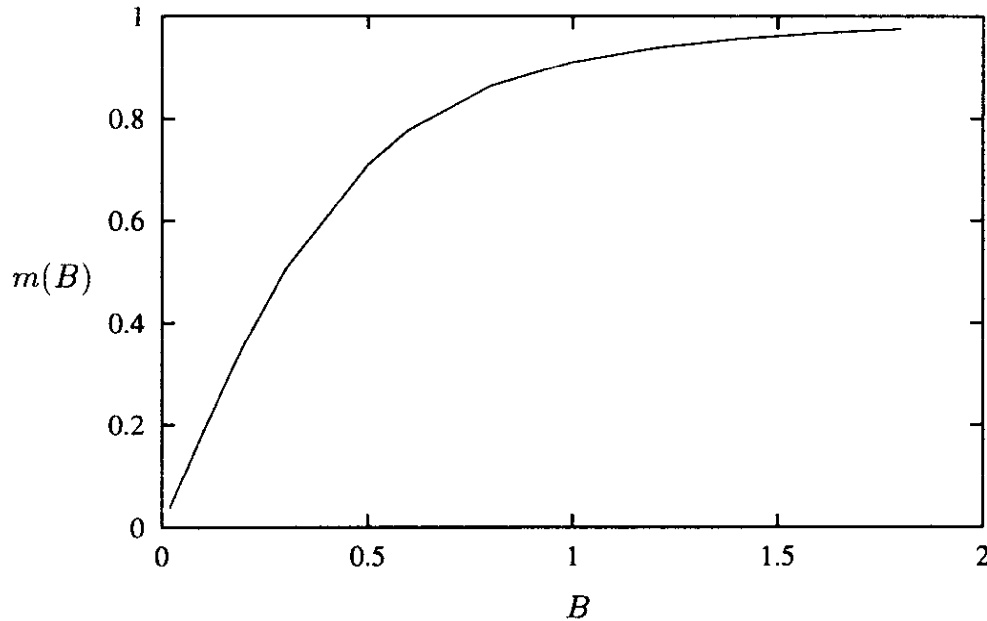
Die in Kap. 6.1 beschriebenen Modifikationen erlauben die Berechnung der spin-abhängigen Green-Funktionen

$$-G_\sigma(\tau) = \frac{1}{Z} \text{Sp} \left[ e^{-\beta H} X_{0\sigma}(\tau) X_{0\sigma}(0) \right] \quad (6.8)$$

Auch hier sind die Besetzungszahlen  $n_\sigma = -G_\sigma(\beta)$  nicht direkt zugänglich. Die Berechnung über  $G_\sigma(0)$  (siehe Gl. (4.31)) scheidet ebenfalls aus, da lediglich die Gleichung

$$-G_\sigma(0) - \sum_{\sigma'} G_{\sigma'}(\beta) = 1 \quad (6.9)$$

erfüllt ist. Deshalb werden die  $n_\uparrow$  und  $n_\downarrow$  durch Extrapolation der numerisch berechneten  $G(\tau)$ -Werte gewonnen. In Abb. 6.1 sind die Ergebnisse für die Magnetisierung in Abhängigkeit vom angelegten Magnetfeld dargestellt (Parametersatz I,  $N = 16$ ). Für hohe  $B$ -Werte tritt eine Sättigung der Magnetisierung ein. Für kleine  $B$ -Werte



**Abb. 6.1:** Magnetisierung in Abhängigkeit vom angelegten Magnetfeld für den Parametersatz I.

ist der Zusammenhang  $m(B)$  linear, so daß zur Bestimmung der magnetischen Suszeptibilität  $\partial m/\partial B$  durch  $m/B$  ersetzt werden kann. Abb. 6.2 zeigt die Temperaturabhängigkeit der magnetischen Suszeptibilität. Diese Kurve ähnelt sehr einem Curie-Verhalten. Für eine genauere Analyse ist jedoch die Berechnung des effektiven magnetischen Moments notwendig. In Abb. 6.3 ist  $\mu_{\text{eff}}(T)$  für verschiedene Werte der Hybridisierung dargestellt. Das exakte Resultat für  $V = 0$

$$\mu_{\text{eff}}^{V=0}(T) = \frac{2}{2 + e^{-\beta\epsilon_f}} \quad (6.10)$$

ist mit der durchgezogenen Linie dargestellt. In diesem Fall sind die beiden Größen f-Besetzung und effektives magnetisches Moment identisch. Für endliche Hybridisierungen ( $V \gtrsim 0.1$ ) sinkt  $\mu_{\text{eff}}(T)$  mit abnehmender Temperatur. Dieser Effekt ist jedoch nicht mit einer Abnahme der f-Besetzung korreliert, im Gegenteil,  $n_f$  nimmt mit abnehmender Temperatur auch bei endlichen Hybridisierungen zu. Das effektive magnetische Moment wird also durch die Leitungselektronen abgeschirmt.

Leider ist auch hier die Auswertung nicht für beliebig kleine Temperaturen möglich. Das experimentelle Resultat des Verschwindens von  $\mu_{\text{eff}}(T=0)$  (siehe Abb. 2.3) kann nicht überprüft werden.

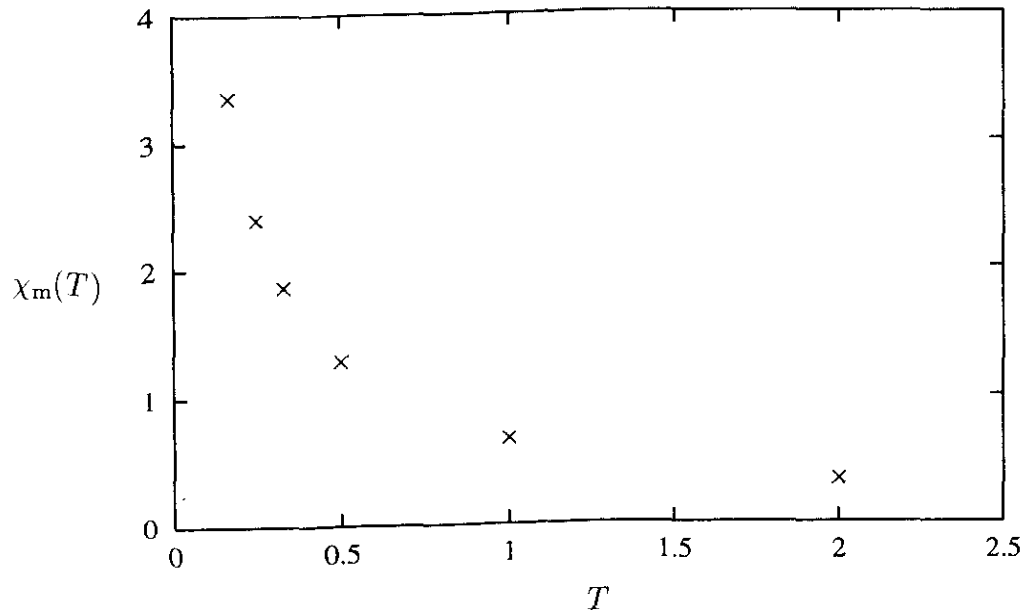


Abb. 6.2: Temperaturabhängigkeit der magnetischen Suszeptibilität (Parametersatz I).

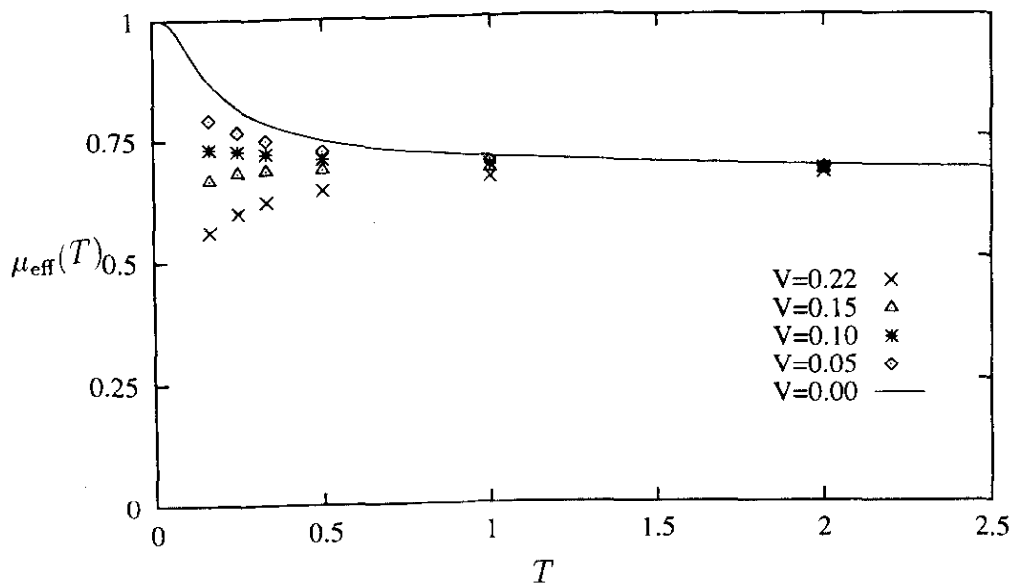


Abb. 6.3: Das effektive magnetische Moment in Abhängigkeit der Temperatur für verschiedene Werte der Hybridisierung ( $\epsilon_f = -0.2$ ).



## 7 Renormierungsgruppentheorie für das Störstellen-Anderson-Modell

In den Arbeiten von Wilson [Wil75] und Krishna-murthy et al. [Kri80] wurden statische Eigenschaften des Störstellen-Anderson-Modells wie die Temperaturabhängigkeit der magnetischen Suszeptibilität mit Hilfe der Renormierungsgruppentheorie ausgewertet. Die Berechnung dynamischer Größen wurde zum ersten Mal durch Froyta und Oliveira [Fro86] und Sakai et al. [Sak89] beschrieben. Von Costi und Hewson [Cos92, Cos93, Cos93a] wurden außer der Spektralfunktion auch die Transportgrößen elektrischer Widerstand, Thermokraft, thermische Leitfähigkeit und der Hall-Koeffizient bestimmt.

Dieses Kapitel beinhaltet einen von diesen Arbeiten unabhängigen Ansatz zur Berechnung der Spektralfunktion für  $T = 0$ . Die Erweiterung auf endliche Temperaturen wird Gegenstand zukünftiger Rechnungen sein.

Die Motivation für die im folgenden beschriebenen Untersuchungen sind Arbeiten zu Gittermodellen der Dimension  $d = \infty$ , deren Eigenschaft, eine rein lokale Selbstenergie aufzuweisen, die Abbildung des Modells auf ein effektives Störstellen-Anderson-Modell erlaubt. „Effektiv“ bedeutet hier, daß die Ankopplung der Störstelle an die Leitungselektronen durch eine selbstkonsistent zu bestimmende, energieabhängige Hybridisierung erfolgt, welche einer nichtkonstanten Zustandsdichte der Leitungselektronen äquivalent ist.

Das Ziel von Kap. 7.1 ist es, die in [Kri80] beschriebene Renormierungsgruppentheorie auf den Fall einer solchen nichtkonstanten Zustandsdichte zu erweitern. Die resultierenden Eigenzustände und Eigenfunktionen lassen dann auf die Spektralfunktion schließen. Da jedoch die notwendige Diskretisierung des Leitungsbandes auch ein diskretes Spektrum zur Folge hat, wird in Kap. 7.2 ein Verfahren vorgestellt, wie daraus die kontinuierliche Spektralfunktion erhalten werden kann.

## 7.1 Die Theorie

In der Renormierungsgruppentheorie wird (im Gegensatz zur Funktionalintegralmethode) versucht, die Schrödingergleichung für das Störstellen-Anderson-Modell zu lösen, d.h. dessen Eigenzustände und Eigenenergien zu bestimmen. Das in Kap. 2.2 für endliche  $U$  eingeführte Modell lautet:

$$\begin{aligned}
 H' = & \sum_{\sigma} \varepsilon_{\sigma} f_{-1\sigma}^{\dagger} f_{-1\sigma} + U f_{-1\uparrow}^{\dagger} f_{-1\uparrow} f_{-1\downarrow}^{\dagger} f_{-1\downarrow} \\
 & + \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} V (f_{-1\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^{\dagger} f_{-1\sigma}) \quad (7.1)
 \end{aligned}$$

Der dritte Term entspricht einem Leitungsband mit der Zustandsdichte  $\rho(\varepsilon)$ . Aus Gründen, die später ersichtlich werden, erhalten die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren des Störstellenelektrons den zusätzlichen Index „-1“.

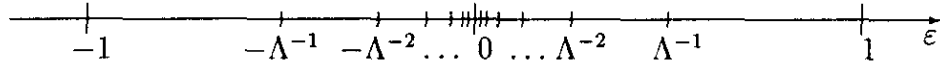
Für die Anwendung der Renormierungsgruppentheorie ist eine kontinuierliche Darstellung der Leitungselektronen günstiger:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\sigma} \varepsilon_{\sigma} f_{-1\sigma}^{\dagger} f_{-1\sigma} + U f_{-1\uparrow}^{\dagger} f_{-1\uparrow} f_{-1\downarrow}^{\dagger} f_{-1\downarrow} \\
 & + \sum_{\sigma} \int_{-1}^1 d\varepsilon g(\varepsilon) a_{\varepsilon\sigma}^{\dagger} a_{\varepsilon\sigma} + \sum_{\sigma} \int_{-1}^1 d\varepsilon h(\varepsilon) (f_{-1\sigma}^{\dagger} a_{\varepsilon\sigma} + a_{\varepsilon\sigma}^{\dagger} f_{-1\sigma}) \quad (7.2)
 \end{aligned}$$

Alle Energien sind hier in Einheiten von  $D$  (der halben Bandbreite) definiert. Wie in Anhang D mit Hilfe der Funktionalintegralformulierungen für  $H'$  und  $H$  gezeigt wird, sind die beiden Hamiltonoperatoren in dem Sinne äquivalent, daß das Leitungselektronensystem auf die gleiche Weise die Eigenschaften des Störstellenniveaus beeinflusst. Es gibt eine Vielzahl von Möglichkeiten für die Wahl der Funktionen  $g(\varepsilon)$  und  $h(\varepsilon)$ . Die für den Leitungselektronenterm günstigste Wahl  $g(\varepsilon) = \varepsilon$  führt auf eine energieabhängige Kopplung  $h(\varepsilon) = V\sqrt{\rho(\varepsilon)}$ . Dieser Ansatz wird im weiteren beschrieben. Ein konstantes  $h(\varepsilon) = h$  ergibt ein  $g(\varepsilon)$ , das der Umkehrfunktion von  $\int_{-1}^{\varepsilon} d\varepsilon' \rho(\varepsilon')$  proportional ist.

