Spektraldichten und Selbstenergie des Einstörstellen-Anderson-Modells mittels dynamischer Dichtematrixrenormierung

Rolf Faßbender

Diplomarbeit

Institut für Theoretische Physik
Universität zu Köln

April 2005

Inhaltsverzeichnis

Einleitung

Die theoretische Festkörperphysik hat zur Aufgabe, die Eigenschaften verschiedener Festkörper durch Modelle zu beschreiben. Festkörper bestehen aus einer makroskopischen Anzahl von Atomen. Dabei können die Elektronenorbitale verschiedener Atome überlappen. Die Elektronen eines einzelnen Atoms sind zu einem überwiegenden Teil stark an den Kern des Atoms gebunden (geringer Überlapp). Ein kleiner Teil kann sich nahezu frei bewegen (Valenzelektronen). Hieraus resultiert folgendes Bild eines Festkörpers. Ein starres Gitter positiv geladener Ionenrümpfe dient als Hintergrund mehr oder weniger frei beweglicher Elektronen. In Modellen berücksichtigt man den Ionenrumpfhintergrund durch ein periodisches Gitterpotential. Die Physik des Festkörpers ist im Wesentlichen durch die kinetische Energie der Elektronen, die Coulomb-Wechselwirkung der Elektronen untereinander und mit den Ionenrümpfen bestimmt. In führender Ordnung bestimmen die Valenzelektronen elektronische und magnetische Eigenschaften und gemeinsam mit Schwingungen des Gitters die thermischen Eigenschaften des Festkörpers. Deswegen ist die Untersuchung der Elektronensysteme von besonderer Bedeutung. Insbesondere, wenn starke Korrelationen zwischen den Elektronen die Eigenschaften des untersuchten Systems dominieren, ist es eine große Herausforderung, derartige Vielteilchensysteme zu behandeln. Solche Systeme nennt man *stark-korrelierte Elektronensysteme*. Eines der dabei betrachteten Modelle ist das sogenannte *Einstörstellen-Anderson-Modell (engl. Single Impurity Anderson Model SIAM).*

P. W. Anderson führte das nach ihm benannte Modell 1961 ein (siehe Ref. [1]). Es diente ursprünglich der Untersuchung physikalischer Effekte, die durch magnetische Störstellen in Metallen hervorgerufen werden, z. B. des Kondoeffekts. Seit seiner Einführung wurde das Modell mit verschiedenen analytischen und numerischen Verfahren behandelt. Die Physik des SIAM kann heute als weitgehend verstanden angesehen werden (siehe Ref. [2]).

In den letzten Jahren wird das SIAM erneut in der theoretischen Physik untersucht. Die Physik der Störstellen tritt als Kondoeffekt in sogenannten *Quantum Dots* auf. Ferner ist das Modell im Rahmen der dynamischen Molekularfeldtheorie *(engl. Dynamic Mean Field Theory DMFT)* (siehe Ref. [3]) von hervorzuhebender Bedeutung. Die DMFT ist ein aktuell oft angewandtes Verfahren zur Untersuchung stark korrelierter Elektronensysteme, welche durch das vielseitig angewendete *Hubbardmodell* beschrieben werden. Hierbei wird das weit verbreitete *Einbandhubbardmodell* im Grenzfall unendlicher Koordinationszahl Z selbstkonsistent auf das SIAM als ein effektives Modell abgebildet (siehe Ref. [4]).

Über die DMFT und die *Quantum Dots* gewinnt das Modell für die aktuelle Forschung wieder an Bedeutung. Insbesondere ist es für die DMFT vorteilhaft, die Selbstenergie anstelle der Greenfunktion zu berechnen - ihre direkte Berechnung mittels dynamischer Dichtematrixrenormierung ist Hauptaufgabe dieser Arbeit. Ein einfaches störungstheoretisches Argument zeigt, daß mittels der numerischen Berechnung der Selbstenergie eine bedeutsame Steigerung des Auflösungsvermögens im Vergleich zu bisherigen numerischen Daten zu erwarten ist. Diese Erwartung wird durch die vorliegende Arbeit bestätigt.

Neben den zur Beschreibung von Festkörpern erforderlichen theoretischen Modellen, müssen auch Methoden entwickelt werden, welche es gestatten, die Modelle auszuwerten. Seit der Entwicklung und Verbreitung von Computern sind neben analytischen Verfahren zunehmend numerische Verfahren von Bedeutung. Analytische Verfahren führen meist nur für stark vereinfachte Modelle oder in Grenzfällen zu Lösungen.

Es existieren eine ganze Reihe numerischer und analytischer Verfahren, welche alle auf Vielteilchenprobleme angewendet werden. Die *iterative Störungstheorie (engl. Iterative Pertubation Theory IPT)* erfährt ihre Grenzen, wenn nur niedrigste Ordnungen der Störungsreihenentwicklung zur Beschreibung der physikalischen Eigenschaften nicht ausreichen. Die *numerische Renormierungsgruppe (NRG)* von Wilson (vgl. Ref. [5]) erweist sich als vorteilhaft bei niedrigen Energien. Hochenergetische Eigenschaften werden durch die NRG nur unzureichend erfasst. Die *Exakte Diagonalisierung (ED)* ist durch die Systemgröße und die Rechnerperformance beschränkt und meist nur für sehr kleine Systeme verwendbar. Die *Quanten-Monte-Carlo-Methode (QMC)* ist eine häufig verwendete Methode zur Untersuchung von Vielteilchensystemen. Sie wird insbesondere für Temperaturen $T > 0$ eingesetzt. Für die QMC bildet man ein d-dimensionales Quantensystem auf ein $d+1$-dimensionales klassisches System ab, wobei das klassische System in der zusätzlichen Dimension die endlische Ausdehnung $\beta = \frac{1}{k_B T}$ besitzt. Da im Rahmen einer Pfadintergraldarstellung imaginäre Zeiten auftreten, erweist sich die Berechnung dynamischer Größen in Abhängigkeit reeller Frequenzen bei der QMC als problematisch.

Die *Dichtematrixrenormierung (DMRG)* ist ein effizientes numerisches Verfahren zur Berechnung von Zuständen und Erwartungswerten eines niedrigdimensionalen stark-korrelierten Quantensystems. Wesentlicher Aspekt ist hierbei die kontrollierte *Trunkierung*[1] des Hilbertraumes. Seit ihrer Einführung durch S. R. White 1992 (vg. Ref. [6]) hat sie sich als ein häufig verwendetes Verfahren der Vielteilchenphysik etabliert. Die DMRG war in ihrer Anwendung lange auf statische Probleme beschränkt. Die von K. A. Hallberg (Ref. [7]), S. Ramasesha (Ref. [8]) und T. D.Kühner und S. R. White (Ref. [9]) entwickelte Erweiterung der *dynamischen DMRG (dDMRG)* gestattet die Berechnung dynamischer Eigenschaften des betrachteten Systems. Die DMRG gestattet die Untersuchung des Systems auf dem gesamten Energiebereich. Sie arbeitet bei $T = 0$. Anders als die IPT ist die DMRG nicht auf analytische Vereinfachungen angewiesen. Die Systemgröße spielt eine eher untergeordnete Rolle für ihre Anwendbarkeit.

Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, das von G. S. Uhrig und C. Raas entwickelte Programm zur dDMRG so zu erweitern, daß damit die direkte Berechnung der Selbstenergie möglich ist. Die hierfür notwendigen Formeln hat G. S. Uhrig abgeleitet (siehe Ref. [10]). Die Ergebnisse sollen mit denen der direkten Berechnung der Greenfunktion verglichen und interpretiert werden.

Zum Aufbau dieser Arbeit

Im **ersten Kapitel** wird mit der Vorstellung des Einstörstellen-Andersonmodells die theoretische Grundlage der Arbeit geschaffen. Im **zweiten Kapitel** folgt eine Einführung in die (dynamische) Dichtematrixrenormierung. Es werden die zur direkten Berechnung der Selbstenergie benötigten Formeln hergeleitet.
Das **dritte Kapitel** stellt die Ergebnisse der Arbeit vor. Diese werden interpretiert und mit anderen Methoden verglichen. Eine **Zusammenfassung** rundet die Arbeit ab.

[1] Trunkierung ist aus dem Englischen *truncation* übernommen. Der Begriff bezeichnet die Reduktion der Basis eines linearen Raumes und die Projektion desselben auf diese reduzierte Basis.

Kapitel 1

Das Modell

1.1 Das Einstörstellen-Anderson-Modell

In diesem Kapitel wird das Einstörstellen-Anderson-Modell vorgestellt. In der vorliegenden Arbeit wird das SIAM mit der dynamischen Dichtematrixrenormierung (dDMRG) untersucht. Die dDMRG wird im nächsten Kapitel behandelt.

1.1.1 Beschreibung einer Störstelle in einer metallischen Umgebung

Eine Störstelle in einer metallischen Umgebung kann mittels eines allgemeinen Hamiltonoperators beschrieben werden (siehe Ref. [2]). Dieser berücksichtigt alle Elektronen und deren Wechselwirkungen untereinander und mit dem Potential des Ionengitters. Der Hamiltonoperator besitzt für N_0 Elektronen die Form

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N_0} \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + U\left(\mathbf{r}_i\right) + V_{\mathrm{imp}}\left(\mathbf{r}_i\right) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^{N_0} \frac{e^2}{\left|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\right|} \,. \tag{1.1}$$

Der erste Term in Gleichung (1.1) stellt die kinetische Energie der Elektronen dar, der zweite Term das periodische Potential des Umgebungsmetalls infolge seiner Ionenrümpfe (ohne Berücksichtigung der Störstelle). Der dritte Term repräsentiert ein additives Potential in Anwesenheit der Störstelle. Die zweite Summe ist die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen.

Analytische Methoden, beispielsweise Störungsrechnung, können aufgrund der relativ starken Coulomb-Wechselwirkung nicht eingesetzt werden. Ein Zugang gelingt mittels der *Dichte-Funktional-Theorie (DFT)*. Die DFT kann die Grundzustandseigenschaften hinreichend erfassen, solange die lokale Coulomb-Wechselwirkung nicht zu stark ist. Sie versagt jedoch bei

Übergangsmetallen (unvollständig gefüllte d-Orbitale) und bei seltenen Erden (f-Orbitale). In solchen Fällen kann auf diese Weise keine befriedigende Aussage über die Grundzustandseigenschaften, und erst recht nicht über dynamische Eigenschaften, gemacht werden.

Die Untersuchung dynamischer Eigenschaften, insbesondere des Anregungsspektrums, erfordert andere Zugänge. Eine Möglichkeit besteht darin, anstelle des vollen Hamiltonoperators (1.1) vereinfachte Modelle zu untersuchen. Solche Modelle sollten die niederenergetischen Anregungen, welche mit der Störstelle in Verbindung stehen, beschreiben. Alle für die Untersuchung der Störstelleneffekte irrelevanten Eigenschaften können dabei vernachlässigt werden.

In Metallen mit breiten Leitungsbändern, wie sie von s- oder p- Leitungselektronen herrühren, können die Elektronen als quasi unabhängige Teilchen in einem periodischen Gitter betrachtet werden. Die langreichweitige Coulomb-Wechselwirkung ist abgeschirmt, so daß die Elektronen als Quasiteilchen[1] aufgefasst werden können. Kurzreichweitige Wechselwirkungen können für breite Leitungsbänder wegen der starken Delokalisierung der Elektronen vernachlässigt werden. Die Leitungselektronen des Metalls können folglich durch einen Einteilchen-Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \tag{1.2}$$

mit Erzeugern $\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma}$ und Vernichtern $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}$ für Blochzustände $\Phi_{\mathbf{k},\sigma}(\mathbf{r})$ mit Wellenvektor $\mathbf{k}$ und Spinkomponente σ zu einer Energie $\epsilon_{\mathbf{k}}$ beschrieben werden. Erzeuger und Vernichter genügen den üblichen fermionischen Antivertauschungsrelationen

$$\{\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}\,,\,\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}',\sigma'}\} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\,\delta_{\sigma,\sigma'} \quad \text{und} \quad \{\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}\,,\,\hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'}\} = \{\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma}\,,\,\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}',\sigma'}\} = 0\,. \tag{1.3}$$

Unabhängig von den Bandberechnungen, welche zum Energiespektrum $\epsilon_{\mathbf{k}}$ führen, werden die Leitungselektronen durch eine Zustandsdichte

$$\rho_0(\epsilon) = \sum_{\mathbf{k}} \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}}) \tag{1.4}$$

charakterisiert. Im Grundzustand sind alle Zustände bis zur Fermienergie ϵ_{F} besetzt.

Die Störstelle kann nun in dieses Bild unabhängiger Teilchen eingefügt werden. Das gelingt durch die Einführung eines effektiven Potentials $V^{\mathrm{eff}}_{\mathrm{imp}}(\mathbf{r})$ aufgrund der Störstelle. Dieser Ansatz genügt für die meisten seltenen Erden und Übergangsmetalle zwar nicht zur Beschreibung magnetischer Störstellen, hilft aber bei der Formulierung eines erweiterten Modells. Die magnetischen Momente der Störstellen werden in dieser Arbeit nicht weiter berücksichtigt als

[1] Quasiteilchen sind in diesem Zusammenhang Elektronen samt ihrer Abschirmwolke.

ihre Existenz begründet wird. Der aus Gleichung (1.2) und dem effektiven Störstellenpotential zusammengesetzte Hamiltonoperator schreibt sich in der Blochdarstellung als

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\sigma} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma} \tag{1.5}$$

mit den Matrixelementen $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \langle \mathbf{k} | V^{\mathrm{eff}}_{\mathrm{imp}} | \mathbf{k}' \rangle$ des effektiven Störstellenpotentials.

Bereits in diesem Modell steckt ein Prinzip, welches einige Eigenschaften (z. B. den Kondoeffekt) realer Materie zu verstehen hilft. Das Prinzip nennt man „Prinzip der virtuellen gebundenen Zustände“. Wenn das effektive Störstellenpotential hinreichend attraktiv auf die Leitungselektronen des Metalls wirkt, so bildet es eine Resonanz oder einen virtuellen Bindungszustand innerhalb des Leitungsbandes aus. Auch bei kleineren Potentialstärken bewirkt die Störstelle eine längere Verweildauer der Elektronen in ihrer Umgebung. Die resultierende Wellenfunktion verhält sich asymptotisch jedoch wie eine Blochfunktion, ist also kein gebundener Zustand. Solche Zustände nennt man *virtuelle gebundene Zustände*. In seltenen Erden und Übergangsmetallen treten diese Zustände auf, wenn die d- bzw. f-Niveaus innerhalb des Leitungsbandes liegen. Die Existenz derartiger virtueller gebundener Zustände macht sich in der Spektraldichte bemerkbar. Es bildet sich ein schmaler Peak in der Spektraldichte an der Fermienergie aus. Man nennt ihn *Abrikosov-Suhl-Resonanz (ASR)* oder auch *Kondo-Peak*. Die Elektronen werden an der Störstelle resonant gestreut. Im Rahmen der phänomenologischen Fermiflüssigkeitstheorie kann das niederenergetische Verhalten des Systems ebenso verstanden werden (siehe Ref. [2]). Der Kondopeak resultiert demzufolge von Quasiteilchen-Anregungen mit relativ schwachen Wechselwirkungen ($\sim k_B T_K$) untereinander: Die Spektraldichte der Quasiteilchen besitzt eine Resonanz an der Fermienergie. Die beiden Beschreibungen als lokale Fermiflüssigkeit und als Einteilchen-Beschreibung einer Störstelle mit virtuellen gebundenen Zuständen sind äquivalent.