### Logarithmische Diskretisierung des Leitungsbandes

Der Hamiltonoperator (7.2) beschreibt ein System mit einer (unendlich) großen Zahl von Energieskalen. Für die Eigenschaften des Störstellenelektrons sind alle diese Energieskalen relevant, denn das f-Elektron koppelt sowohl an Leitungselektronenzustände mit  $\varepsilon \lesssim 1$  als auch an solche knapp oberhalb der Fermienergie. Der erste Schritt zur Lösung dieses Problems besteht in der logarithmischen Diskretisierung des Leitungsbandes (siehe Abb. 7.1). Der Parameter  $\Lambda > 1$  definiert eine Folge



**Abb. 7.1:** Logarithmische Diskretisierung des Leitungsbandes.

von Intervallen  $[\Lambda^{-(n+1)}, \Lambda^{-n}[$  bzw.  $[-\Lambda^{-n}, -\Lambda^{-(n+1)[$  und wird in den numerischen Rechnungen (siehe Kap. 7.2) im Bereich  $2.5 < \Lambda < 3.5$  gewählt. Eine allgemeinere Diskretisierung wurde von Frota und Oliveira [Fro86] vorgeschlagen. Alle Stützpunkte (bis auf die 1) werden mit dem Faktor  $\Lambda^{-z}$  ( $z \in [-0.5, 0.5[$ ) multipliziert, woraus die Intervalle  $[x_{n+1}, x_n[$  bzw.  $[-x_n, -x_{n+1}[$  mit

$$x_n = \begin{cases} 1 & : n = 0 \\ \Lambda^{-(n+z)} & : n \geq 1 \end{cases} \quad (7.3)$$

und der Breite

$$d_n = \begin{cases} 1 - \Lambda^{-(1+z)} & : n = 0 \\ \Lambda^{-(n+z)}(1 - \Lambda^{-1}) & : n \geq 1 \end{cases} \quad (7.4)$$

resultieren.

Innerhalb dieser Intervalle wird jeweils ein vollständiges Orthonormalsystem von Funktionen

$$\psi_{np}^{\pm}(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{d_n}} e^{\pm i\omega_n p \varepsilon} & \text{für } x_{n+1} < \pm \varepsilon < x_n \\ 0 & \text{außerhalb dieses Intervalls} \end{cases} \quad (7.5)$$

definiert. Dabei ist  $p \in \mathbb{Z}$  und  $\omega_n = 2\pi/d_n$  die Grundfrequenz des Intervalls. Die Operatoren  $a_{\varepsilon\sigma}$  und  $a_{\varepsilon\sigma}^{\dagger}$  können nach dieser Basis entwickelt werden:

$$a_{\varepsilon\sigma} = \sum_{np} \left[ a_{np\sigma} \psi_{np}^+(\varepsilon) + b_{np\sigma} \psi_{np}^-(\varepsilon) \right] \quad (7.6)$$

$$a_{np\sigma} = \int_{-1}^1 d\varepsilon [\psi_{np}^+(\varepsilon)]^* a_{\varepsilon\sigma} \quad , \quad b_{np\sigma} = \int_{-1}^1 d\varepsilon [\psi_{np}^-(\varepsilon)]^* a_{\varepsilon\sigma} \quad (7.7)$$

Die dadurch definierten diskreten Operatoren  $a_{np\sigma}$ ,  $a_{np\sigma}^{\dagger}$ ,  $b_{np\sigma}$  und  $b_{np\sigma}^{\dagger}$  erfüllen die Standard-Fermionenvertauschungsbeziehungen. Der Hamiltonoperator (7.2) kann nun durch diese diskreten Operatoren dargestellt werden.

Der freie Leitungselektronenterm erhält die Form

$$\sum_{\sigma} \int_{-1}^1 d\varepsilon \varepsilon a_{\varepsilon\sigma}^{\dagger} a_{\varepsilon\sigma} = \frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1}) \sum_{np\sigma} \eta_n (a_{np\sigma}^{\dagger} a_{np\sigma} - b_{np\sigma}^{\dagger} b_{np\sigma}) + \frac{1 - \Lambda^{-1}}{2\pi i} \sum_{n\sigma} \sum_{p \neq p'} \frac{\mu_n}{p' - p} (a_{np\sigma}^{\dagger} a_{np'\sigma} - b_{np\sigma}^{\dagger} b_{np'\sigma}) \exp \left[ \frac{2\pi i(p' - p)}{1 - \Lambda^{-1}} \right] \quad , \quad (7.8)$$

mit

$$\eta_0 = \frac{1 + \Lambda^{-(1+z)}}{1 + \Lambda^{-1}} \quad , \quad \mu_0 = \frac{1 - \Lambda^{-(1+z)}}{1 - \Lambda^{-1}} \quad , \quad (7.9)$$

und

$$\eta_n = \mu_n = \Lambda^{-(n+z)} \quad \text{für } n \geq 1 \quad . \quad (7.10)$$

Der Hybridisierungsterm transformiert sich folgendermaßen:

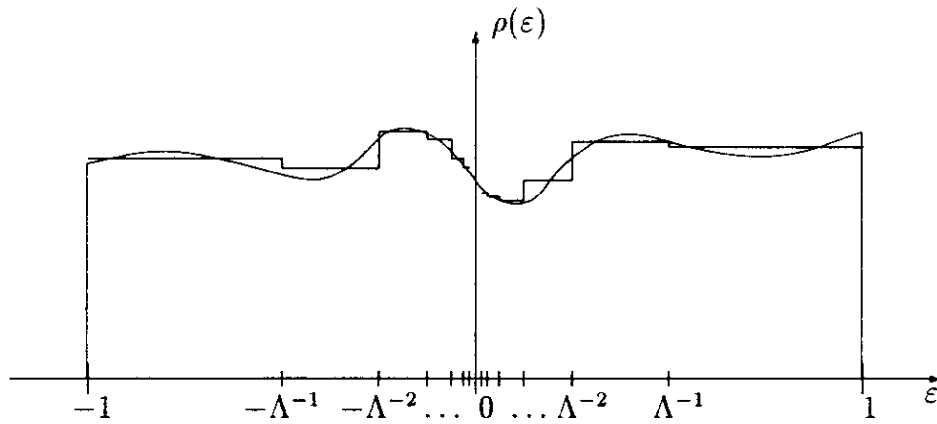
$$\sum_{\sigma} \int_{-1}^1 d\varepsilon \sqrt{\rho(\varepsilon)} V (f_{-1\sigma}^{\dagger} a_{\varepsilon\sigma} + a_{\varepsilon\sigma}^{\dagger} f_{-1\sigma}) = \left( \frac{\xi_0}{\pi} \right)^{1/2} \sum_{\sigma} (f_{0\sigma}^{\dagger} f_{-1\sigma} + f_{-1\sigma}^{\dagger} f_{0\sigma}) \quad (7.11)$$

Dabei gilt

$$f_{0\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\xi_0}} \sum_n [\gamma_n^{\dagger} a_{n0\sigma} + \gamma_n^- b_{n0\sigma}] \quad (7.12)$$

(zur Definition von  $\xi_0$  und  $\gamma_n^{\pm}$  siehe Anhang D). Der Hybridisierungsterm kann also als Kopplung an einen einzigen fermionischen Freiheitsgrad aufgefaßt werden. Jedoch gilt Gl. (7.11) nur in der Näherung eines konstanten  $\rho(\varepsilon)$  innerhalb der einzelnen Intervalle (siehe Abb. 7.2). Je glatter die Funktion  $\rho(\varepsilon)$ , umso besser ist natürlich diese Näherung. Außerdem ist anzunehmen, daß die genauen Details der Zustandsdichte weit weg von der Fermienergie nur einen geringen Einfluß auf das Verhalten der Störstelle ausüben, während die Strukturen nahe der Fermienergie wegen der logarithmischen Diskretisierung ohnehin sehr gut erfaßt werden. Diese Näherung hat auch zur Folge, daß die  $p \neq 0$ -Operatoren nur über den zweiten Term in (7.8) mit den  $p=0$ -Operatoren wechselwirken. Diese Kopplung ist zum einen proportional zu  $(1 - \Lambda^{-1})$ , verschwindet also im Grenzfall  $\Lambda \rightarrow 1$ , zum anderen hat sich nach [Wil75] gezeigt, daß selbst bei  $\Lambda \approx 3$  die störungstheoretische Mitnahme der  $p \neq 0$  Beiträge die Ergebnisse kaum beeinflusst. In guter Näherung können also die  $p \neq 0$ -Terme in (7.11) und der zweite Term in (7.8) vernachlässigt werden. Der resultierende Hamiltonoperator lautet

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\sigma} \varepsilon_f f_{-1\sigma}^{\dagger} f_{-1\sigma} + U f_{-1\uparrow}^{\dagger} f_{-1\downarrow} f_{-1\uparrow}^{\dagger} f_{-1\downarrow} \\ &+ \frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1}) \sum_{\sigma n=0}^{\infty} \eta_n (a_{n\sigma}^{\dagger} a_{n\sigma} - b_{n\sigma}^{\dagger} b_{n\sigma}) \\ &+ \left( \frac{\xi_0}{\pi} \right)^{1/2} \sum_{\sigma} (f_{0\sigma}^{\dagger} f_{-1\sigma} + f_{-1\sigma}^{\dagger} f_{0\sigma}) \end{aligned} \quad (7.13)$$



**Abb. 7.2:** Näherung der Zustandsdichte der Leitungselektronen durch eine Funktion mit konstanten Werten in den Intervallen der logarithmischen Diskretisierung.

und ist — wie im folgenden gezeigt wird — dem Hamiltonoperator einer halbunendlichen Kette äquivalent, in der Hopping nur zwischen nächsten Nachbarn erlaubt ist. Der Index  $p = 0$  der Operatoren  $a_{n0\sigma}$  und  $b_{n0\sigma}$  wird der einfacheren Schreibweise wegen weggelassen.

### Abbildung auf eine halbunendliche Kette

Der letzte Term in (7.13) entspricht schon der Kopplung des  $(-1)$ -ten Glieds der Kette (der Störstelle) an das 0-te Glied. Der freie Elektronenterm soll folgende Gestalt annehmen:

$$\frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1}) \sum_{\sigma n=0}^{\infty} \eta_n (a_{n\sigma}^\dagger a_{n\sigma} - b_{n\sigma}^\dagger b_{n\sigma}) = \sum_{\sigma n=0}^{\infty} \varepsilon_n (f_{n\sigma}^\dagger f_{n+1\sigma} + f_{n+1\sigma}^\dagger f_{n\sigma}) \quad (7.14)$$

Die Operatoren  $a_{n\sigma}$  und  $b_{n\sigma}$  hängen mit den  $f_{n\sigma}$  über eine orthogonale Transformation zusammen:

$$a_{n\sigma} = \sum_{m=0}^{\infty} u_{mn} f_{m\sigma} \quad , \quad b_{n\sigma} = \sum_{m=0}^{\infty} v_{mn} f_{m\sigma} \quad (7.15)$$

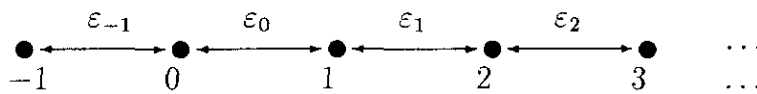
$$f_{n\sigma} = \sum_{m=0}^{\infty} [u_{nm} a_{m\sigma} + v_{nm} b_{m\sigma}] \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.16)$$

In Anhang D wird gezeigt, wie die Koeffizienten  $u_{mn}$  und  $v_{mn}$  sowie die Kopplungen  $\varepsilon_n$  zwischen den  $n$ -ten und  $(n+1)$ -ten Gliedern der Kette bestimmt werden können.

Die Parameter des Störstellen-Anderson-Modells in der Darstellung als halbunendliche Kette (siehe Abb. 7.3) sind somit festgelegt und der Hamiltonoperator lautet

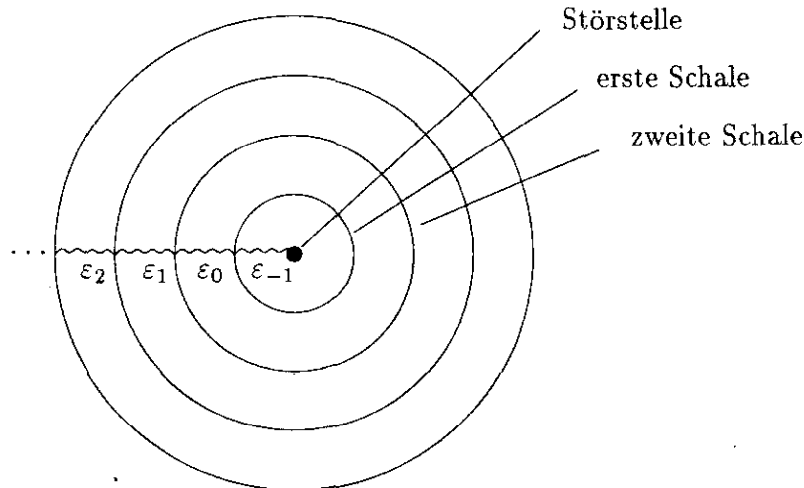
(mit  $\varepsilon_{-1} = \sqrt{\xi_0/\pi}$ ):

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{\sigma} \varepsilon_{\uparrow} f_{-1\sigma}^{\dagger} f_{-1\sigma} + U f_{-1\uparrow}^{\dagger} f_{-1\downarrow} f_{-1\downarrow}^{\dagger} f_{-1\uparrow} \\
 &+ \sum_{\sigma n=-1}^{\infty} \varepsilon_n (f_{n\sigma}^{\dagger} f_{n+1\sigma} + f_{n+1\sigma}^{\dagger} f_{n\sigma})
 \end{aligned}
 \tag{7.17}$$



**Abb. 7.3:** Darstellung des Hamiltonoperators (7.17) als halbindefinite Kette mit Kopplungen nur zwischen benachbarten Gliedern.

In der Literatur wird der Operator  $H$  üblicherweise anhand eines Schalenmodells veranschaulicht (siehe Abb. 7.4), wobei jeweils benachbarte Schalen miteinander koppeln und die Störstelle sich im Zentrum befindet. In der numerischen Auswertung



**Abb. 7.4:** Darstellung des Hamiltonoperators (7.17) als Schalenmodell. Die Wellenlinien deuten die Kopplungen zwischen jeweils benachbarten Schalen an.

können natürlich nur endlich viele Glieder der Kette (bzw. Schalen) berücksichtigt werden. Entscheidend für den Erfolg der Renormierungsgruppentheorie ist die Tatsache, daß die Kopplungen mit zunehmendem Abstand von der Störstelle exponentiell abfallen. Diese Eigenschaft ermöglicht es erst, in guter Näherung die im folgenden beschriebene Iteration nach einer endlichen Anzahl von Schritten abzubrechen.