1.1.2 Das Einstörstellen-Anderson-Modell

Die Kondoresonanz berechnete Anderson (siehe ref. [1]) aus einer Modifikation der atomaren d-Wellenfunktion der isolierten Störstelle durch die metallische Umgebung. Der Überlapp der d-Wellen und der Blochwellen, auch Hybridisierung genannt, ist gegeben durch das Matrixelement

$$V_{\mathbf{k}} = \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k}\mathbf{d}_\delta} \langle \Phi_{\mathrm{d}} | \hat{H} | \Psi_{\mathbf{d}_\delta} \rangle \tag{1.6}$$

mit der Wellenfunktion Φ_{d} des d-Levels der Störstelle, den Wannierfunktionen $\Psi_{\mathbf{d}_\delta}$ der Leitungselektronen an der Stelle $\mathbf{d}_\delta$ sowie dem Hamiltonoperator (1.1).

Der resultierende Hamiltonoperator lautet

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_{\mathrm{d}} \hat{d}^{\dagger}_{\sigma} \hat{d}_{\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left(V_{\mathbf{k}} \hat{d}^{\dagger}_{\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + V^{*}_{\mathbf{k}} \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{d}_{\sigma} \right) \tag{1.7}$$

mit der d-Level Energie ϵ_{d}, den Elektronenerzeuger $\hat{d}^{\dagger}_{\sigma}$ und Elektronenvernichter $\hat{d}_{\sigma}$ an der Störstelle. Der Hamiltonoperator (1.7) beschreibt das sogenannte *wechselwirkungsfreie Anderson-Modell*. Zu beachten ist, daß der d-Zustand und die c-Zustände nicht orthogonal sind. Dieser Umstand kann jedoch meistens vernachlässigt werden und somit $\langle \mathrm{d} | \mathbf{k} \rangle = 0$ angenommen werden[2].

Um magnetische Momente der Störstelle zu berücksichtigen, führt man eine repulsive Coulomb-Wechselwirkung

$$U = \int \Phi^{*}_{\mathrm{d}}(\mathbf{r}) \Phi^{*}_{\mathrm{d}}(\mathbf{r'}) \frac{e^2}{|\mathbf{r'} - \mathbf{r}|} \Phi_{\mathrm{d}}(\mathbf{r}) \Phi_{\mathrm{d}}(\mathbf{r'}) \mathrm{d}\mathbf{r}\, \mathrm{d}\mathbf{r'} \tag{1.8}$$

zwischen Elektronen im d-Wellenzustand des Störstellenions ein. Die Wechselwirkung U kann in d-Orbitalen zwischen 1 und 7 eV betragen. Die Breite des Kondopeaks - die sogenannte Kondoenergie $k_{\mathrm{B}} T_{\mathrm{K}}$ - nimmt exponentiell mit der Wechselwirkungsstärke U ab (siehe Ref. [2, 11]). Analytische Berechnungen - Renormierungsgruppe oder Betheansatz - ergeben für die Kondotemperatur im Schrieffer-Wolff-Limes ($U \gtrapprox W = 2D$)

$$T_K \propto V \sqrt{\frac{D}{U}} \exp\left(-\pi \frac{UD}{(4V)^2} \right) . \tag{1.9}$$

Hierin gilt $V = \sqrt{\sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}}|^2}{N_c}}$ und N_c bezeichnet die Anzahl von Leitungselektronen, welche mit der Störstelle hybridisieren. Das Resultat wird exakt im Grenzfall $U \to \infty$.

Der Hamiltonoperator des vollen Anderson-Modells schreibt sich nunmehr als

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_{\mathrm{d}} \hat{n}_{\mathrm{d},\sigma} + U \hat{n}_{\mathrm{d},\uparrow} \hat{n}_{\mathrm{d},\downarrow} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left(V_{\mathbf{k}} \hat{d}^{\dagger}_{\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + V^{*}_{\mathbf{k}} \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{d}_{\sigma} \right) , \tag{1.10}$$

wobei weiterhin angenommen werden soll, daß das d-Niveau der Störstelle nicht entartet ist und somit maximal durch zwei Elektronen besetzt werden kann. Betrachtet man den exakt lösbaren atomaren Grenzfall $V_{\mathbf{k}} = 0$, in welchem die Leitungselektronen nicht an die Störstelle koppeln, so gewinnt man ein wenig Vertrautheit mit diesem Modell. Hier gibt es drei mögliche Konfigurationen des d-Zustandes:

1. Keine Besetzung: Die Energie der Störstelle beträgt $E_0 = 0$.

[2] Die Nicht-Orthogonalität kann in die Rechnungen eingebracht werden, wenn dies erforderlich wird.

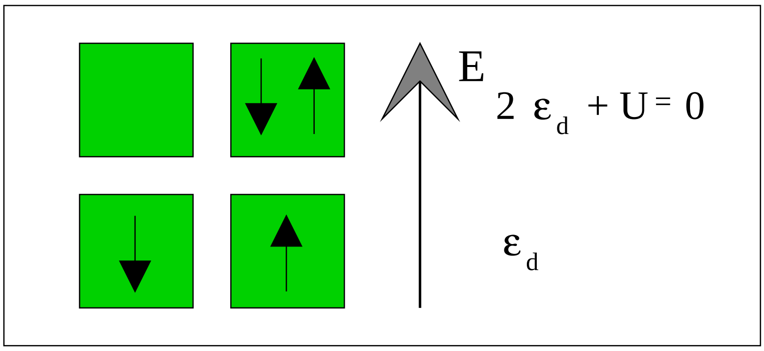

Abb. 1: Die Energieniveaus einer Störstelle.
Die zugehörigen Energien sind abhängig von der Besetzung der Störstelle durch maximal zwei Elektronen angegeben. In dem in dieser Arbeit betrachteten Fall des symmetrischen SIAM gilt $\epsilon_{\mathrm{d}} = -\frac{U}{2}$ und die Energien zu unbesetztem und zweifach besetztem Level sind gleich.

2. Einfache Besetzung: Die Energie der Störstelle beträgt $E_{1,\sigma} = \epsilon_{\mathrm{d}}$ mit $\sigma = \uparrow, \downarrow$.

3. Doppelbesetzung: Die Energie der Störstelle beträgt $E_2 = 2\epsilon_{\mathrm{d}} + U$.

Dieser Sachverhalt ist in Abbildung **1** dargestellt. Für den Fall, daß die Einfachbesetzung den Grundzustand darstellt, ist er zweifach entartet. Der Grundzustand besitzt dann ein lokalisiertes magnetisches Moment. Die Bedingung für die Existenz eines solchen Momentes in diesem Grenzfall lautet also $\epsilon_{\mathrm{d}} \leq \epsilon_{\mathrm{F}}$ und $\epsilon_{\mathrm{d}} + U \geq \epsilon_{\mathrm{F}}$. Es erweist sich damit als vorteilhaft, ein Elektron in diesem Zustand zu erzeugen (die orbitale Energie ϵ_{d} ist kleiner als die Fermienergie ϵ_{F}) und als unvorteilhaft ein weiteres Elektron zu erzeugen (die Energie $\epsilon_{\mathrm{d}} + U$ ist größer als die Fermienergie ϵ_{F}).