### Lösung durch iterative Diagonalisierung

Die Gl. (7.17) läßt sich auch als Folge von Hamiltonoperatoren  $H_N$  darstellen, die im Limes  $N \rightarrow \infty$  gegen  $H$  konvergiert:

$$H = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2} (1 + \Lambda^{-1}) \Lambda^{-(N-1)/2} H_N \quad (7.18)$$

mit

$$\begin{aligned} H_N = & \Lambda^{(N-1)/2} \left[ \sum_{\sigma} \tilde{\varepsilon}_f f_{-1\sigma}^{\dagger} f_{-1\sigma} + \tilde{U} f_{-1\uparrow}^{\dagger} f_{-1\uparrow} f_{-1\downarrow}^{\dagger} f_{-1\downarrow} \right. \\ & \left. + \sum_{\sigma n=-1}^{N-1} \tilde{\varepsilon}_n (f_{n\sigma}^{\dagger} f_{n+1\sigma} + f_{n+1\sigma}^{\dagger} f_{n\sigma}) \right] \end{aligned} \quad (7.19)$$

( $\varepsilon_n = \frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1})\tilde{\varepsilon}_n$ ,  $\varepsilon_f = \frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1})\tilde{\varepsilon}_f$ ,  $U = \frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1})\tilde{U}$ ).  $H_N$  beschreibt also eine Kette von  $N + 2$  Gliedern.  $H_{-1}$  entspricht dem Hamiltonoperator der Störstelle ohne Kopplung:

$$H_{-1} = \frac{1}{\Lambda} \left[ \sum_{\sigma} \tilde{\varepsilon}_f f_{-1\sigma}^{\dagger} f_{-1\sigma} + \tilde{U} f_{-1\uparrow}^{\dagger} f_{-1\uparrow} f_{-1\downarrow}^{\dagger} f_{-1\downarrow} \right] \quad (7.20)$$

Wesentlich für die iterative Diagonalisierung ist der Zusammenhang zwischen zwei aufeinanderfolgenden Hamiltonoperatoren:

$$H_{N+1} = \sqrt{\Lambda} H_N + \Lambda^{N/2} \sum_{\sigma} \tilde{\varepsilon}_N (f_{N\sigma}^{\dagger} f_{N+1\sigma} + f_{N+1\sigma}^{\dagger} f_{N\sigma}) \quad (7.21)$$

Wie in Anhang D gezeigt wird, kann durch die Hinzunahme der Kopplung an das jeweils nächste Glied der Kette der Hamiltonoperator  $H_{N+1}$  diagonalisiert werden. Dazu ist lediglich die Kenntnis der Eigenenergien und Eigenzustände zu  $H_N$  sowie der Matrixelemente  $\langle i | f_N^{\dagger} | j \rangle$  notwendig.

Da die  $H_N$  mit der Gesamtteilchenzahl  $\hat{Z}$ , dem Gesamtspin  $\hat{S}$  und dessen  $z$ -Komponente  $\hat{S}_z$  vertauschen, ist eine Klassifizierung der Eigenzustände nach den Quantenzahlen  $Q, S$  und  $S_z$  zweckmäßig. Analog zu [Kri80] wird auch hier statt der Gesamtteilchenzahl  $Z$ , die Differenz der Teilchenzahl zur Halbfüllung  $Q = Z - (N + 2)$  verwendet.

Die Eigenzustände zu  $H_{-1}$  haben in der Darstellung  $|Q, S, S_z\rangle_N$  die Form

$$\begin{aligned} |-1, 0, 0\rangle_{-1} &= |0\rangle \\ |0, 1/2, \sigma\rangle_{-1} &= f_{-1\sigma}^{\dagger} |0\rangle \\ |1, 0, 0\rangle_{-1} &= f_{-1\uparrow}^{\dagger} f_{-1\downarrow}^{\dagger} |0\rangle \end{aligned} \quad (7.22)$$

mit den von  $S_z$  unabhängigen Eigenenergien  $E_N(Q, S)$

$$\begin{aligned} E_{-1}(-1, 0) &= 0 \\ E_{-1}(0, 1/2) &= \frac{1}{\Lambda} \tilde{\epsilon}_f \\ E_{-1}(1, 0) &= \frac{1}{\Lambda} (2\tilde{\epsilon}_f + \tilde{U}) \end{aligned} \quad (7.23)$$

Nach dem  $(N+1)$ -ten Iterationsschritt sei nun die Schrödingergleichung

$$H_N |Q, S, S_z, r\rangle_N = E_N(Q, S, r) |Q, S, S_z, r\rangle_N \quad (7.24)$$

gelöst. Die Quantenzahl  $r$  zählt die Zustände im Unterraum  $(Q, S, S_z)$ . Wie in Anhang D beschrieben wird, läßt sich eine Basis für den Hilbertraum  $H_{N+1}$  konstruieren, die aus Eigenzuständen zu  $\hat{Q}$ ,  $\hat{S}$  und  $\hat{S}_z$  besteht. Um  $H_{N+1}$  zu diagonalisieren, müssen die Matrixelemente

$$H(r_i, r'_j) = {}_{N+1} \langle Q, S, S_z, r_i | H_{N+1} | Q, S, S_z, r'_j \rangle_{N+1} \quad (7.25)$$

in dieser neuen Basis berechnet werden. Es zeigt sich, daß dazu die Kenntnis der Eigenenergien  $E_N(Q, S, r)$  und der reduzierten Matrixelemente

${}_N \langle Q, S, r | f_N^\dagger | Q, S, r' \rangle_N$  ausreichend ist. Die Diagonalisierung liefert die Eigenenergien  $E_{N+1}(Q, S, r)$  und orthogonale Matrizen, aus denen die für den nächsten Iterationsschritt notwendigen Matrixelemente berechnet werden können.

## 7.2 Berechnung der Spektralfunktion

In jedem Schritt der Iteration läßt sich mit der Gleichung

$$A_N(\omega) = A_N^+(\omega) + A_N^-(\omega) \quad (7.26)$$

$$A_N^+(\omega) = \frac{1}{2S_g + 1} \sum_{aS_zg} \left| \langle a | f_{-1\sigma}^\dagger | g \rangle_N \right|^2 \delta(\omega - (E_{aN} - E_{gN})) \quad (7.27)$$

$$A_N^-(\omega) = \frac{1}{2S_g + 1} \sum_{aS_zg} \left| \langle g | f_{-1\sigma}^\dagger | a \rangle_N \right|^2 \delta(\omega - (E_{gN} - E_{aN})) \quad (7.28)$$

die f-Spektralfunktion für die Temperatur  $T = 0$  berechnen.  $A_N^+(\omega)$  enthält dabei nur Beiträge bei positiven Frequenzen,  $A_N^-(\omega)$  nur bei negativen Frequenzen.  $|g\rangle_N = |Q_g, S_g, S_{zg}, r_g\rangle_N$  bezeichnet den Grundzustand mit der Grundzustandsenergie  $E_{gN} = E_N(Q_g, S_g, r_g)$ . Die Summe erstreckt sich über alle angeregten Zustände



$|a\rangle_N = |Q, S, S_z, r\rangle_N$ , deren Eigenenergien  $E_N(Q, S, r)$  mit  $E_{aN}$  abgekürzt werden. Die Summe über  $S_{zg}$  berücksichtigt die mögliche Spin-Entartung des Grundzustands.

Die Berechnung der Spektralfunktion erfordert also die Kenntnis der Matrixelemente  ${}_N\langle i|f_{-1\sigma}^\dagger|j\rangle_N$ . In Anhang D wird gezeigt, wie die reduzierten Matrixelemente  ${}_N\langle i|f_{-1}^\dagger|j\rangle_N$  mit denen des vorherigen Iterationsschritts und den zur Diagonalisierung von  $H(r_i, r'_j)$  notwendigen orthogonalen Matrizen zusammenhängen.

Unter Zuhilfenahme des Wigner-Eckart-Theorems kann die Summe  $\sum_{S_z S_{zg}}$  in (7.27/28) ausgeführt werden. Wegen  $Q = Q_g \pm 1$  in  $A^\pm(\omega)$  und  $S = S_g \pm 1/2$  ergibt sich dann folgende Vereinfachung:

$$\begin{aligned} A_N^+(\omega) &= (S_g + 1) \sum_r \left\{ \left| {}_N\langle Q_g + 1, S_g + 1/2, r | f_{-1}^\dagger | Q_g, S_g, r_g \rangle_N \right|^2 \right. \\ &\quad \cdot \delta(\omega - (E_N(Q_g + 1, S_g + 1/2, r) - E_{gN})) \\ &\quad + S_g \left| {}_N\langle Q_g + 1, S_g - 1/2, r | f_{-1}^\dagger | Q_g, S_g, r_g \rangle_N \right|^2 \\ &\quad \left. \cdot \delta(\omega - (E_N(Q_g + 1, S_g - 1/2, r) - E_{gN})) \right\} \end{aligned} \quad (7.29)$$

$$\begin{aligned} A_N^-(\omega) &= \frac{1}{2}(2S_g + 1) \sum_r \left\{ \left| {}_N\langle Q_g, S_g, r_g | f_{-1}^\dagger | Q_g - 1, S_g + 1/2, r \rangle_N \right|^2 \right. \\ &\quad \cdot \delta(\omega - (E_{gN} - E_N(Q_g - 1, S_g + 1/2, r))) \\ &\quad + \left| {}_N\langle Q_g, S_g, r_g | f_{-1}^\dagger | Q_g - 1, S_g - 1/2, r \rangle_N \right|^2 \\ &\quad \left. \cdot \delta(\omega - (E_{gN} - E_N(Q_g - 1, S_g - 1/2, r))) \right\} \end{aligned} \quad (7.30)$$

Bei der Berechnung der f-Spektralfunktion des Störstellen-Anderson-Modells treten allerdings folgende Schwierigkeiten auf:

- Die im Laufe der Iteration exponentiell anwachsende Zahl von Zuständen verhindert es, alle Zustände mitzunehmen. Da nur die jeweils ca. 300 bis 500 energetisch niedrigsten Zustände berücksichtigt werden können, ist die Aussagefähigkeit von Gl. (7.29/30) nur auf den niederenergetischen Teil des eigentlichen Spektrums beschränkt.
- Die logarithmische Diskretisierung des Leitungsbandes hat eine Spektralfunktion zur Folge, die aus einer Summe aus  $\delta$ -Funktionen besteht. Der Limes  $\Lambda \rightarrow 1$ , in dem die in Kap. 7.1 beschriebene Näherung exakt wird, würde das diskre-

te Spektrum zwar wieder in ein kontinuierliches überführen, doch kann dieser Grenzübergang numerisch nicht durchgeführt werden.

Das erste Problem wird folgendermaßen gelöst. Zunächst ist in den ersten Iterationen die Summenregel für die Spektralfunktion  $\int d\omega A(\omega) = 1$  noch erfüllt. Sobald die Einschränkung auf die jeweils niedrigsten Zustände vorgenommen werden muß, verringert sich die Bandbreite der Anregungsenergien pro Iteration um ca. den Faktor  $\Lambda^{-1/2}$ . Daraus folgt, daß auch die Spektralfunktion nur in einem um den Faktor  $\Lambda^{-1/2}$  kleineren Bereich berechnet werden kann. Die Summenregel kann nur dann erfüllt werden, wenn die Informationen zu höheren Anregungsenergien der vorherigen Iteration entnommen wird.

Für die Lösung des zweiten Problems existieren in der Literatur bereits einige Vorschläge. In [Fro86] ergibt die Mittelung der diskreten Spektralfunktionen über den Parameter  $z$  im Bereich  $-0.5 \leq z < 0.5$  eine kontinuierliche Spektralfunktion. Wie durch eine gaussische Verbreiterung der  $\delta$ -Funktionen auf einer logarithmischen Energieskala eine kontinuierliche Spektralfunktion erhalten werden kann, wird in [Sak89] gezeigt. Es ist jedoch von vornherein nicht eindeutig, wie diese Breite bestimmt werden soll. In [Cos92, Cos93, Cos93a] wurde die gaussische Verbreiterung direkt auf der Energieskala durchgeführt. Die Breite wurde zwar proportional zu  $\Lambda^{-n/2}$  gewählt, doch wurde der Proportionalitätsfaktor bei jeder Iteration so angepaßt, daß sich für die Spektralfunktion eine glatte Kurve ergab.

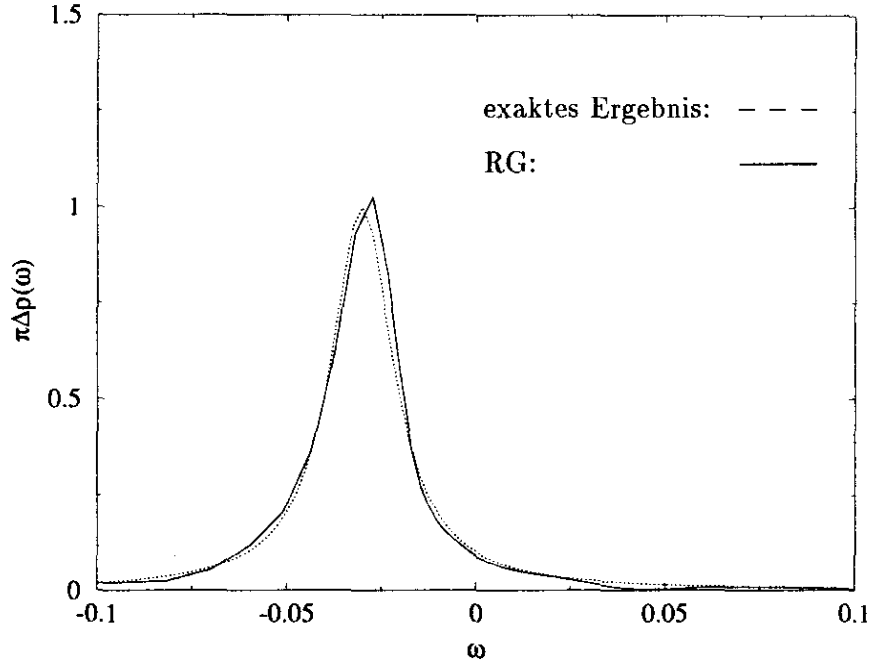
Hier wird der folgende Weg beschritten. Zunächst wird für ca. 20  $z$ -Werte die Spektralfunktion  $A_{Nz}(\omega)$  bestimmt. Die aufintegrierten Spektralfunktionen

$$I_{Nz}(\omega) = \int_{-\infty}^{\omega} d\omega' A_{Nz}(\omega') \quad (7.31)$$

werden über den Parameter  $z$  gemittelt. Die resultierende Treppenfunktion  $I_N(\omega)$  wird mit Hilfe eines Spline-Fits geglättet. Die numerische Differentiation von  $I_N(\omega)$  ergibt die gesuchte Spektralfunktion  $A_N(\omega)$ .

## Ergebnisse

Die folgenden Resultate wurden alle bei einer konstanten Zustandsdichte der Leitungselektronen und den Parametern  $\varepsilon_f = -0.03$  und  $\Delta = 0.01$  durchgeführt. Als Test für das gerade beschriebene Verfahren ist in Abb. 7.5 die numerisch berechnete Spektralfunktion für  $U = 0$  dem exakten (analytisch berechneten) Resultat gegenübergestellt: es ergibt sich eine recht gute Übereinstimmung.



**Abb. 7.5:** Vergleich der Spektralfunktion aus der Renormierungsgruppentheorie (RG) mit dem exakten Ergebnis für  $U = 0$ .

In Abb. 7.6 und 7.7 sind die Ergebnisse für einen endlichen Wert der Coulombwechselwirkung gezeigt. Die Punkte entsprechen den durch direkte Differentiation der Treppenfunktion  $I_N(\omega)$  erhaltenen Werten und sind zur Kontrolle zusammen mit den kontinuierlichen Spektralfunktionen aufgetragen. Der Ausschnitt rechts oben zeigt jeweils eine Vergrößerung des Bereichs um  $\omega = 0$ . Sowohl der symmetrische ( $\varepsilon_f + U = -\varepsilon_f$ ) als auch der unsymmetrische Parametersatz ( $U = 0.1$ ) liegen im Kondo-Regime des Störstellen-Anderson-Modells und in beiden Fällen ist die Abrikosov-Suhl-Resonanz deutlich ausgeprägt. Der Wert der Spektralfunktion bei  $\omega = 0$  erfüllt sehr gut die Friedelsche Summenregel

$$A(\omega = 0) = \frac{1}{\pi\Delta} \sin^2(\pi n_{f\sigma}) \quad . \quad (7.32)$$

Im symmetrischen Fall ergibt (7.32) wegen  $n_{f\sigma} = 1/2$  für  $\pi\Delta A(\omega = 0)$  exakt den Wert 1.