1.2 Abbildung auf eindimensionale Systeme

Die in dieser Arbeit verwendete Methode der dynamischen Dichtematrixrenormierung, welche im Fokus des folgenden Kapitels steht, ist im Allgemeinen für eindimensionale Systeme konzipiert. Daher ist es sinnvoll, den Hamiltonoperator des SIAM auf eine Kettendarstellung zu transformieren.

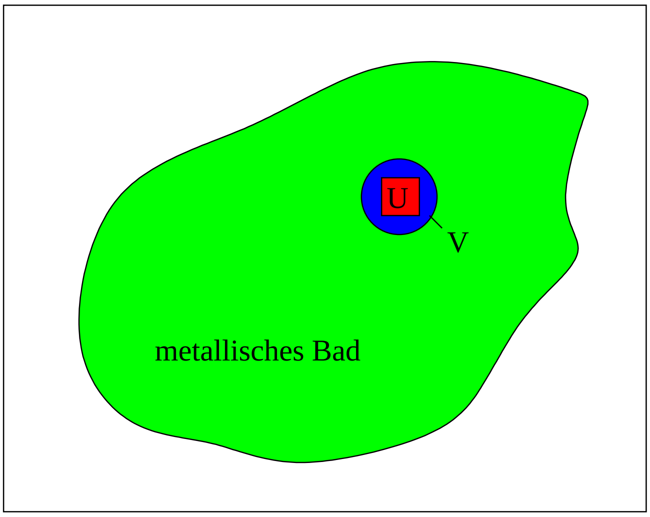

Abb. 2: Störstelle eingebettet in ein metallisches Bad.
Eine Störstelle (rot) befindet sich in einer metallischen Umgebung (grün), welche ein *Bad* darstellt.
Die Ankopplung erfolgt mittels der Hybridisierung V (blau).

1.2.1 Transformation auf eine Fermionenkette

In Abbildung **2** ist die Situation passend zum Hamiltonoperator (1.10) dargestellt. Eine Störstelle ist in eine metallische Umgebung, ein sogenanntes *Bad*, eingebettet. Bildet man das Bad auf eine Kette ab, so werden alle in der durch $V_{\mathbf{k}}$ definierten Überlagerung zu berücksichtigenden Leitungselektronen des Metalls, auf den ersten Platz einer halbunendlichen Kette abgebildet. Die Störstelle koppelt an den Anfang dieser Kette. Die Abbildung gelingt mittels eines neuen Erzeugers

$$\hat{c}^{\dagger}_{1,\sigma} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} \quad \text{mit} \quad V = \sqrt{\sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}}|^2}{N_c}} \,. \tag{1.11}$$

N_c ist die Anzahl der in $V_{\mathbf{k}}$ eingehenden Leitungselektronen. Der Beitrag der quasi-freien Leitungselektronen (Index c für *conduction, engl. für Leitung*)

$$\hat{H}_{\mathrm{c}} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \tag{1.12}$$

wird in eine neue Basis transformiert. Als Startzustand $|0\rangle$ wird der lokalisierte Einelektronenzustand, in dem die Störstelle einfach besetzt ist, gewählt. Darauf aufbauend werden die neuen

Basiszustände $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots\}$ aus der Sequenz

$$|0\rangle , \hat{H}_\mathrm{c} |0\rangle , \hat{H}_\mathrm{c}^2 |0\rangle , \hat{H}_\mathrm{c}^3 |0\rangle , \dots \tag{1.13}$$

mittels eines Schmidtschen Orthogonalisierungsverfahrens konstruiert. Für den hermiteschen Operator $\hat{H}_\mathrm{c}$ liefert die Orthogonalisierung eine Rekursionsbeziehung für die neuen Basiszustände

$$|n+1\rangle = \frac{1}{\gamma_n} \left(\hat{H}_\mathrm{c} |n\rangle - |n\rangle \langle n| \hat{H}_\mathrm{c} |n\rangle - |n-1\rangle \langle n-1| \hat{H}_\mathrm{c} |n\rangle \right) . \tag{1.14}$$

Hierbei sind γ_n von $\epsilon_\mathbf{k}$ abhängige Normierungskonstanten. Die Transformation des Bades entspricht der weit verbreiteten Lanczos-Methode zur Tridiagonalisierung einer Matrix (vgl. Ref. [12]). In der neuen Basis ist $\hat{H}_\mathrm{c}$ tridiagonal. Das System entspricht einer *Tight-Binding-Kette*. Die Matrixelemente des Hamiltonoperators lauten

$$\langle m| \hat{H}_\mathrm{c} |n\rangle = \begin{cases} \epsilon_{n+1} , & \text{falls } m = n \\ \gamma_{n+1} , & \text{falls } m = n+1 \\ \gamma_n^* , & \text{falls } m = n-1 \\ 0 , & \text{sonst} . \end{cases} \tag{1.15}$$

Die Energien ϵ_n sind hierbei durch die Diagonalelemente definiert. In der neuen Basis lautet der Hamiltonoperator der Leitungselektronen

$$\hat{H}_\mathrm{c} = \sum_{n,\sigma} \epsilon_n \hat{c}^\dagger_{n,\sigma} \hat{c}_{n,\sigma} + \sum_{n,\sigma} \left(\gamma_n \hat{c}^\dagger_{n,\sigma} \hat{c}_{n+1,\sigma} + \gamma_n^* \hat{c}^\dagger_{n+1,\sigma} \hat{c}_{n,\sigma} \right) . \tag{1.16}$$

Mit Gleichung (1.11) und Gleichung (1.16) kann der gesamte Hamiltonoperator (1.10) in der folgenden Form aufgeschrieben werden

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_\sigma \epsilon_\mathrm{d} \hat{n}_{\mathrm{d},\sigma} + U \hat{n}_{\mathrm{d},\uparrow} \hat{n}_{\mathrm{d},\downarrow} + \sum_\sigma \left(V \hat{d}^\dagger_\sigma \hat{c}_{1,\sigma} + V^* \hat{c}^\dagger_{1,\sigma} \hat{d}_\sigma \right) \\ &+ \sum_{n,\sigma} \epsilon_n \hat{c}^\dagger_{n,\sigma} \hat{c}_{n,\sigma} + \sum_{n,\sigma} \left(\gamma_n \hat{c}^\dagger_{n,\sigma} \hat{c}_{n+1,\sigma} + \gamma_n^* \hat{c}^\dagger_{n+1,\sigma} \hat{c}_{n,\sigma} \right) . \end{aligned} \tag{1.17}$$

Die Situation nach der Transformation ist in Abbidlung **3** dargestellt.

Die Modellparameter ϵ_n und γ_n im Hamiltonoperator sind zugleich die Kettenbruchkoeffizienten der Hybridisierungsfunktion (vgl. Ref. [12, 13]) ($z = \omega + \mathrm{i}0^+$)

$$\Gamma(z) = |V|^2 \Delta(z) = \cfrac{|V|^2}{z - \epsilon_1 - \cfrac{|\gamma_1|^2}{z - \epsilon_2 - \cfrac{|\gamma_2|^2}{z - \dots}}} . \tag{1.18}$$

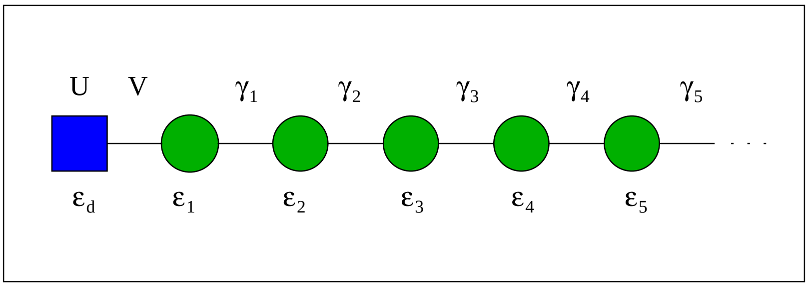

Abb. 3: Das SIAM als Fermionenkette.
Das SIAM nach der Abbildung auf eine Fermionenkette. Die Störstelle mit der repulsiven Wechselwirkung U koppelt mittels der Hybridisierung V an den Anfang der Kette. Das freie Bad ist durch die *Hüpfamplituden* γ_n charakterisiert.