Auch für sehr hohe Werte der Coulombwechselwirkung ist das hier entwickelte Verfahren anwendbar. Abb. 7.8 enthält die Spektralfunktion für  $U = 10$  (die Resonanz bei  $\varepsilon_f + U$  ist nicht mehr in dem gezeigten Ausschnitt enthalten).

Leider brachte die Methode der Aufintegration, Glättung und anschließenden Differentiation des diskreten Spektrums bislang noch keine zuverlässigen Resultate für

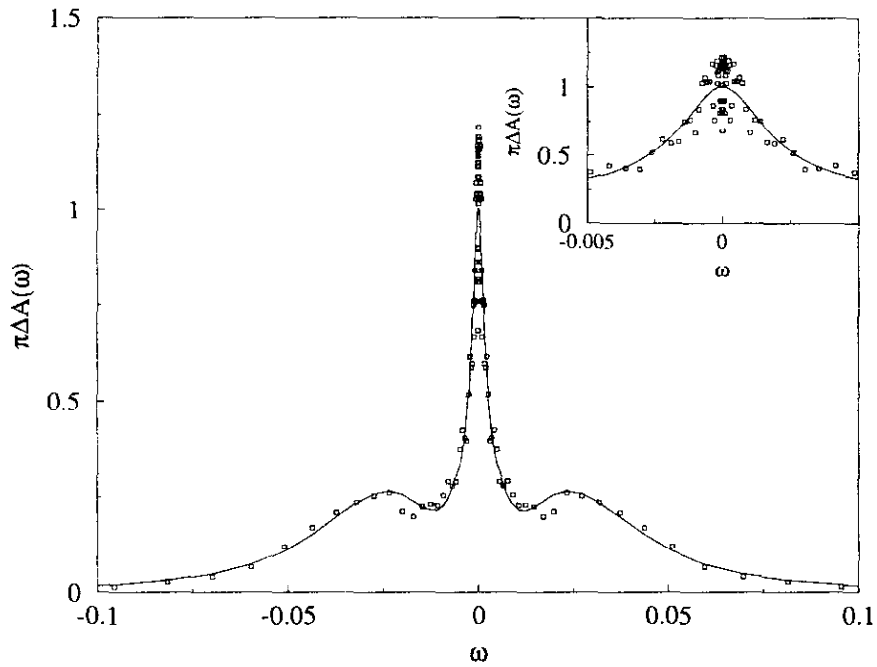


Abb. 7.6: Ergebnis der Renormierungsgruppentheorie für die Spektralfunktion im symmetrischen Fall  $\varepsilon_f + U = -\varepsilon_f$ .

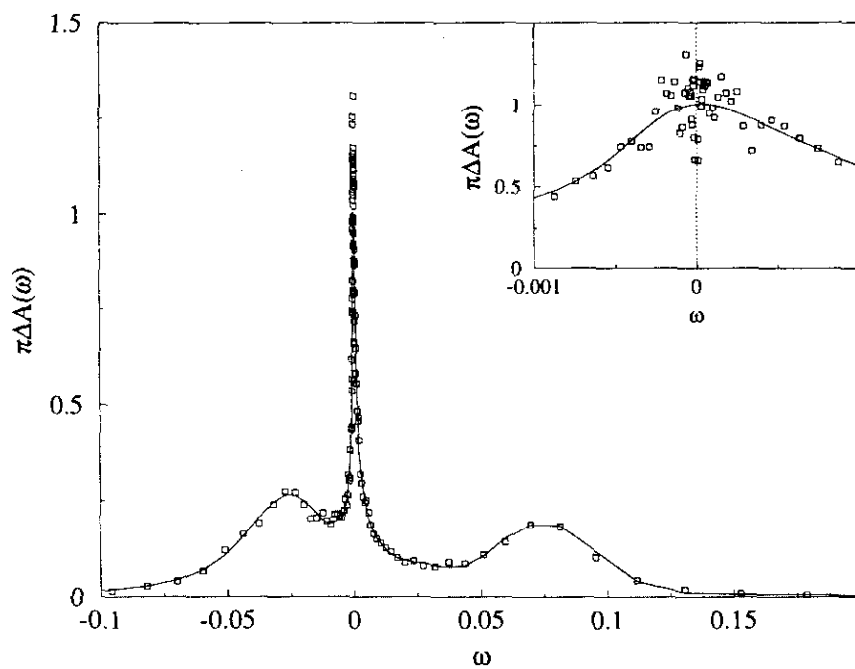
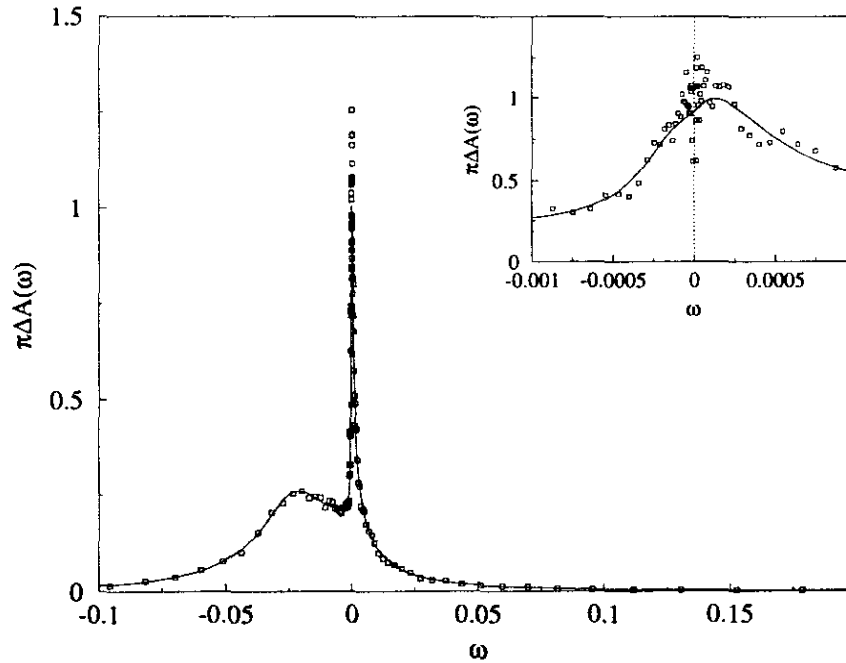


Abb. 7.7: Ergebnis der Renormierungsgruppentheorie für die Spektralfunktion ( $U = 0.1$ ).



**Abb. 7.8:** Ergebnis der Renormierungsgruppentheorie für die Spektralfunktion ( $U = 10$ ).

den Fall einer gausschen Zustandsdichte für die Leitungselektronen, wie sie bei der Untersuchung des  $d = \infty$ -Hubbard-Modells auftritt. Die resultierenden Spektralfunktionen zeigen zusätzliche Oszillationen die als Artefakte der logarithmischen Diskretisierung zu betrachten sind. Hier sind weitere Untersuchungen notwendig, bevor die berechneten Spektralfunktionen zur Lösung von Gittermodellen in der Näherung einer rein lokalen Selbstenergie verwendet werden können.

## 8 Zusammenfassung, Diskussion und Ausblick

In dieser Arbeit wurde zum ersten Mal eine Funktionalintegralmethode auf das Störstellen-Anderson-Modell angewendet, die exakt den Limes unendlich hoher lokaler Coulombabstoßung berücksichtigt. Durch Ausintegration der unendlich vielen Freiheitsgrade der Leitungselektronen gelang es, eine effektive Wirkung für das lokalisierte Niveau herzuleiten. Diese effektive Wirkung bildete den Ausgangspunkt für die numerische Berechnung der thermodynamischen Green-Funktion  $G(\tau)$ , aus der die Besetzungszahl und die magnetische Suszeptibilität der Störstelle bestimmt werden konnten. Das daraus resultierende effektive magnetische Moment zeigte die erwartete Temperaturabhängigkeit: für hinreichend große Hybridisierung und kleine Temperaturen wird dieses Moment durch die Leitungselektronen abgeschirmt. Die numerische Auswertung war jedoch immer auf einen Bereich  $k_{\text{B}}T \lesssim V$  beschränkt.

Es wurde ausführlich das Problem diskutiert, wie aus den  $G(\tau)$ -Daten die f-Spektralfunktion  $A(\omega)$ , die dem Beitrag des lokalisierten Niveaus zur Zustandsdichte des gesamten Elektronensystems entspricht, erhalten werden kann. Dabei zeigte es sich, daß es oft viele verschiedene Spektralfunktionen gibt, die die  $G(\tau)$ -Daten mit nur sehr geringen Abweichungen anfitzen. Für den Fall, daß das f-Niveau genau an der Fermikante liegt, gelang es dennoch, eindeutige Spektralfunktionen zu berechnen. Mit zunehmender Hybridisierung verbreitert sich dabei die Resonanz am f-Niveau und verschiebt sich zu höheren Energien.

Der Vergleich der Ergebnisse mit Rechnungen innerhalb einer Non-crossing-Approximation brachte nur geringe Abweichungen, die zum Teil auf die numerisch bedingte, endliche Zahl an Zeitschritten zurückzuführen sind.

Außerdem wurde in dieser Arbeit das von Wilson [Wil75] und Krishna-murthy et al. [Kri80] zur Untersuchung des Störstellen-Anderson-Modells entwickelte Renormierungsgruppenverfahren auf eine energieabhängige Kopplung der Störstelle an die

---

Leitungselektronen verallgemeinert. Der Hamiltonoperator konnte auf eine Darstellung als halbunendliche Kette transformiert werden, deren iterative Diagonalisierung numerisch durchgeführt wurde. Daraufhin wurde ein Verfahren vorgestellt, aus den diskreten Spektren kontinuierliche Spektralfunktionen zu berechnen. Die Auswertung geschah bei  $T = 0$  und soll in Zukunft auf endliche Temperaturen übertragen werden. Für  $U = 0$  und konstante Kopplung an die Leitungselektronen stimmen die Spektralfunktionen gut mit dem analytisch bekannten Resultat überein, und für eine endliche Coulombwechselwirkung ist die Friedelsche Summenregel nahezu perfekt erfüllt. Im Falle einer nichtkonstanten Kopplung konnte die Spektralfunktion jedoch noch nicht auf zufriedenstellende Weise aus den diskreten Spektren berechnet werden — hier sind erst genauere Untersuchungen notwendig.

Die hier beschriebene Funktionalintegralmethode bietet Ansatzpunkte für eine Reihe weiterführender Arbeiten. Von großem Vorteil wäre es, wenn das Funktionalintegral mit Hilfe eines Monte-Carlo-Verfahrens ausgewertet werden könnte. Dies würde die Grenze der erreichbaren Temperaturen deutlich erniedrigen. Dazu müßten andere Darstellungen für die  $b$ -Felder untersucht werden, eventuell auch solche, in denen ein  $b$ -Feld durch mehr als nur zwei Einstellungen eines diskreten Feldes ersetzt wird.

Das Funktionalintegralkonzept kann leicht auf andere Modelle stark korrelierter Elektronensysteme übertragen werden. Zwar wird in Gittermodellen der numerische Aufwand gegenüber dem Störstellenmodell beträchtlich zunehmen, doch könnten dort analytische Näherungsverfahren erfolgreich sein.

Eine kleine Modifikation im Funktionalintegral (siehe [Wel90]) bietet außerdem die Möglichkeit, neben der Doppelbesetzung auch die Nicht-Besetzung des  $f$ -Niveaus auszuschließen, wodurch Spinmodelle der Methode zugänglich werden.

Ein wichtiger Vorzug, den alle Funktionalintegralmethoden gemeinsam haben, besteht darin, daß sie in eleganter Weise die Durchführung von Transformationen des betrachteten Systems erlauben. Dies wurde in dieser Arbeit bereits verwendet, um die Äquivalenz des Störstellen-Anderson-Modells (2.1) mit dem Ausgangs-Hamiltonoperator für die Renormierungsgruppentheorie zu beweisen. Nach einer Idee von Förster und Schopohl [För93] sollte es sogar möglich sein, mit Hilfe der Funktionalintegraltechnik die Darstellung des Störstellen-Anderson-Modells als halbunendliche Kette auf einem direkteren Weg herzuleiten, auch unter Berücksichtigung der energieabhängigen Kopplung zwischen  $f$ -Elektron und Leitungsband.

Die Tatsache, daß mit der hier beschriebenen Renormierungsgruppentheorie dynami-

sche Eigenschaften des Störstellen-Anderson-Modells berechnet werden können, soll in Zukunft für die Untersuchung von Gittermodellen in der Näherung einer rein lokalen Selbstenergie ausgenützt werden. Speziell für das periodische Anderson-Modell haben die Grenzen der bisher verwendeten Lösungsverfahren (die Non-crossing-Approximation und Quanten-Monte-Carlo-Verfahren) eine konsistente Beschreibung noch nicht ermöglicht. Hier wird von der Renormierungsgruppentheorie ein entscheidender Fortschritt erwartet.

Von großer Bedeutung wären auch Untersuchungen, das Konzept dieser Näherung, die im Limes  $d \rightarrow \infty$  exakt wird, im Sinne einer  $1/d$ -Entwicklung zu erweitern. Inwieweit auch bei einer solchen Erweiterung die in dieser Arbeit entwickelten Methoden von Nutzen sein werden, werden die zukünftigen Untersuchungen zeigen.



## A Thermodynamische Green-Funktion und Spektralfunktion

Dieser Anhang beinhaltet die Definitionen der hier verwendeten Green-Funktionen und der Spektralfunktion. Außerdem werden zahlreiche Eigenschaften dieser Größen diskutiert, sowie die für Kap. 5.3 wesentliche Gleichung (5.34) bewiesen.

### Thermodynamische Green-Funktion

Sie ist definiert als

$$G(\tau) = -\langle \mathcal{T} A[\tau] B \rangle = \begin{cases} -\langle A[\tau] B \rangle & : 0 \leq \tau < \beta \\ +\langle B A[\tau] \rangle & : -\beta \leq \tau < 0 \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

mit

$$A[\tau] = e^{\tau H} A e^{-\tau H} \quad (\text{A.2})$$

Der Erwartungswert hat folgende Bedeutung:

$$\langle X \rangle = \frac{1}{Z} \text{Sp} [e^{-\beta H} X] \quad (\text{A.3})$$

mit der Zustandssumme  $Z = \text{Sp} [e^{-\beta H}]$  und  $\beta = 1/k_{\text{B}}T$ . In Kap. 5.2 genügte es,  $G(\tau)$  nur im Intervall  $[0, \beta[$  zu berechnen, denn für  $-\beta \leq \tau < 0$  gilt:

$$G(\tau) = -G(\tau + \beta) \quad (\text{A.4})$$

Die in der gesamten Arbeit verwendete Schreibweise  $G(\beta)$  ist als Abkürzung für  $G(\tau \rightarrow \beta^-)$  zu verstehen.