$\Delta(z)$ ist hierbei das 00-Matrixelement der inversen Matrix von $z - \hat{H}_\mathrm{c}$ und damit die Greenfunktion des Bades ohne Hybridisierung und ohne Störstelle.

Die Parameter des Modells sind durch die Hybridisierungsfunktion eindeutig festgelegt[3]. Neben diesen offensichtlichen Parametern enthält das Modell jedoch noch weitere Parameter. Die Bandbreite $W = 2D$ des Leitungsbandes und die Temperatur T sind implizite Parameter des Modells.

Für den speziellen Fall, daß die Störstellenlevel symmetrisch um die Fermienergie verteilt sind ($\epsilon_\mathrm{d} = \epsilon_\mathrm{F} - \frac{U}{2} \Longrightarrow E_1 = \epsilon_\mathrm{F} - \frac{U}{2}$ und $E_2 = 2\epsilon_\mathrm{F}$) und das Band halbgefüllt und symmetrisch bezüglich der Fermienergie ($\epsilon_n = \epsilon_\mathrm{F}$ für alle n) ist, besitzt das Modell Teilchen-Loch-Symmetrie[4]. Die Störstelle ist im Grundzustand immer einfach besetzt. Im Folgenden wird die Fermienergie auf $\epsilon_\mathrm{F} = 0$ gesetzt, was lediglich eine Vereinfachung der Schreibweise darstellt. Im symmetrischen Modell hängt der Parameter ϵ_d von der Energie U ab.

In dieser Arbeit wird ausschließlich das symmetrische Modell untersucht.

1.2.2 Spinkettendarstellung des Einstörstellen-Anderson-Modells

Das durch den Hamiltonoperator (1.17) gegebene Modell kann mittels zweier Jordan-Wigner-Transformationen (siehe Ref. [14]) auf zwei über die Störstelle gekoppelte, halbunendliche Spin-

[3] Die Parameter bestimmen umgekehrt die Hybridisierungsfunktion eindeutig. Die Informationsgehalte der Parameter und der Hybridisierungsfunktion sind äquivalent.

[4] Der Hamiltonoperator ist invariant unter der Teilchen-Loch-Transformation
$\hat{c}^\dagger_{n,\sigma} \rightarrow (-1)^n \hat{c}_{n,\sigma}$ und $\hat{c}_{n,\sigma} \rightarrow (-1)^n \hat{c}^\dagger_{n,\sigma}$ wobei $\hat{d}_\sigma = \hat{c}_{0,\sigma}$ und $\hat{d}^\dagger_\sigma = \hat{c}^\dagger_{0,\sigma}$

ketten abgebildet werden. Die resultierende Darstellung ist für die verwendete numerische Methode von hohem Nutzen. Der Hilbertraum ist dann ein direktes Produkt zweidimensionaler Spin-$\frac{1}{2}$-Räume und kein Fockraum. Fockräume sind keine direkten Produkte von Hilberträumen einer Dimension. Das Modell ist in dieser Darstellung nicht so einfach mit numerischen Methoden zu untersuchen. Jeder Platz der Fermionenkette kann durch maximal zwei Elektronen entgegengesetzten Spins besetzt sein. Notiert man für die $\uparrow$-Elektronen S-Spins sowie für die $\downarrow$-Elektronen T-Spins, so kann man den Modellhamiltonoperator auf eine Darstellung als zwei halbunendliche Spin-$\frac{1}{2}$-Ketten transformieren. Sowohl für die S-Kette als auch für die T-Kette werden Transformationen benötigt (siehe Ref. [15]). Sie lauten

$$\begin{aligned}
\hat{c}_{j,\uparrow} &= \exp\left(\mathrm{i}\pi\sum_{k=0}^{j-1}\hat{\mathbf{S}}_k^+\hat{\mathbf{S}}_k^-\right)\hat{\mathbf{S}}_j^- && (1.19)\\
\hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger &= \hat{\mathbf{S}}_j^+\exp\left(-\mathrm{i}\pi\sum_{k=0}^{j-1}\hat{\mathbf{S}}_k^+\hat{\mathbf{S}}_k^-\right) && (1.20)\\
\hat{d}_\uparrow &= \hat{\mathbf{S}}_0^- && (1.21)\\
\hat{d}_\uparrow^\dagger &= \hat{\mathbf{S}}_0^+ && (1.22)
\end{aligned}$$

und analog für die T-Spins. $\hat{\mathbf{S}}$ und $\hat{\mathbf{T}}$ sind dabei die bekannten Spin-$\frac{1}{2}$-Operatoren. Nun kann der Hamiltonoperator transformiert werden. Man erhält mit $V = \gamma_0$

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \epsilon_\mathrm{d}(1+\hat{\mathbf{S}}_0^z+\hat{\mathbf{T}}_0^z)+U[(\frac{1}{2}+\hat{\mathbf{S}}_0^z)(\frac{1}{2}+\hat{\mathbf{T}}_0^z)]\\
&+ \sum_{j\geq 1}\epsilon_j(1+\hat{\mathbf{S}}_j^z+\hat{\mathbf{T}}_j^z)+\sum_{j\geq 0}[\gamma_j(\hat{\mathbf{S}}_j^+\hat{\mathbf{S}}_{j+1}^-+\hat{\mathbf{T}}_j^+\hat{\mathbf{T}}_{j+1}^-)+\gamma_j^*(\hat{\mathbf{S}}_{j+1}^+\hat{\mathbf{S}}_j^-+\hat{\mathbf{T}}_{j+1}^+\hat{\mathbf{T}}_j^-)]\\
&= \epsilon_\mathrm{d}+\frac{U}{4}+\sum_{j\geq 1}\epsilon_j+(\epsilon_d+\frac{U}{2})(\hat{\mathbf{S}}_0^z+\hat{\mathbf{T}}_0^z)+\sum_{j\geq 1}\epsilon_j(\hat{\mathbf{S}}_j^z+\hat{\mathbf{T}}_j^z)+U\hat{\mathbf{S}}_0^z\hat{\mathbf{T}}_o^z\\
&+ \sum_j[\gamma_j(\hat{\mathbf{S}}_j^+\hat{\mathbf{S}}_{j+1}^-+\hat{\mathbf{T}}_j^+\hat{\mathbf{T}}_{j+1}^-)+\gamma_j^*(\hat{\mathbf{S}}_{j+1}^+\hat{\mathbf{S}}_j^-+\hat{\mathbf{T}}_{j+1}^+\hat{\mathbf{T}}_j^-)]\,. && (1.23)
\end{aligned}$$

Das System in der Darstellung nach den Jordan-Wigner-Transformationen ist in Abbildung **4** veranschaulicht.