### Spektralfunktion

Zunächst seien die Korrelationsfunktionen

$$C^>(t) = \langle A(t) B \rangle \quad (\text{A.5})$$

$$C^<(t) = \langle B A(t) \rangle \quad (\text{A.6})$$

( $A(t) = \exp(iHt)A \exp(-iHt)$ ,  $t \in \mathbb{C}$ ) definiert. Aus ihnen setzt sich die Antwortfunktion

$$X(t) = i\Theta(t)[C^{>}(t) + C^{<}(t)] \quad (\text{A.7})$$

zusammen. Ihre Laplacetransformierte

$$X(z) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{izt} X(t) = \int_0^{\infty} dt e^{izt} X(t) \quad (\text{A.8})$$

( $\text{Im}z > 0$ ) ist analytisch auf der gesamten oberen Halbebene. Der Imaginärteil knapp oberhalb der reellen Achse ergibt die Spektralfunktion:

$$A(\omega) = \frac{1}{\pi} \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \text{Im}X(\omega + i\delta) \quad (\text{A.9})$$

### Zusammenhang: thermodynamische Green-Funktion — Spektralfunktion

Ganz offensichtlich ist  $G(\tau)$  für  $\tau \in [0, \beta[$  identisch mit der Korrelationsfunktion  $C^{>}(t)$  für das rein imaginäre Argument  $t = -i\tau$ :

$$-G(\tau) = C^{>}(t)|_{t=-i\tau} \quad \tau \in [0, \beta[ \quad (\text{A.10})$$

Die Fouriertransformierten von  $C^{><}(t)$  sind durch

$$C^{><}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} C^{><}(t) \quad (\text{A.11})$$

$$C^{><}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} C^{><}(\omega) \quad (\text{A.12})$$

definiert. Aus der Definition der Korrelationsfunktionen ergibt sich  $\text{Im}C^{><}(\omega) = 0$  für  $\omega \in \mathbb{R}$ . Außerdem gilt folgender Zusammenhang:

$$C^{<}(t) = C^{>}(t') \quad \text{mit} \quad it' = it + \beta \quad (\text{A.13})$$

Daraus folgt:

$$C^{<}(\omega) = e^{-\beta\omega} C^{>}(\omega) \quad (\text{A.14})$$

Insbesondere gilt:

$$C^{>}(\omega) = \frac{1}{1 + e^{-\beta\omega}} [C^{>}(\omega) + C^{<}(\omega)] \quad (\text{A.15})$$

Gl. (A.10) lautet also:

$$-G(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-r\omega}}{1 + e^{-\beta\omega}} [C^{>}(\omega) + C^{<}(\omega)] \quad (\text{A.16})$$

Wegen

$$\begin{aligned}
 X(z) &= i \int_0^\infty dt e^{izt} [C^>(t) + C^<(t)] \\
 &= i \int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega'}{2\pi} \int_0^\infty dt e^{i(z-\omega')t} [C^>(\omega') + C^<(\omega')] \\
 &= -i \int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{1}{z - \omega'} [C^>(\omega') + C^<(\omega')] \quad (\text{A.17})
 \end{aligned}$$

läßt sich die Spektralfunktion als Summe der Korrelationsfunktionen  $C^>$  und  $C^<$  darstellen.

$$\begin{aligned}
 \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \text{Im} X(z = \omega + i\delta) &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^\infty d\omega' \delta(\omega - \omega') [C^>(\omega') + C^<(\omega')] \\
 &= \frac{1}{2} [C^>(\omega) + C^<(\omega)] = A(\omega)\pi \quad (\text{A.18})
 \end{aligned}$$

Mit (A.16) folgt daraus der Zusammenhang zwischen thermodynamischer Green-Funktion und Spektralfunktion:

$$-G(\tau) = \int_{-\infty}^\infty d\omega \frac{e^{-\tau\omega}}{1 + e^{-\beta\omega}} A(\omega) \quad (0 \leq \tau < \beta) \quad (\text{A.19})$$

Aus dieser Gleichung folgen sofort einige Eigenschaften für  $G(\tau)$ , wenn vorausgesetzt wird, daß  $A(\omega) \geq 0$  für jedes  $\omega \in \mathbb{R}$ :

- Sowohl  $-G(\tau)$  als auch ihre zweite Ableitung sind positiv im Intervall  $[0, \beta[$ .
- Für eine symmetrische Spektralfunktion ( $A(\omega) = A(-\omega)$ ) gilt  $G(\tau) = G(\beta - \tau)$ .
- Es gilt die Summenregel:

$$-G(0) - G(\beta) = \int_{-\infty}^\infty d\omega A(\omega) \quad (\text{A.20})$$

### Zusammenhang der Green-Funktionen mit den Besetzungszahlen

Aus der Definition (A.1) folgt für  $A = f_\sigma, B = f_\sigma^\dagger$ :

$$-G(0) = \langle f_\sigma f_\sigma^\dagger \rangle \quad (\text{A.21})$$

$$-G(\beta) = \langle f_\sigma^\dagger f_\sigma \rangle \quad (\text{A.22})$$

Speziell gilt für den Erwartungswert des Antikommutators der fermionischen Operatoren  $f_\sigma$  und  $f_\sigma^\dagger$ :

$$1 = \langle [f_\sigma, f_\sigma^\dagger]_+ \rangle = -G(0) - G(\beta) \quad (\text{A.23})$$

Der Antikommutator der Hubbard-Operatoren  $A = X_{0\sigma}$  und  $B = X_{\sigma 0}$  führt nur auf das rechte Gleichheitszeichen:

$$\langle [X_{0\sigma}, X_{\sigma 0}]_+ \rangle = -G(0) - G(\beta) \quad (\text{A.24})$$

Der Zusammenhang mit den Besetzungszahlen ergibt sich aus:

$$\begin{aligned} \langle f_\sigma f_\sigma^\dagger \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Sp} [e^{-\beta H} f_\sigma f_\sigma^\dagger] \\ &= \frac{1}{Z} [\langle 0 | e^{-\beta H} f_\sigma f_\sigma^\dagger | 0 \rangle + \langle \uparrow | e^{-\beta H} f_\sigma f_\sigma^\dagger | \uparrow \rangle \\ &\quad + \langle \downarrow | e^{-\beta H} f_\sigma f_\sigma^\dagger | \downarrow \rangle + \langle 2 | e^{-\beta H} f_\sigma f_\sigma^\dagger | 2 \rangle] \\ &= n_0 + n_{-\sigma} \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

$$\langle f_\sigma^\dagger f_\sigma \rangle = n_\sigma + n_2 \quad (\text{A.26})$$

Für Erwartungswerte der Hubbard-Operatoren  $X_{0\sigma}$  und  $X_{\sigma 0}$  verschwindet nicht nur  $n_2$  in (A.26) sondern — wegen  $X_{\sigma 0} | -\sigma \rangle = 0$  — auch der Term  $n_{-\sigma}$  in (A.25).

$$-G(0) = \langle X_{0\sigma} X_{\sigma 0} \rangle = n_0 \quad (\text{A.27})$$

$$-G(\beta) = \langle X_{\sigma 0} X_{0\sigma} \rangle = n_\sigma \quad (\text{A.28})$$

### Summenregeln

a)  $U < \infty$  — fermionische Operatoren

Die Spektralfunktion ist wegen (A.20) und (A.23) auf 1 normiert:

$$1 = -G(0) - G(\beta) = \int d\omega A(\omega) \quad (\text{A.29})$$

b)  $U = \infty$  — Hubbard-Operatoren

Hier gilt  $n_0 + n_\sigma + n_{-\sigma} = 1$ . Mit

$$-G(\beta) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega) A(\omega) \quad (\text{A.30})$$

und  $n_\sigma = n_{-\sigma}$  folgt:

$$1 = -G(0) - 2G(\beta) = \int d\omega (1 + f(\omega)) A(\omega) \quad (\text{A.31})$$

Die Normierung der Spektralfunktion ergibt sich aus (A.20).

### (Diskrete) Fouriertransformierte von $G(\tau)$

Die Fouriertransformierte von  $G(\tau)$  ist definiert als:

$$G(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} G(\tau) \quad , \quad i\omega_n = i\frac{\pi}{\beta}(2n+1) \quad , \quad n \in \mathbb{Z} \quad (\text{A.32})$$

Ist  $G(\tau)$  jedoch nur an  $N$  Punkten  $\tau_l = (l-1)\beta/N$  ( $l = 1, \dots, N$ ) bekannt, so muß eine diskrete Fouriertransformierte definiert werden:

$$G_N(i\omega_n) = \frac{\beta}{N} \sum_{l=1}^N e^{i\omega_n \tau_l} G(\tau_l) \quad (\text{A.33})$$

Der Zusammenhang von  $G(i\omega_n)$  und  $G_N(i\omega_n)$  mit der Spektralfunktion läßt sich durch (diskrete) Fouriertransformation der Gl. (A.19) berechnen. Es ergibt sich:

$$G(i\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{i\omega_n - \omega} A(\omega) \quad (\text{A.34})$$

$$G_N(i\omega_n) = \frac{\beta}{N} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{\exp\left[(i\omega_n - \omega)\frac{\beta}{N}\right] - 1} A(\omega) \quad (\text{A.35})$$

Die Spektralfunktion hängt außerdem durch eine analytische Fortsetzung mit der Größe  $G(i\omega_n)$  zusammen, denn es gilt:

$$G(i\omega_n) = X(z = i\omega_n) \quad (\text{A.36})$$

Mit Gl. (A.9) kann damit  $A(\omega)$  bestimmt werden. Die Anwendung der analytischen Fortsetzung auf  $G_N(i\omega_n)$  liefert jedoch eine Spektralfunktion, die erst im Limes  $N \rightarrow \infty$  mit der gesuchten übereinstimmt.

## B Rechenregeln für Grassmann-Variable

Der folgende Anhang beinhaltet die in dieser Arbeit verwendeten Rechenregeln zum Umgang mit Grassmann-Variablen. Diese Darstellung ist insofern notwendig, als die in der Literatur zu findenden Definitionen nicht immer einheitlich sind. (Für eine Zusammenstellung der Rechenregeln siehe auch [Neg88, Pop83]; eine ausführliche Diskussion der Eigenschaften der Grassmann-Algebra ist in [Ber66] enthalten; die Originalarbeit von H. Grassmann ist in [Gra94] zu finden)

### Definition einer endlich-dimensionalen Grassmann-Algebra

Eine Algebra, deren Generatoren  $x_1, \dots, x_n$  die Bedingungen

$$x_i x_k + x_k x_i = [x_i, x_k]_+ = 0 \quad , \quad i, k = 1, \dots, n \quad (\text{B.1})$$

erfüllen, wird als Grassmann-Algebra mit  $n$  Generatoren bezeichnet. Insbesondere folgt aus dieser Definition:

$$x_i^2 = 0 \quad (\text{B.2})$$

In Kap. 4 bis 6 stellen die Grassmann-Variablen  $\psi_1, \dots, \psi_N, \psi_1^\dagger, \dots, \psi_N^\dagger$  die Generatoren der Grassmann-Algebra dar. Also gilt

$$[\psi_i^\dagger, \psi_i]_+ = 0 \quad , \quad (\text{B.3})$$

im Gegensatz zu der Antikommutatorrelation  $[f^\dagger, f]_+ = 1$  für die (den  $\psi$  und  $\psi^\dagger$  entsprechenden) Fermionenoperatoren  $f$  und  $f^\dagger$ . Die  $\psi$  und  $\psi^\dagger$  sind also völlig unabhängige Grassmann-Felder.

### Integration auf einer Grassmann-Algebra

Zunächst müssen die Symbole  $dx_1, \dots, dx_n$  eingeführt werden, die den Vertauschungsrelationen

$$[dx_i, dx_k]_+ = 0 \quad , \quad [x_i, dx_k]_+ = 0 \quad (\text{B.4})$$

genügen. Zwei Integrationsregeln werden definiert:

$$\int dx_i = 0 \quad , \quad \int dx_i x_i = 1 \quad (\text{B.5})$$

Vielfachintegrationen werden dadurch ausgewertet, daß die Grassmann-Variablen auf die umgekehrte Reihenfolge der Symbole  $dx_a, \dots, dx_j$  sortiert werden. Dann gilt:

$$\int dx_a dx_b \dots dx_i dx_j x_j x_i \dots x_b x_a = 1 \quad (\text{B.6})$$

Besonders wichtig sind Integrale über Exponentiale von grassmannwertigen Ausdrücken, wie zum Beispiel:

$$I = \int d\psi_N^\dagger d\psi_N d\psi_{N-1}^\dagger d\psi_{N-1} \dots d\psi_1^\dagger d\psi_1 \exp \left[ - \sum_{i,j=1}^N \psi_i^\dagger M_{ij} \psi_j \right] \quad (\text{B.7})$$

Für den Fall  $M_{ij} = M_i \delta_{ij}$  läßt sich das Ergebnis leicht herleiten, denn aufgrund der Integrationsregeln (B.5) gibt nur der Term der Reihenentwicklung der Exponentialfunktion einen Beitrag, der genau das Produkt aller Grassmann-Felder  $\psi_1^\dagger \psi_1 \psi_2^\dagger \psi_2 \dots \psi_N^\dagger \psi_N$  enthält. Das Ergebnis der Integration ist dann das Produkt aller Diagonalelemente von  $M$ , das sich auch als Determinante von  $M$  schreiben läßt:

$$I = \det M \quad (\text{B.8})$$

Für nichtdiagonale Matrizen gilt (B.8) ebenso. Zum Beweis muß  $M$  diagonalisiert werden.

### Differentiation auf einer Grassmann-Algebra

Sie ist definiert durch:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} x_i = 1 \quad \frac{\partial}{\partial x_i} 1 = 0 \quad (\text{B.9})$$

Um die Differentiation an einem Produkt aus Grassmann-Variablen durchführen zu können, muß — genau wie bei der Integration — das Grassmann-Feld  $x_i$  durch Kommutieren direkt hinter  $\partial/\partial x_i$  gebracht werden.

### Auswertung von Integralen, die bei der Berechnung von Green-Funktionen auftreten

Bei der Berechnung von Green-Funktionen können folgende Integrale auftreten (siehe z.B. (4.54)):

$$-G_{xy} = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\psi^\dagger \mathcal{D}\psi \psi_x \psi_y^\dagger \exp \left[ - \sum_{ij} \psi_i^\dagger M_{ij} \psi_j \right] \quad (\text{B.10})$$

Die zusätzlichen Grassmann-Felder im Integranden können dadurch berücksichtigt werden, daß die Wirkung um eine Kopplung an äußere Felder  $\eta^\dagger$  und  $\eta$  erweitert wird. Daraus resultiert das sog. Erzeugende Funktional für die Green-Funktion. Die Differentiation nach den Grassmann-Feldern  $\eta^\dagger$  und  $\eta$  bringt gerade das Produkt  $\psi_x \psi_y^\dagger$  in den Integranden:

$$-G_{xy} = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2}{\partial \eta_x^\dagger \partial \eta_y} \int \mathcal{D}\psi^\dagger \mathcal{D}\psi \exp \left[ - \sum_{ij} \psi_i^\dagger M_{ij} \psi_j + \sum_i (\psi_i^\dagger \eta_i + \eta_i^\dagger \psi_i) \right] \Bigg|_{\eta^\dagger = \eta = 0} \quad (\text{B.11})$$

Die Anweisung,  $\eta^\dagger$  und  $\eta$  gleich Null zu setzen, bedarf einer kurzen Erläuterung. Eigentlich können Grassmann-Felder keine Zahlenwerte annehmen, deshalb ist diese Vorschrift so zu verstehen, daß alle Terme, die die Grassmann-Felder  $\eta^\dagger$  und  $\eta$  enthalten, weggelassen werden müssen.

Das Integral

$$I = \int \mathcal{D}\psi^\dagger \mathcal{D}\psi \exp \left[ - \sum_{ij} \psi_i^\dagger M_{ij} \psi_j + \sum_i (\psi_i^\dagger \eta_i + \eta_i^\dagger \psi_i) \right] \quad (\text{B.12})$$

kann mit Hilfe der Transformation

$$\psi_i = \xi_i + \sum_k (M^{-1})_{ik} \eta_k \quad (\text{B.13})$$

$$\psi_i^\dagger = \xi_i^\dagger + \sum_k \eta_k^\dagger (M^{-1})_{ki} \quad (\text{B.14})$$

berechnet werden. Das Integralmaß wird durch die Integrationen über die Felder  $\xi^\dagger$  und  $\xi$  ersetzt. Damit folgt:

$$\begin{aligned} I &= \exp \left[ \sum_{ij} \eta_i^\dagger (M^{-1})_{ij} \eta_j \right] \int \mathcal{D}\xi^\dagger \mathcal{D}\xi \exp \left[ - \sum_{ij} \xi_i^\dagger M_{ij} \xi_j \right] \\ &= \exp \left[ \sum_{ij} \eta_i^\dagger (M^{-1})_{ij} \eta_j \right] \det M \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Mit

$$\frac{\partial^2}{\partial \eta_x^\dagger \partial \eta_y} \exp \left[ \sum_{ij} \eta_i^\dagger (M^{-1})_{ij} \eta_j \right] \Bigg|_{\eta^\dagger = \eta = 0} = (M^{-1})_{xy} \quad (\text{B.16})$$

ergibt sich schließlich:

$$-G_{xy} = \frac{1}{Z} (M^{-1})_{xy} \det M \quad (\text{B.17})$$



## C Nebenrechnungen zu Kapitel 4.1

In diesem Anhang sollen einige Nebenrechnungen zum Kap. 4.1, in dem die Weller-sche Theorie beschrieben wurde, aufgeführt werden.

### Zur Definition der kohärenten Zustände

Das zweite Gleichheitszeichen in (4.13) bedarf einer kurzen Erklärung: die Entwicklung der Exponentialfunktion bricht wegen  $\psi_n \psi_n = 0$  nach dem zweiten Term ab:

$$\exp \left[ \frac{1}{2} \psi_n \psi_n^\dagger + \sum_{\sigma} \psi_n b_{\sigma n} X_{\sigma 0} \right] |0\rangle = \left[ 1 + \frac{1}{2} \psi_n \psi_n^\dagger + \sum_{\sigma} \psi_n b_{\sigma n} X_{\sigma 0} \right] |0\rangle \quad (\text{C.1})$$

### Beweis der Äquivalenz der Gleichungen (4.11) und (4.12) — Herleitung der Gleichungen (4.14/15)

Die kohärenten Zustände (4.13) lassen sich schreiben als:

$$|\psi_n, b_n\rangle = |0\rangle + \frac{1}{2} \psi_n \psi_n^\dagger |0\rangle + \sum_{\sigma} \psi_n b_{\sigma n} |\sigma\rangle \quad (\text{C.2})$$

$$\langle \psi_n, b_n | = \langle 0 | + \langle 0 | \frac{1}{2} \psi_n \psi_n^\dagger + \sum_{\sigma} \langle \sigma | \psi_n^\dagger b_{\sigma n}^* \quad (\text{C.3})$$

Unter Berücksichtigung, daß Produkte identischer Grassmann-Variablen verschwinden, ergibt sich:

$$\begin{aligned} |\psi_n, b_n\rangle \langle \psi_n, b_n | &= |0\rangle \langle 0 | + \psi_n \psi_n^\dagger |0\rangle \langle 0 | + \sum_{\sigma} |0\rangle \langle \sigma | \psi_n^\dagger b_{\sigma n}^* \\ &+ \sum_{\sigma} \psi_n b_{\sigma n} |\sigma\rangle \langle 0 | + \sum_{\sigma \sigma'} \psi_n b_{\sigma' n} \psi_n^\dagger b_{\sigma n}^* |\sigma'\rangle \langle \sigma | \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

Die Integration über die Grassmann-Variablen  $\psi_n$  und  $\psi_n^\dagger$  führt auf:

$$\int d\psi_n^\dagger d\psi_n |\psi_n, b_n\rangle \langle \psi_n, b_n | = |0\rangle \langle 0 | + \sum_{\sigma \sigma'} b_{\sigma n}^* b_{\sigma' n} |\sigma'\rangle \langle \sigma | \quad (\text{C.5})$$

Wegen der geforderten Äquivalenz der Gleichungen (4.11) und (4.12) muß die Integration über  $b_n$  den ersten Term invariant lassen und für den zweiten

$$\int_{b_n} b_{\sigma n}^* b_{\sigma' n} = \delta_{\sigma\sigma'} \quad (\text{C.6})$$

ergeben.

### Die Eigenwertgleichung für die kohärenten Zustände (4.16)

Sie folgt aus der Definition der Hubbard-Operatoren  $X_{ij}$  und der Tatsache, daß das Produkt  $\psi_n \psi_n$  verschwindet.

$$X_{0\sigma} |\psi_n, b_n\rangle = \sum_{\sigma'} \psi_n b_{\sigma' n} \delta_{\sigma\sigma'} |0\rangle = \psi_n b_{\sigma n} |0\rangle \quad (\text{C.7})$$

$$\psi_n b_{\sigma n} |\psi_n, b_n\rangle = \psi_n b_{\sigma n} |0\rangle \quad (\text{C.8})$$

Die rechten Seiten der Gleichungen (C.7) und (C.8) sind identisch, also müssen auch die linken Seiten identisch sein.

### Die Spurformel (4.17)

Mit den Gleichungen (C.2) und (C.3) ergibt sich:

$$\begin{aligned} & \int_{b_1} \int d\psi_1^\dagger d\psi_1 \langle -\psi_1, b_1 | \dots | \psi_1, b_1 \rangle = \\ & = \int_{b_1} \int d\psi_1^\dagger d\psi_1 \left\{ \langle 0 | + \langle 0 | \frac{1}{2} \psi_1 \psi_1^\dagger - \sum_{\sigma} \langle \sigma | \psi_1^\dagger b_{\sigma 1}^* \right\} \dots \\ & \quad \left\{ |0\rangle + \frac{1}{2} \psi_1 \psi_1^\dagger |0\rangle + \sum_{\sigma'} \psi_1 b_{\sigma' 1} | \sigma' \rangle \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

Die Größe, von der die Spur gebildet werden soll, kann natürlich nicht von  $\psi_1^\dagger, \psi_1$  und  $b_{\sigma 1}$  abhängen. Außerdem ist es sinnvoll anzunehmen, daß sie mit den Grassmann-Variablen vertauscht. Die Rechenregeln für die Grassmann-Variablen und die eben bewiesenen Regeln zur Ausintegration der  $b$ -Felder führen dann auf Gl. (4.17).

### Das Skalarprodukt zwischen verschiedenen kohärenten Zuständen

Mit der Orthogonalität der Zustände  $|i\rangle$  ( $i = 0, \uparrow, \downarrow$ ) folgt:

$$\begin{aligned} \langle \psi_n, b_n | \psi_{n-1}, b_{n-1} \rangle & = 1 + \frac{1}{2} \psi_n \psi_n^\dagger + \frac{1}{2} \psi_{n-1} \psi_{n-1}^\dagger \\ & + \frac{1}{4} \psi_n \psi_n^\dagger \psi_{n-1} \psi_{n-1}^\dagger + \sum_{\sigma} \psi_n^\dagger b_{\sigma n}^* \psi_{n-1} b_{\sigma n-1} \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

Dieser Ausdruck läßt sich in knapper Form als Exponential schreiben:

$$\langle \psi_n, b_n | \psi_{n-1}, b_{n-1} \rangle = \exp \left[ \frac{1}{2} \psi_n \psi_n^\dagger + \frac{1}{2} \psi_{n-1} \psi_{n-1}^\dagger + \psi_n^\dagger \psi_{n-1} \sum_{\sigma} b_{\sigma n}^* b_{\sigma n-1} \right] \quad (\text{C.11})$$

Die Gleichheit mit (C.10) ergibt sich aus der Potenzreihenentwicklung der Exponentialfunktion.

### Herleitung der Wirkung im Funktionalintegral (4.21)

Der Integrand des Funktionalintegrals kann mit (C.11) komplett als Exponential geschrieben werden, wobei der Term  $\psi_1^\dagger \psi_0$  als Abkürzung für  $-\psi_1^\dagger \psi_N$  aufgefaßt werden muß.

$$\begin{aligned} & \prod_{n=1}^N \langle \psi_n, b_n | : e^{-\Delta\tau H} : | \psi_{n-1}, b_{n-1} \rangle = \\ & \prod_{n=1}^N \left( \exp \left[ \frac{1}{2} \psi_n \psi_n^\dagger + \frac{1}{2} \psi_{n-1} \psi_{n-1}^\dagger + \psi_n^\dagger \psi_{n-1} \sum_{\sigma} b_{\sigma n}^* b_{\sigma n-1} \right] \right. \\ & \left. \times \exp \left[ -\Delta\tau H(X_{\sigma 0} \rightarrow \psi_n^\dagger b_{\sigma n}^*, X_{0\sigma} \rightarrow \psi_{n-1} b_{\sigma n-1}) \right] \right) = \dots \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

Hier wurde verwendet, daß Produkte aus je zwei Grassmann-Variablen immer miteinander vertauschen. Damit ist es auch möglich, das Produkt durch eine Summe im Exponenten zu ersetzen.

$$\begin{aligned} \dots = \exp & \left[ \sum_{n=1}^N \left( \frac{1}{2} \psi_n \psi_n^\dagger + \frac{1}{2} \psi_{n-1} \psi_{n-1}^\dagger + \psi_n^\dagger \psi_{n-1} \sum_{\sigma} b_{\sigma n}^* b_{\sigma n-1} \right. \right. \\ & \left. \left. - \Delta\tau H(X_{\sigma 0} \rightarrow \psi_n^\dagger b_{\sigma n}^*, X_{0\sigma} \rightarrow \psi_{n-1} b_{\sigma n-1}) \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

Durch Umindizierung in den ersten beiden Termen folgt die in (4.21) angegebene Form der Wirkung.

## D Nebenrechnungen zu Kapitel 7

Die Durchführung der Renormierungsgruppentheorie ist mit hohem analytischen Aufwand verbunden. Um die Lesbarkeit von Kap. 7 zu erleichtern, befinden sich die Nebenrechnungen und Definitionen zum Teil in diesem Anhang. Zwar sind in [Kri80] einige Rechnungen in ähnlicher Weise durchgeführt, doch erübrigt sich die ausführliche Darstellung in dieser Arbeit — aufgrund der etwas unterschiedlichen Schreibweise und der Erweiterung auf die nichtkonstante Zustandsdichte — keineswegs.

### Beweis der Äquivalenz der Hamiltonoperatoren (7.1) und (7.2)

Für den Beweis ist es ausreichend zu zeigen, daß in den Funktionalintegralformulierungen für  $H'$  und  $H$  nach Ausintegration der Leitungselektronen die effektiven Wirkungen für den Störstellenfreiheitsgrad übereinstimmen. Die dazu notwendige Theorie wurde im wesentlichen in Kap. 5.1 entwickelt. Die aus  $H'$  resultierende effektive Wirkung lautet demnach (vgl. (5.16)):

$$S'_{\text{eff}}(\psi, \psi^\dagger) = S_f(\psi, \psi^\dagger) + \left(\frac{\beta V}{N}\right)^2 \sum_{\sigma n m} \psi_{\sigma n+1}^\dagger \psi_{\sigma m-1} \sum_k (H^{-1})_{nm}(k) \quad (\text{D.1})$$

mit

$$S_f(\psi, \psi^\dagger) = \sum_{\sigma n} \psi_{\sigma n}^\dagger \left( (1 - \Delta\tau \varepsilon_f) \psi_{\sigma n-1} - \psi_{\sigma n} \right) - \Delta\tau U \sum_n \psi_{\uparrow n}^\dagger \psi_{\uparrow n-1} \psi_{\downarrow n}^\dagger \psi_{\downarrow n-1} \quad (\text{D.2})$$

Für die dem Hamiltonoperator (7.2) entsprechende Wirkung gilt:

$$\begin{aligned} S(\psi, \psi^\dagger, \chi, \chi^\dagger) &= S_f(\psi, \psi^\dagger) + \sum_{\sigma n} \int_{-1}^1 d\varepsilon \chi_{\varepsilon\sigma n}^\dagger \left( (1 - \Delta\tau g(\varepsilon)) \chi_{\varepsilon\sigma n-1} - \chi_{\varepsilon\sigma n} \right) \\ &\quad - \Delta\tau \sum_{\sigma n} \int_{-1}^1 d\varepsilon h(\varepsilon) \left[ \chi_{\varepsilon\sigma n}^\dagger \psi_{\sigma n-1} + \psi_{\sigma n}^\dagger \chi_{\varepsilon\sigma n-1} \right] \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

Die Ausintegration der Leitungselektronen läuft exakt nach dem in Kap. 5.1 beschriebenen Schema ab. Die Hilfsfelder haben nun die Form:

$$\xi_{\varepsilon\sigma n} = -\Delta\tau h(\varepsilon) \psi_{\sigma n-1} \quad (\text{D.4})$$

$$\xi_{\varepsilon\sigma n}^\dagger = -\Delta\tau h(\varepsilon)\psi_{\sigma n+1}^\dagger \quad (\text{D.5})$$

Die Matrix  $H_{nn'}(g(\varepsilon))$  ist mit

$$a_\varepsilon = 1 - \Delta\tau g(\varepsilon) \quad (\text{D.6})$$

analog zu (5.10) definiert. Damit folgt für die effektive Wirkung:

$$S_{\text{eff}}(\psi, \psi^\dagger) = S_I(\psi, \psi^\dagger) + \left(\frac{\beta}{N}\right)^2 \sum_{\sigma nm} \psi_{\sigma n+1}^\dagger \psi_{\sigma m-1} \int_{-1}^1 d\varepsilon h(\varepsilon)^2 (H^{-1})_{nm}(g(\varepsilon)) \quad (\text{D.7})$$

Da in (D.1) die Matrixelemente nur über  $\varepsilon_k$  von  $k$  abhängen, ergibt sich wegen

$$\sum_k (H^{-1})_{nm}(k) = \int_{-1}^1 d\varepsilon \rho(\varepsilon) (H^{-1})_{nm}(\varepsilon) \quad (\text{D.8})$$

genau dann die Äquivalenz der effektiven Wirkungen (D.1) und (D.7), wenn gefordert wird, daß

$$\int_{-1}^1 dg \frac{\partial \varepsilon(g)}{\partial g} h(\varepsilon(g))^2 (H^{-1})_{nm}(g) \equiv \int_{-1}^1 d\varepsilon V^2 \rho(\varepsilon) (H^{-1})_{nm}(\varepsilon) \quad (\text{D.9})$$

Für  $g(\varepsilon) = \varepsilon$  ergibt sich sofort  $h(\varepsilon) = V\sqrt{\rho(\varepsilon)}$ . Wird die Kopplung konstant gesetzt ( $h(\varepsilon) = h$ ) und gefordert, daß  $g(-1) = -1$  und  $g(1) = 1$ , so folgt zunächst

$$\varepsilon(g) = \alpha \int_{-1}^g dx \rho(x) - 1 \quad , \quad h = \frac{1}{\sqrt{\alpha}} V \quad , \quad \text{mit} \quad \alpha = \frac{2}{\int_{-1}^1 dx \rho(x)} \quad (\text{D.10})$$

Die Funktion  $g(\varepsilon)$  muß dann aus  $\varepsilon(g)$  durch eine numerische Umkehrung bestimmt werden.