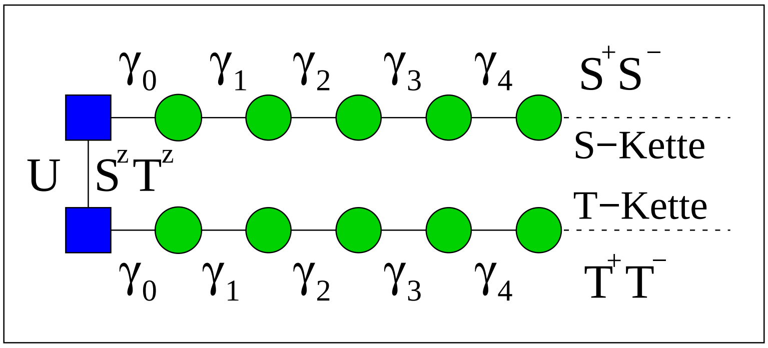

Abb. 4: Das SIAM nach der Jordan-Wigner-Transformation.
Die Störstelle koppelt die beiden halbunendlichen Ketten für die $\uparrow$- (S-Kette) und die $\downarrow$-Elektronen (T-Kette) aneinander. Die beiden Spinketten sind über die Hybridisierung $V = \gamma_0$ an die Störstelle gekoppelt.

Im Teilchen-Loch-Symmetrischen Fall, d. h. mit $\epsilon_\mathrm{d} = -\frac{U}{2}$ und $\epsilon_j = 0$ für alle j, findet man

$$
\begin{aligned}
\hat{H} &= -\frac{U}{4} + U\hat{\mathbf{S}}_0^z\hat{\mathbf{T}}_0^z + \sum_j [\gamma_j(\hat{\mathbf{S}}_j^+\hat{\mathbf{S}}_{j+1}^- + \hat{\mathbf{T}}_j^+\hat{\mathbf{T}}_{j+1}^-) + \gamma_j^*(\hat{\mathbf{S}}_{j+1}^+\hat{\mathbf{S}}_j^- + \hat{\mathbf{T}}_{j+1}^+\hat{\mathbf{T}}_j^-)] \\
&= \text{const.} \quad + \quad U\hat{\mathbf{S}}_0^z\hat{\mathbf{T}}_0^z + (V\hat{\mathbf{S}}_0^+\hat{\mathbf{S}}_1^- + V^*\hat{\mathbf{S}}_1^+\hat{\mathbf{S}}_0^-) + (V\hat{\mathbf{T}}_0^+\hat{\mathbf{T}}_1^- + V^*\hat{\mathbf{T}}_1^+\hat{\mathbf{T}}_0^-) \\
&+ \sum_{j\geq 1}[\gamma_j(\hat{\mathbf{S}}_j^+\hat{\mathbf{S}}_{j+1}^-) + \gamma_j^*(\hat{\mathbf{S}}_{j+1}^+\hat{\mathbf{S}}_j^-)] + \sum_{j\geq 1}[\gamma_j(\hat{\mathbf{T}}_j^+\hat{\mathbf{T}}_{j+1}^-) + \gamma_j^*(\hat{\mathbf{T}}_{j+1}^+\hat{\mathbf{T}}_j^-)]\,. \qquad (1.24)
\end{aligned}
$$

Hiermit steht das Modell dieser Arbeit in verschiedenen Darstellungen zur Verfügung. Der auf eine unendliche Spinette transformierte Hamiltonoperator (1.23) ist für die im folgenden Kapitel vorgestellte numerische Methode der dynamischen Dichtematrixrenormierung wesentlich einfacher zu handhaben. Der Hilbertraum zur Spinkettendarstellung weist eine einfache Struktur als direktes Produkt zweidimensionaler Räume auf.

Kapitel 2

Methodische Aspekte

2.1 Dichtematrixrenormierung

Wie in der Einleitung erwähnt wurde, sind numerische Verfahren in der theoretischen Physik weit verbreitet. Als ein effizientes numerisches Verfahren hat sich die Dichtematrixrenormierung (DMRG) etabliert. Diese Methode wird in diesem Kapitel vorgestellt.

Die DMRG wurde von S. R. White (Ref. [6, 16]) 1992 eingeführt. Zuvor hatten R. M. Noack und S. R. White (Ref. [17]) gezeigt, daß die numerische Renormierungsgruppe bei gewissen Systemen fehlschlägt. Erweiterungen der DMRG zur Berechnung dynamischer Eigenschaften wurden in den Folgejahren eingeführt. Gute Überblicke findet man in Ref. [18, 19, 20].

Dieses Kapitel gibt einen kurzen Überblick über die Dichtematrixrenormierung. Ferner wird die für die vorliegende Arbeit fundamentale Q-Funktion eingeführt. Die direkte numerische Berechnung der Selbstenergie mittels der Q-Funktion wird beschrieben.

2.1.1 Numerische Ortsraumrenormierungsgruppe

Die numerische Renormierungsgruppe (vgl. Ref. [5]) hat sich als ein effizientes Verfahren zur Berechnung kollektiver Eigenschaften eines Systems der Größe L mit einer sehr großen Zahl von Freiheitsgraden N_{Site}^{L} erwiesen. Startet man von einem mikroskopischen Hamiltonoperator, so werden Freiheitsgrade iterativ ausintegriert. Sie werden berücksichtigt, indem man den Hamiltonoperator modifiziert. Der modifizierte, oder renormierte, Hamiltonoperator enthält die relevante Physik. Der Erfolg dieses Verfahrens basiert auf der Skalenseparation. Bei kontinuierlichen Phasenübergängen bestimmt die divergierende Korrelationslänge eine natürliche langwellige, niederenergetische Skala. Fluktuationen auf kürzeren Längenskalen können ausintegriert und in einer quantitativen Modifikation der langwelligen Eigenschaften berücksichtigt werden.

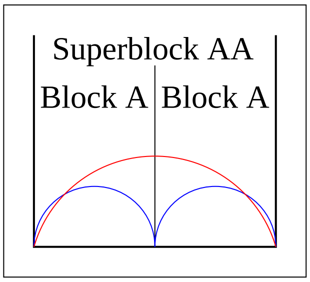

Abb. 1: Die NRG-Prozedur am Beispiel eine Kastens der Länge L.
Betrachtet man hinreichend große Systeme, so daß die Diskretisierung vernachlässigt werden kann, sieht man, daß alle Eigenzustände der kleineren Unterblöcke A (blaue Linien) Knoten an ihren Enden haben. Dann haben aber auch alle Produktzustände daraus Knoten in der Mitte des Superblock AA. Dessen Grundzustand hat dort jedoch das gezeigte Maximum (rote Linie). Die NRG versagt in diesem Fall.

Wilsons Originalarbeit (Ref. [5]) zum Kondoproblem basiert auf der kleinen Energieskala, welche durch die exponentiell abfallende Kondoenergie (1.9) gegeben ist. Energielevel weit entfernt hiervon können ausintegriert werden. Dasselbe Vorgehen versagt jedoch für ausgedehnte Systeme (siehe Ref. [17]). Für ein Teilchen in einem Kasten der Länge L beispielsweise wird der N_{Site}^{L}-dimensionale Hilbertraum aufgespannt durch $\{|i\rangle\}$, wobei der Zustand $|i\rangle$ das Teilchen am Ort i beschreibt. Die Matrixdarstellung des Hamiltonoperators ist dann banddiagonal, d. h. $\langle i|\,\hat{H}\,|i\rangle = 2$ und $\langle i|\,\hat{H}\,|i \pm 1\rangle = -1$. Nun kann die folgende NRG-Prozedur angewandt werden:

1. Wechselwirkungen eines Startuntergitters A der Länge l (Block) werden beschrieben durch einen Blockhamiltonoperator $\hat{H}_{\mathsf{A}}$ auf einem M-dimensionalen Hilbertraum.

2. Bilde einen Superblock AA der Länge $2l$ mit Hamiltonoperator $\hat{H}_{\mathsf{AA}}$ aus zwei Blöcken. $\hat{H}_{\mathsf{AA}}$ agiert auf einem M^2-dimensionalen Hilbertraum.