Angemerkt sei noch, daß sich die Zustandssummen der Leitungselektronen durchaus unterscheiden können, diese Größen aber bei der Berechnung der Green-Funktionen keine Rolle spielen.

### Zur Transformation des Hybridisierungsterms (7.11)

Mit  $\Delta(\varepsilon) = \pi V^2 \rho(\varepsilon)$  gilt:

$$\begin{aligned} & \int_{-1}^1 d\varepsilon \sqrt{\rho(\varepsilon)} V a_{\varepsilon\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-1}^1 d\varepsilon \sqrt{\Delta(\varepsilon)} a_{\varepsilon\sigma} = \\ & = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{np} \left[ a_{np\sigma} \int_{x_{n+1}}^{x_n} d\varepsilon \sqrt{\Delta(\varepsilon)} \psi_{np}^+(\varepsilon) + b_{np\sigma} \int_{-x_n}^{-x_{n+1}} d\varepsilon \sqrt{\Delta(\varepsilon)} \psi_{np}^-(\varepsilon) \right] = \dots \quad (\text{D.11}) \end{aligned}$$

Von den Integralen werden nur die  $p = 0$  Terme berücksichtigt, was gleichbedeutend ist mit der Näherung eines konstanten  $\Delta(\varepsilon)$  in den jeweiligen Intervallen. Also folgt

$$\dots = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_n [\gamma_n^+ a_{n0\sigma} + \gamma_n^- b_{n0\sigma}] \equiv \left(\frac{\xi_0}{\pi}\right)^{1/2} f_{0\sigma} \quad (\text{D.12})$$

mit den Abkürzungen:

$$\gamma_n^+ = \frac{1}{\sqrt{d_n}} \int_{x_{n+1}}^{x_n} d\varepsilon \sqrt{\Delta(\varepsilon)} \quad (\text{D.13})$$

$$\gamma_n^- = \frac{1}{\sqrt{d_n}} \int_{-x_n}^{-x_{n+1}} d\varepsilon \sqrt{\Delta(\varepsilon)} \quad (\text{D.14})$$

$$f_{0\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\xi_0}} \sum_n [\gamma_n^+ a_{n0\sigma} + \gamma_n^- b_{n0\sigma}] \quad (\text{D.15})$$

$$\xi_0 = \sum_n (\gamma_n^{+2} + \gamma_n^{-2}) \quad (\text{D.16})$$

Für den adjungierten Operator läuft die Transformation analog.

### Berechnung der Kopplungen $\varepsilon_n$

Der Ansatz (7.15) wird (nur für die Vernichtungsoperatoren) in die linke Seite der Gleichung (7.14) eingesetzt. Das Sortieren nach den  $f_{n\sigma}$  auf beiden Seiten von (7.14) ergibt:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1}) \sum_{nm\sigma} \eta_n (a_{n\sigma}^\dagger u_{mn} - b_{n\sigma}^\dagger v_{mn}) f_{m\sigma} &= \sum_{\sigma} \varepsilon_0 f_{1\sigma}^\dagger f_{0\sigma} \\ &+ \sum_{\sigma m=1}^{\infty} (\varepsilon_{m-1} f_{m-1\sigma}^\dagger + \varepsilon_m f_{m+1\sigma}^\dagger) f_{m\sigma} \end{aligned} \quad (\text{D.17})$$

Der Koeffizientenvergleich führt auf:

$$\varepsilon_0 f_{1\sigma}^\dagger = \frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1}) \sum_n \eta_n (a_{n\sigma}^\dagger u_{0n} - b_{n\sigma}^\dagger v_{0n}) \quad (\text{D.18})$$

$$\varepsilon_{m-1} f_{m-1\sigma}^\dagger + \varepsilon_m f_{m+1\sigma}^\dagger = \frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1}) \sum_n \eta_n (a_{n\sigma}^\dagger u_{mn} - b_{n\sigma}^\dagger v_{mn}) \quad (\text{D.19})$$

Das Bilden des Antikommutators der linken Seiten in (D.18/19) mit den jeweils adjungierten Operatoren führt schließlich auf ein System von Gleichungen, mit dem iterativ alle Koeffizienten  $u_{mn}$ ,  $v_{mn}$  und Kopplungen  $\varepsilon_n$  berechnet werden können:

$$u_{0m} = \xi_0^{-1/2} \gamma_m^+ \quad , \quad v_{0m} = \xi_0^{-1/2} \gamma_m^- \quad (\text{D.20})$$

$$\tilde{\varepsilon}_0^2 = \sum_n \eta_n^2 (u_{0n}^2 + v_{0n}^2) \quad (\text{D.21})$$

$$u_{1m} = \frac{\eta_m}{\tilde{\varepsilon}_0} u_{0m} \quad , \quad v_{1m} = -\frac{\eta_m}{\tilde{\varepsilon}_0} v_{0m} \quad (\text{D.22})$$

⋮

$$\tilde{\varepsilon}_m^2 = \sum_n \eta_n^2 (u_{mn}^2 + v_{mn}^2) - \tilde{\varepsilon}_{m-1}^2 \quad (\text{D.23})$$

$$u_{(n+1)m} = \frac{\eta_m}{\tilde{\varepsilon}_n} u_{nm} - \frac{\tilde{\varepsilon}_{n-1}}{\tilde{\varepsilon}_n} u_{(n-1)m} \quad , \quad v_{(n+1)m} = -\frac{\eta_m}{\tilde{\varepsilon}_n} v_{nm} - \frac{\tilde{\varepsilon}_{n-1}}{\tilde{\varepsilon}_n} v_{(n-1)m} \quad (\text{D.24})$$

Die ersten beiden Gleichungen stammen aus der Definition des Operators  $f_{0\sigma}$  (D.15).

Die  $\tilde{\varepsilon}_n$  sind durch

$$\varepsilon_n = \frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1})\tilde{\varepsilon}_n \quad (\text{D.25})$$

definiert.

### Details zur iterativen Diagonalisierung

Folgende vier Zustände bilden eine Basis für den Hilbertraum zu  $H_{N+1}$ :

$$\begin{aligned} |Q, S, S_z, r; 0\rangle &= |Q, S, S_z, r\rangle_N \\ |Q, S, S_z, r; \uparrow\rangle &= f_{N+1\uparrow}^\dagger |Q, S, S_z, r\rangle_N \\ |Q, S, S_z, r; \downarrow\rangle &= f_{N+1\downarrow}^\dagger |Q, S, S_z, r\rangle_N \\ |Q, S, S_z, r; \uparrow\downarrow\rangle &= f_{N+1\uparrow}^\dagger f_{N+1\downarrow}^\dagger |Q, S, S_z, r\rangle_N \end{aligned} \quad (\text{D.26})$$

Aus diesen können Eigenzustände zum Teilchenzahloperator, zum Spinoperator und zu dessen  $z$ -Komponente konstruiert werden:

$$\begin{aligned} |Q, S, S_z, r; 1\rangle_{N+1} &= |Q+1, S, S_z, r; 0\rangle \\ |Q, S, S_z, r; 2\rangle_{N+1} &= \sqrt{\frac{S+S_z}{2S}} |Q, S-\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2}, r; \uparrow\rangle \\ &\quad + \sqrt{\frac{S-S_z}{2S}} |Q, S-\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r; \downarrow\rangle \\ |Q, S, S_z, r; 3\rangle_{N+1} &= -\sqrt{\frac{S-S_z+1}{2S+2}} |Q, S+\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2}, r; \uparrow\rangle \\ &\quad + \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+2}} |Q, S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r; \downarrow\rangle \\ |Q, S, S_z, r; 4\rangle_{N+1} &= |Q-1, S, S_z, r; \uparrow\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (\text{D.27})$$

Die Diagonalisierung von  $H_{N+1}$  kann in jedem  $(Q, S, S_z)$ -Unterraum unabhängig voneinander vorgenommen werden. Dazu müssen die Matrixelemente

$$\begin{aligned} H(ri, r'j) &= {}_{N+1}\langle Q, S, S_z, r; i | H_{N+1} | Q, S, S_z, r'; j \rangle_{N+1} = \\ &= \sqrt{\Lambda} {}_{N+1}\langle Q, S, S_z, r; i | H_N | Q, S, S_z, r'; j \rangle_{N+1} \\ &\quad + \Lambda^{N/2} \sum_\sigma \tilde{\varepsilon}_N {}_{N+1}\langle Q, S, S_z, r; i | (f_{N\sigma}^\dagger f_{N+1\sigma} + f_{N+1\sigma}^\dagger f_{N\sigma}) | Q, S, S_z, r'; j \rangle_{N+1} \end{aligned} \quad (\text{D.28})$$

berechnet werden. Die Zustände (D.27) sind Eigenzustände zu  $H_N$ . Deswegen gilt für den ersten Term in (D.28):

$${}_{N+1} \langle Q, S, S_z, r; i | H_N | Q, S, S_z, r'; j \rangle_{N+1} = \begin{cases} E_N(Q+1, S, r) & : i = j = 1 \\ E_N(Q, S - \frac{1}{2}, r) & : i = j = 2 \\ E_N(Q, S + \frac{1}{2}, r) & : i = j = 3 \\ E_N(Q-1, S, r) & : i = j = 4 \end{cases} \quad (\text{D.29})$$

Zur Berechnung des zweiten Terms in (D.28) werden wegen

$$\begin{aligned} & {}_{N+1} \langle Q, S, S_z, r; i | f_{N+1\sigma}^\dagger f_{N\sigma} | Q, S, S_z, r'; j \rangle_{N+1} = \\ & = {}_{N+1} \langle Q, S, S_z, r'; j | f_{N\sigma}^\dagger f_{N+1\sigma} | Q, S, S_z, r; i \rangle_{N+1} \end{aligned} \quad (\text{D.30})$$

(beide Seiten der Gleichung sind reell) nur die Matrixelemente, die den Operator  $f_{N\sigma}^\dagger$  enthalten ausgewertet. Da die Operatoren  $f_{N1}^\dagger$  und  $f_{N1}$  die Komponenten eines Tensoroperators  $\frac{1}{2}$ -ter Stufe bilden, ist das Wigner-Eckart-Theorem [Mes85] anwendbar:

$$\langle Q, S, S_z, r | f_{N\sigma}^\dagger | Q', S', S'_z, r' \rangle = \langle Q, S, r | f_N^\dagger | Q', S', r' \rangle \langle S', S'_z; \frac{1}{2} \sigma | S, S_z \rangle \quad (\text{D.31})$$

Die  $\langle f_N^\dagger \rangle$  sind dabei die reduzierten Matrixelemente und die  $\langle S', S'_z; \frac{1}{2} \sigma | S, S_z \rangle$  Clebsch-Gordan-Koeffizienten. Es ergeben sich folgende Gleichungen:

$$\begin{aligned} {}_{N+1} \langle Q, S, S_z, r; 1 | f_{N\sigma}^\dagger f_{N+1\sigma} | Q, S, S_z, r'; 2 \rangle_{N+1} &= {}_N \langle Q+1, S, r | f_N^\dagger | Q, S - \frac{1}{2}, r' \rangle_N \\ {}_{N+1} \langle Q, S, S_z, r; 1 | f_{N\sigma}^\dagger f_{N+1\sigma} | Q, S, S_z, r'; 3 \rangle_{N+1} &= {}_N \langle Q+1, S, r | f_N^\dagger | Q, S + \frac{1}{2}, r' \rangle_N \\ {}_{N+1} \langle Q, S, S_z, r; 2 | f_{N\sigma}^\dagger f_{N+1\sigma} | Q, S, S_z, r'; 4 \rangle_{N+1} &= \frac{2S}{2S+1} \\ &\quad \cdot {}_N \langle Q, S - \frac{1}{2}, r | f_N^\dagger | Q-1, S, r' \rangle_N \\ {}_{N+1} \langle Q, S, S_z, r; 3 | f_{N\sigma}^\dagger f_{N+1\sigma} | Q, S, S_z, r'; 4 \rangle_{N+1} &= \frac{2S+2}{2S+1} \\ &\quad \cdot {}_N \langle Q, S + \frac{1}{2}, r | f_N^\dagger | Q-1, S, r' \rangle_N \end{aligned} \quad (\text{D.32})$$

Alle nicht angegebenen Matrixelemente verschwinden. Die Matrix  $H(ri, r'j)$  ist damit unabhängig von  $S_z$ . Aus ihrer Diagonalisierung resultieren neben den Eigenenergien  $E_{N+1}(Q, S, w)$  die Eigenzustände

$$|Q, S, S_z, w\rangle_{N+1} = \sum_{ri} U_{QS}(w, ri) |Q, S, S_z, r; i\rangle_{N+1} \quad (\text{D.33})$$



Die orthogonalen Matrizen werden benötigt, um die reduzierten Matrixelemente für den nächsten Iterationsschritt zu berechnen.

$$\begin{aligned} {}_{N+1}\langle Q, S, w \| f_{N+1}^\dagger \| Q', S', w' \rangle_{N+1} &= \sum_r \left[ U_{QS}(w, rk) U_{Q'S'}(w', r1) \right. \\ &\quad \left. \pm \frac{2S'+1}{2S+1} U_{QS}(w, r4) U_{Q'S'}(w', rk') \right] \quad (\text{D.34}) \end{aligned}$$

Dabei gilt bei  $S = S' + 1/2$  das Pluszeichen und  $k = 2, k' = 3$  und bei  $S = S' - 1/2$  das Minuszeichen und  $k = 3, k' = 2$ .

### Iterative Berechnung der Spektralfunktion

Die Berechnung der f-Spektralfunktion erfordert nach (7.29/30) die Kenntnis der reduzierten Matrixelemente  ${}_N\langle Q, S, w \| f_{-1}^\dagger \| Q, S, w' \rangle_N$ . Diese werden zunächst mit Hilfe der orthogonalen Transformation (D.33) in der Basis (D.27) dargestellt:

$$\begin{aligned} {}_N\langle Q, S, w \| f_{-1}^\dagger \| Q', S', w' \rangle_N &= \sum_{rr'} \sum_{pp'=1}^4 U_{QS}(w, rp) U_{Q'S'}(w', r'p') \\ &\quad \cdot {}_N\langle Q, S, r; p \| f_{-1}^\dagger \| Q', S', r'; p' \rangle_N \quad (\text{D.35}) \end{aligned}$$

Die Auswertung der reduzierten Matrixelemente der rechten Seite ergibt:

$$\begin{aligned} {}_N\langle Q, S, r; 1 \| f_{-1}^\dagger \| Q - 1, S \pm \frac{1}{2}, r'; 1 \rangle_N &= {}_{N-1}\langle Q + 1, S, r \| f_{-1}^\dagger \| Q, S \pm \frac{1}{2}, r' \rangle_{N-1} \\ {}_N\langle Q, S, r; 2 \| f_{-1}^\dagger \| Q - 1, S + \frac{1}{2}, r'; 2 \rangle_N &= -\frac{2}{2S+1} \sqrt{S^2 + S} \\ &\quad \cdot {}_{N-1}\langle Q, S - \frac{1}{2}, r \| f_{-1}^\dagger \| Q - 1, S, r' \rangle_{N-1} \\ {}_N\langle Q, S, r; 2 \| f_{-1}^\dagger \| Q - 1, S - \frac{1}{2}, r'; 2 \rangle_N &= -{}_{N-1}\langle Q, S - \frac{1}{2}, r \| f_{-1}^\dagger \| Q - 1, S - 1, r' \rangle_{N-1} \\ {}_N\langle Q, S, r; 3 \| f_{-1}^\dagger \| Q - 1, S + \frac{1}{2}, r'; 3 \rangle_N &= -{}_{N-1}\langle Q, S + \frac{1}{2}, r \| f_{-1}^\dagger \| Q - 1, S + 1, r' \rangle_{N-1} \\ {}_N\langle Q, S, r; 3 \| f_{-1}^\dagger \| Q - 1, S - \frac{1}{2}, r'; 3 \rangle_N &= -\frac{2}{2S+1} \sqrt{S^2 + S} \\ &\quad \cdot {}_{N-1}\langle Q, S + \frac{1}{2}, r \| f_{-1}^\dagger \| Q - 1, S, r' \rangle_{N-1} \\ {}_N\langle Q, S, r; 2 \| f_{-1}^\dagger \| Q - 1, S - \frac{1}{2}, r'; 3 \rangle_N &= -\frac{1}{2S+1} \\ &\quad \cdot {}_{N-1}\langle Q, S - \frac{1}{2}, r \| f_{-1}^\dagger \| Q - 1, S, r' \rangle_{N-1} \\ {}_N\langle Q, S, r; 3 \| f_{-1}^\dagger \| Q - 1, S + \frac{1}{2}, r'; 2 \rangle_N &= \frac{1}{2S+1} \\ &\quad \cdot {}_{N-1}\langle Q, S + \frac{1}{2}, r \| f_{-1}^\dagger \| Q - 1, S, r' \rangle_{N-1} \\ {}_N\langle Q, S, r; 4 \| f_{-1}^\dagger \| Q - 1, S \pm \frac{1}{2}, r'; 4 \rangle_N &= {}_{N-1}\langle Q - 1, S, r \| f_{-1}^\dagger \| Q - 2, S \pm \frac{1}{2}, r' \rangle_{N-1} \end{aligned} \quad (\text{D.36})$$

Dabei sind wiederum alle nicht angegebenen Matrixelemente gleich Null.

### Startwerte für die Matrixelemente

Die sowohl zur iterativen Diagonalisierung als auch zur iterativen Berechnung der Spektralfunktion notwendigen Startwerte für die reduzierten Matrixelemente lauten:

$${}_{-1}\langle 0, \frac{1}{2}\|f_{-1}^\dagger\| - 1, 0 \rangle_{-1} = 1 \quad (\text{D.37})$$

$${}_{-1}\langle 1, 0\|f_{-1}^\dagger\|0, \frac{1}{2} \rangle_{-1} = -\sqrt{2} \quad (\text{D.38})$$

Alle anderen Matrixelemente sind gleich Null.

## Literaturverzeichnis

- [All86] J. W. ALLEN, S. J. OH, O. GUNNARSON, K. SCHÖNHAMMER, M. B. MAPLE, M. S. TORIKACHVILI, I. LINDAU: *Adv. Phys.* **35**, 275 (1986)
- [All91] J. W. ALLEN: *Physica B***171**, 175 (1991)
- [And61] P. W. ANDERSON: *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961)
- [And83] N. ANDREI, K. FURUYA, J. H. LOWENSTEIN: *Rev. Mod. Phys.* **55**, 331 (1983)
- [Bar76] S. E. BARNES: *J. Phys. F***6**, 1375 (1976)
- [Bay91] G. BAYM, C. PETHIK: *Landau Fermi-Liquid Theory*, John Wiley, New York 1991
- [Bed86] J. G. BEDNORZ, K. A. MÜLLER: *Z. Phys. B – Condensed Matter* **64**, 189 (1986)
- [Ber66] F. A. BEREZIN: *Method of Second Quantization*, Academic Press, New York 1966
- [Bet31] H. A. BETHE: *Z. Phys.* **71**, 205 (1931)
- [Bic87] N. E. BICKERS, D. L. COX, J. W. WILKINS: *Phys. Rev.* **B36**, 2036 (1987)
- [Bra92] U. BRANDT, M. P. URBANEK: *Z. Phys. B – Condensed Matter* **89**, 297 (1992)
- [Col84] P. COLEMAN: *Phys. Rev.* **B29**, 3035 (1984)
- [Cos92] T. A. COSTI, A. C. HEWSON: *Philos. Mag.* **B65**, 1165 (1992)

- 
- [Cos93] T. A. COSTI, A. C. HEWSON: *J. Phys. – Condensed Matter* **5**, L361 (1993)
- [Cos93a] T. A. COSTI, A. C. HEWSON, V. ZLATIC: Vorabdruck (1993)
- [Dir33] P. A. M. DIRAC: *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion* **3**, 64 (1933)
- [Dop92] G. DOPF, J. WAGNER, P. DIETERICH, A. MURAMATSU, W. HANKE: *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2082 (1992)
- [Fey48] R. P. FEYNMAN: *Rev. Mod. Phys.* **20**, 367 (1948)
- [Fey65] P. P. FEYNMAN, A. R. HIBBS: *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill Book Company, New York 1965
- [För93] D. FÖRSTER, N. SCHOPHOL: *Phys. Rev.* **B48**, 993 (1993)
- [Fri58] J. FRIEDEL: *Nuovo Cim. (Suppl.)* **7**, 287 (1958)
- [Fro86] H. O. FROTA, L. N. OLIVEIRA: *Phys. Rev.* **B33**, 7871 (1986)
- [Ful88] P. FULDE, J. KELLER, G. ZWICKNAGL: *Solid State Phys.* **41**, 1 (1988)
- [Fye88] R. M. FYE, J. E. HIRSCH: *Phys. Rev.* **B38**, 433 (1988)
- [Geo92] A. GEORGES, G. KOTLIAR: *Phys. Rev.* **B45**, 6479 (1992)
- [Gra94] H. GRASSMANN: *Gesammelte mathematische und physikalische Werke*, Teubner, Leipzig 1894
- [Grü74] G. GRÜNER, A. ZAWADOWSKI: *Rep. Prog. Phys.* **37**, 1497 (1974)
- [Gub91] J. E. GUBERNATIS, M. JARRELL, R. N. SILVER, D. S. SIVIA: *Phys. Rev.* **B44**, 6011 (1991)
- [Gun83] O. GUNNARSON, K. SCHÖNHAMMER: *Phys. Rev. Lett.* **50**, 604 (1983)
- [Hac93] B. HACKL: Diplomarbeit, Regensburg 1993
- [Hew93] A. C. HEWSON: *The Kondo Problem to Heavy Fermions*, Cambridge University Press, Cambridge 1993
- [Hey92] J. HEYM: *J. Low Temp. Phys.* **89**, 89 (1992)
- [Hir83] J. E. HIRSCH: *Phys. Rev.* **B28**, 4059 (1983)

- 
- [Hoo87] G. HOOIJER, J. E. VAN HIMBERGEN: Phys. Rev. **B36**, 7678 (1987)
- [Hor87] B. HORVATIĆ, D. ŠOKČEVIĆ, V. ZLATIĆ: Phys. Rev. **B36**, 675 (1987)
- [Hub59] J. HUBBARD: Phys. Rev. Lett. **3**, 77 (1959)
- [Hub64] J. HUBBARD: Proc. Roy. Soc (London) Ser. A **277**, 237 (1964)
- [Hub66] J. HUBBARD: Proc. Roy. Soc. (London) Ser. A **296**, 82 (1966)
- [Jar92] M. JARRELL: Phys. Rev. Lett. **69**, 168 (1992)
- [Jar93] M. JARRELL, T. PRUSCHKE: Z. Phys. B – Condensed Matter **90**, 187 (1993)
- [Jar93a] M. JARRELL: private Mitteilung (1993)
- [Kei70] H. KEITER, J. C. KIMBALL: Phys. Rev. Lett. **25**, 672 (1970)
- [Kei85] H. KEITER, M. KRECH: J. Magn. & Magn. Mater. **47&48**, 347 (1985)
- [Kla85] J. R. KLAUDER, B. SKAGERSTAM: *Coherent States: Applications in Physics and Mathematical Physics*, World Scientific, Sinagapore 1985
- [Koj84] H. KOJIMA, Y. KURAMOTO, M. TACHIKI: Z. Phys. B – Condensed Matter **54**, 293 (1984)
- [Kon64] J. KONDO: Prog. Theor. Phys. **32**, 37 (1964)
- [Kot86] G. KOTLIAR, A. E. RUCKENSTEIN: Phys. Rev. Lett. **57**, 1362 (1986)
- [Kri80] H. R. KRISHNA-MURTHY, J. W. WILKINS, K. G. WILSON: Phys. Rev. **B21** 1003 & 1044 (1980)
- [Lin87] C. L. LIN, A. WALLASH, J. E. CROW, T. MIHALISIN, P. SCHLOTTMANN: Phys. Rev. Lett. **58**, 1232 (1987)
- [Mes85] A. MESSIAH: *Quantenmechanik*, Bd. 2, de Gruyter, New York, 2. Auflage 1985
- [Met53] N. METROPOLIS, A. ROSENBLUTH, M. ROSENBLUTH, A. TELLER, E. TELLER: J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953)
- [Met89] W. METZNER, D. VOLLHARDT: Phys. Rev. Lett. **62**, 324 (1989)

- [Mül89] E. MÜLLER-HARTMANN: *Z. Phys. B – Condensed Matter* **74**, 507 (1989)
- [Neg88] J. W. NEGELE, H. ORLAND: *Quantum Many-Particle Systems*, Addison-Wesley Publishing Company, Redwood City, California 1988
- [Noz74] P. NOZIÈRES: *J. Low Temp. Phys.* **17**, 31 (1974)
- [Oga90] M. OGATA, H. SHIBA: *Phys. Rev.* **B41**, 2326 (1990)
- [Ohn78] Y. OHNUKI, T. KASHIWA: *Prog. Theor. Phys.* **60**, 548 (1978)
- [Pap78] G. J. PAPADOPOULOS, J. T. DEVREESE, ED.: *Path Integrals and Their Application in Quantum, Statistical, and Solid State Physics*, Plenum Press, New York 1978
- [Per86] A. M. PERELOMOV: *Generalized Coherent States*, Springer, Berlin 1986
- [Pop83] V. N. POPOV: *Functional Integrals in Quantum Field Theory and Statistical Physics*, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht 1983
- [Pru90] T. PRUSCHKE: *Physica B* **163**, 5553 (1990)
- [Rea83] N. READ, D. M. NEWNS: *J. Phys. C*: **16**, L1055 (1983)
- [Rei77] E. M. REINGOLD, J. NIEVERGELT, N. DEO: *Combinatorial Algorithms, Theory and Practice*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey 1977
- [Sak89] O. SAKAI, Y. SHIMIZU, T. KASUYA: *J. Phys. Soc. Jpn.* **58**, 3666 (1989)
- [Sch58] J. SCHWINGER, ED.: *Selected Papers on Quantum Electrodynamics*, Dover Publications, New York 1958
- [Sch66] J. R. SCHRIEFFER, P. A. WOLFF: *Phys. Rev.* **149**, 491 (1966)
- [Sch90] K. SCHÖNHAMMER: *Phys. Rev.* **B42**, 2591 (1990)
- [Sil90] R. N. SILVER, J. E. GUBERNATIS, D. S. SIVIA, M. JARRELL: *Phys. Rev. Lett.* **65**, 496 (1990)
- [Sou91] S. M. DE SOUZA, M. T. THOMAZ: *J. Math. Phys.* **32**, 3455 (1991)
- [Ste84] G. R. STEWART: *Rev. Mod. Phys.* **56**, 755 (1984)
- [Str57] R. L. STRATONOVICH: *Sov. Phys.-Dokl.* **2**, 416 (1957)

- 
- [Suh65] H. SUHL: *Physics* **2**, 39 (1965)
- [Suh66] H. SUHL: *Phys. Rev.* **141**, 483 (1966)
- [Suz93] M. SUZUKI: *Physica A* **194**, 432 (1993)
- [Tak93] R. TAKAYAMA, O. SAKAI: *Physica B* **186-188**, 915 (1993)
- [Tro59] H. F. TROTTER: *Proc. Am. Math. Phys.* **10**, 545 (1959)
- [Tsv83] A. M. TSVELICK, P. B. WIEGMANN: *Adv. Phys.* **32**, 453 (1983)
- [Var76] C. M. VARMA, Y. YAFET: *Phys. Rev.* **B13**, 2950 (1976)
- [Von92] W. VON DER LINDEN: *Phys. Rep.* **220**, 53 (1992)
- [Wel90] W. WELLER: *Phys. Status Solidi B* **162**, 251 (1990)
- [Wel90a] W. WELLER, T. VOJTA: Vorabdruck (1990)
- [Wil75] K. G. WILSON: *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773 (1975)
- [Wol61] P. A. WOLFF: *Phys. Rev.* **124**, 1030 (1961)
- [Zha91] X. Y. ZHANG, E. ABRAHAMS, G. KOTLIAR: *Phys. Rev. Lett.* **66**, 1236 (1991)
- [Zha91a] X. Y. ZHANG: *Mod. Phys. Lett.* **5**, 1255 (1991)

## Dank

An dieser Stelle möchte ich all denen danken, die während meiner Promotion mit dazu beigetragen haben, diese Arbeit abzuschließen.

Durch die zahlreichen Diskussionen, die vielen Ratschläge und Tips für das weitere Vorgehen gelang es **Prof. Joachim Keller** mir stets den richtigen Weg zu weisen. Dabei gab er mir immer den nötigen Freiraum zur Entwicklung eigener Ideen.

Trotz seiner vielen Projekte hatte **Thomas Pruschke** immer Zeit für meine Fragen. Bei der gemeinsamen Entwicklung des Renormierungsgruppenverfahrens habe ich vieles erst durch ihn verstanden.

**Prof. Wolfgang Weller** gab mir in mehreren Gesprächen bereitwillig Auskunft über seine Funktionalintegraltheorie. **Markus Urbanek** führte für mich einige Rechnungen mit dem von ihm entwickelten Schrankenformalismus aus.

**Toni Bauer, Birgitt Hackl, Thomas Obermeier** und **Thomas Pruschke** halfen mir beim Korrekturlesen der Arbeit. **Franz Forsthofer** nahm sogar die Mühe auf sich, einige Gleichungen nachzurechnen.

**Werner Aigner, Wolfgang Börner, Gerhard Hastreiter, Saskia Kind, Beate Paulus, Bärbel Steininger**, alle weiteren Mitglieder des Lehrstuhls Schröder und vor allem **Angela Reisser** schafften eine jederzeit angenehme Atmosphäre am Lehrstuhl.

Das Graduiertenkolleg „Komplexität in Festkörpern: Phononen, Elektronen und Strukturen“ gewährte mir über die ganze Zeit meiner Promotion die finanzielle Unterstützung und ermöglichte es mir, innerhalb und außerhalb der Universität Regensburg in Kontakt mit anderen Leuten und deren Ideen zu treten.

Meiner Frau **Irmi Seiwert** gilt ein besonderer Dank. Sie gab mir die volle Unterstützung, erinnerte mich jedoch immer rechtzeitig, daß es noch andere, wichtigere Dinge als diese Arbeit gibt.