3. Diagonalisiere $\hat{H}_{\mathsf{AA}}$ um die M niedrigsten Eigenwerten und ihre Eigenzustände zu berechnen.

4. Projiziere $\hat{H}_{\mathsf{AA}}$ auf den reduzierten Hilbertraum (Trunkierung), welcher aufgespannt wird durch die M Eigenzustände zu den niedrigsten Eigenwerten. $\hat{H}_{\mathsf{AA}} \rightarrow \hat{H}_{\mathsf{AA}}^{\mathsf{proj}} = \hat{H}_{\mathsf{A}}^{\mathsf{neu}}$

5. Starte erneut mit Schritt 2 aber mit vergrößerter Blocklänge $l^{\mathsf{neu}} = 2l$ bis die gewünschte Systemgröße erreicht ist.

Die entscheidende Idee bei diesem Vorgehen ist das Herausgreifen der M Eigenzustände von $\hat{H}_{\mathrm{AA}}$ zu den kleinsten Eigenwerten. Diese Trunkierung basiert auf der Annahme, daß der Grundzustand des Gesamtsystems im Wesentlichen aus niederenergetischen Zuständen kleinerer Blöcke gebildet werden kann. Die Annahme ist bei einem Teilchen in einem Kasten der Länge L falsch, wie in Abbildung **1** veranschaulicht wird.

Im oben definierten Algorithmus wird in jedem Iterationsschritt dieselbe Zahl an Basiszuständen beibehalten. Folglich sind die Rechenzeit und die benötigte Speicherkapazität bei einer Umsetzung mittels Computer für jeden Schritt gleich. Die Gesamtrechenzeit ist linear in der Systemgröße L.

Ausgehend von obiger Analyse kann nunmehr die DMRG verstanden werden. Um zu erkennen, welche Zustände beibehalten werden müssen, um den größeren Block zu beschreiben, wird dieser Block in eine Umgebung (*engl. Environment*) eingebettet. Die Umgebung ahmt den thermodynamischen Grenzfall nach.

2.1.2 Dichtematrizen und Trunkierung des Hilbertraumes

Betrachtet man ein System der Länge l mit M^{S}-dimensionalem Hilbertraum und Basis $\{|m_l^{\mathrm{S}}\rangle\}$, so besitzt der Hamiltonoperator $\hat{H}_l$ die Matrixelemente $\langle m_l^{\mathrm{S}}|\,\hat{H}_l\,|\tilde{m}_l^{\mathrm{S}}\rangle$. Ein solches System nebst den relevanten Operatoren nennt man einen *Systemblock*. Fügt man nun einen weiteren Platz zum System hinzu, wird $\hat{H}_{l+1}$ in der Produktbasis $\{|m_{l+1}^{\mathrm{S}}\rangle\} \equiv \{|m_l^{\mathrm{S}}\rangle\,|\sigma^{\mathrm{S}}\rangle\}$ mit den N_{Site} Einplatzzuständen $|\sigma^{\mathrm{S}}\rangle$ des hinzugefügten Platzes notiert.

Der thermodynamische Grenzfall wird approximiert durch die Kombination des Systems mit einem analog aufgebauten Umgebungsblock[1] der Größe l'. Insgesamt erhält man einen Superblock der Größe $l + l' + 2$.

Die beste Approximation des Grundzustands im thermodynamischen Grenzfall ist der Grundzustand des Superblocks. Durch Diagonalisierung des Hamiltonoperators erhält man den Grundzustand

$$
\begin{aligned}
|\Psi\rangle &= \sum_{m^{\mathrm{S}}=1}^{M^{\mathrm{S}}} \sum_{\sigma^{\mathrm{S}}=1}^{N_{\mathrm{Site}}} \sum_{\sigma^{\mathrm{E}}=1}^{N_{\mathrm{Site}}} \sum_{m^{\mathrm{E}}=1}^{M^{\mathrm{E}}} \Psi_{m^{\mathrm{S}}\sigma^{\mathrm{S}}m^{\mathrm{E}}} \left|m^{\mathrm{S}}\sigma^{\mathrm{S}}\right\rangle \left|m^{\mathrm{E}}\sigma^{\mathrm{E}}\right\rangle \\
&\equiv \sum_{i}^{N^{\mathrm{S}}} \sum_{j}^{N^{\mathrm{E}}} \Psi_{ij}\,|i\rangle\,|j\rangle \qquad (2.1)
\end{aligned}
$$

mit $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$. Hierin ist $\Psi_{m^{\mathrm{S}}\sigma^{\mathrm{S}}\sigma^{\mathrm{E}}m^{\mathrm{E}}} = \langle m^{\mathrm{S}}\sigma^{\mathrm{S}}m^{\mathrm{E}}\sigma^{\mathrm{E}}|\Psi\rangle$. $\{|m^{\mathrm{S}}\sigma^{\mathrm{S}}\rangle\} \equiv \{|i\rangle\}$ und $\{|m^{\mathrm{E}}\sigma^{\mathrm{E}}\rangle\} \equiv$

[1] Der hochgestellte Index gibt stets an, ob es sich um eine Größe des Systems (S) oder der Umgebung (E) handelt.

$\{|j\rangle\}$ sind die orthonormalen Produktbasen von System und Umgebung mit Dimensionen[2] $N^{\mathrm{S}} = M^{\mathrm{S}} N_{\mathrm{Site}}$ und $N^{\mathrm{E}} = M^{\mathrm{E}} N_{\mathrm{Site}}$.

Jetzt muß eine Trunkierungsvorschrift definiert werden, welche es gestattet, die Basis des Systems in kontrollierter und wohldefinierter Weise zu reduzieren. Dabei wird die Dimension des erweiterten Systemblocks von N^{S} auf $M^{\mathrm{S}} \leq N^{\mathrm{S}}$ verkleinert. Es gilt also gewisse M^{S} Basisvektoren auszuwählen. Gleich drei Argumentationsstränge führen zur gleichen Vorschrift. Alle basieren auf Dichtematrix-Eigenschaften. Hier wird nur eine Argumentation aufgegriffen, die Optimierung der Wellenfunktion (siehe Ref. [6, 16]). Die anderen sind die *Optimierung der Erwartungswerte* nach S. R. White (Ref. [21]) und die *Optimierung des Entanglement* nach J. Gaite (Ref. [22, 23]), J. I. Latorre (Ref. [24]) und T. J. Osborne und M. A. Nielsen (Ref. [25]). Gesucht wird eine optimal approximierte Wellenfunktion $|\phi\rangle$. Das reduzierte System soll nur durch M^{S} orthonormale Basisvektoren $|\alpha\rangle = \sum_i u_{\alpha i} |i\rangle$ aufgespannt werden, so daß mit

$$|\phi\rangle = \sum_{\alpha=1}^{M^{\mathrm{S}}} \sum_{j=1}^{N^{\mathrm{E}}} a_{\alpha j} |\alpha\rangle |j\rangle \tag{2.2}$$

der Abstand

$$\| \, |\Psi\rangle - |\phi\rangle \, \| \tag{2.3}$$

minimiert wird. Dieses Problem kann sehr kompakt durch Zerlegung in singuläre Werte gelöst werden (siehe Ref. [6, 16]). Der Einfachheit wegen seien reelle Koeffizienten angenommen. Dann muss folgende Größe minimiert werden:

$$F := 1 - 2 \sum_{\alpha ij} \Psi_{ij} a_{\alpha j} u_{\alpha i} + \sum_{\alpha j} a_{\alpha j}^2 \, . \tag{2.4}$$

Die Ψ_{ij} sind in Gleichung (2.1) und die α_{ij} in Gleichung (2.2) als Entwicklungskoeffizienten eingeführt worden. Die $u_{\alpha i}$ sind die Koeffizienten der Entwicklung der Basisvektoren $|\alpha\rangle$ nach $\{|i\rangle\}$. Die Minimierung von F erfolgt unter Variation der $a_{\alpha j}$ und $u_{\alpha j}$. Stationärität nach den $a_{\alpha j}$ führt auf $a_{\alpha j} = \sum_i \Psi_{ij} u_{\alpha i}$ und somit muß

$$1 - \sum_{\alpha ii'} u_{\alpha i} \rho_{ii'} u_{\alpha i'} \tag{2.5}$$

am globalen Minimum des Abstandes (2.3) stationär sein. Hierbei wurden die Dichtematrixkoeffizienten

$$\rho_{ii'} = \sum_j \Psi_{ij} \Psi_{i'j} \tag{2.6}$$

[2] Es gilt im Allgemeinen $N^{\mathrm{E}} \neq N^{\mathrm{S}}$.

eingeführt. In der Stationarität des Ausdrucks (2.5) findet sich das Rayleigh-Ritz-Prinzip wieder, wenn die $|\alpha\rangle$ die Eigenvektoren der Dichtematrix sind. In der Eigenbasis der Dichtematrix bedeutet die Bestimmung des globalen Minimums nunmehr nichts anderes als die Wahl der M^{S} Eigenvektoren $|w_\alpha\rangle$, die den höchsten Eigenwerten w_α der Dichtematrix[3] zugeordnet sind. Eine Entwicklung von $|\Psi\rangle$ und $|\Phi\rangle$ nach der Eigenbasis der Dichtematrix führt auf den minimalen Abstand

$$\| \, |\Psi\rangle - |\phi\rangle \, \|^2 = 1 - \sum_{\alpha=1}^{M^{\mathrm{S}}} w_\alpha = \epsilon_\rho \leq 1 \, . \tag{2.7}$$

Das Variationsprinzip für die Wellenfunktion führt auf die Trunkierungsvorschrift, die Eigenvektoren zu den M^{S} größten Eigenwerten der Dichtematrix für die reduzierte Basis auszuwählen. Damit werden die zur Beschreibung des Grundzustandes relevanten Teile des Hilbertraumes erfaßt. Relevant sind die Gebiete mit der größten „Dichte“.

2.1.3 Algorithmus für endliche und unendliche Systeme

Algorithmus für unendliche Systeme

Der Algorithmus für unendliche Systeme (vgl. Ref. [6]) kann jetzt formuliert werden. Hier sei angenommen, daß ausschließlich Grundzustandseigenschaften betrachtet werden. Andernfalls werden als *Zielzustände* der DMRG neben dem Grundzustand $|0\rangle$ auch andere, beliebige Zustände $\{|\upsilon_i\rangle\}$ berechnet. Der *DMRG-Vektor*, aus welchem die Dichtematrix gebildet wird, ist dann eine Linearkombination aller Zielzustände $|\Psi\rangle = \sum_i \theta_i \, |\upsilon_i\rangle + \theta_0 \, |0\rangle$. In diesem Fall werden die zur Beschreibung aller Zielzustände relevanten Teile des Hilbertraumes bei der Trunkierung berücksichtigt. Dann kann der Algorithmus wie folgt notiert werden (siehe Abbildung **2**):

1. Bilde einen Systemblock S der Größe l mit der Hilbertraumdimension M^{S} und Basis $\{|m_l^{\mathsf{S}}\rangle\}$. Der Hamiltonoperator $\hat{H}_l^{\mathsf{S}}$ und sonstige Operatoren im Block seien bekannt in dieser Basis. Bilde auf die gleiche Weise einen Umgebungsblock E der Länge l'.

2. Erweitere den Systemblock um einen Platz zum neuen Systemblock S'. Die Dimension des Hilbertraumes ist nun $N^{\mathsf{S}} = M^{\mathsf{S}} N_{\mathsf{Site}}$ mit Basis $\{|m_l^{\mathsf{S}}\sigma\rangle\}$. Der Hamiltonoperator $\hat{H}_{l+1}^{\mathsf{S}}$ kann in dieser Basis explizit als Matrix ausgedrückt werden. Die Matrix wird aber nur in der exakten Anfangsphase explizit bestimmt. Verfahre ebenso mit dem Umgebungsblock E $\rightarrow$ E' der Länge $l' \rightarrow l' + 1$.

3. Bilde den Superblock aus S' und E' mit der Hilbertraumdimension $N^{\mathsf{S}} N^{\mathsf{E}}$.

[3] Alle Eigenwerte einer Dichtematrix sind ≥ 0 und ihre Summe ist 1.

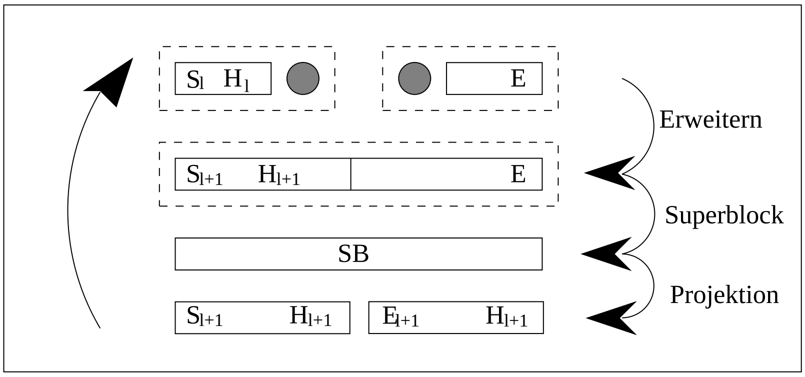

Abb. 2: DMRG-Algorithmus für unendliche Systeme.
Der Aufbau erfolgt aus der „Mitte" heraus, d. h. man beginnt mit den äußeren Kettenplätzen und baut zwischen diesen sukzessive weitere Plätze ein, zuletzt wird die Störstelle eingefügt. Die Projektion ist Teil der Trunkierung.

4. Bestimme von $\hat{H}_{l+l'+2}$ den Grundzustand $|\Psi\rangle$. Das ist der rechenaufwendigste Teil des Algorithmus. Hier wird die Lanczos-Methode [26, 27] oder die Davidson-Methode [28] verwendet. Nur die Grundzustandsenergie und der Grundzustandsvektor werden berechnet. Wenn auch andere Zielzustände als der Grundzustand betrachtet werden, müssen sie ebenfalls berechnet werden.

5. Bilde die reduzierte Dichtematrix $\hat{\rho} = \mathsf{Tr}_\mathsf{E} |\Psi\rangle \langle\Psi|$ (die Spur erstreckt sich über den Umgebungsblock, dessen Zustände werden auf diese Weise ausintegriert) und bestimme ihre Eigenbasis $\{|w_\alpha\rangle\}$ geordnet nach der Größe ihrer Eigenwerten w_α (mittels Standardalgorithmen). In der Produktbasis von S' werden die Matrixelemente $\left\langle m_l^\mathsf{S}\sigma \middle| m_{l+1}^\mathsf{S} \right\rangle$ als Spaltenvektoren in der $N^\mathsf{S} \times M^\mathsf{S}$-Matrix $\hat{\mathbf{T}}$ (Projektor) verwendet. Verfahre genauso für den Umgebungsblock.

6. Projiziere den Systemblock und alle auf ihm wirkenden relevanten Operatoren (insbesondere $\hat{H}_{l+1}$ auf die neue reduzierte Basis (aus den Eigenvektoren zu den M^S größten Eigenwerten von $\hat{\rho}$). D.h. $\hat{H}_{l+1}^{\mathsf{proj}} = \hat{\mathbf{T}}^\dagger \hat{H}_{l+1} \hat{\mathbf{T}} \to \hat{H}_{l+1}$. Verfahre genauso für den Umgebungsblock und starte erneut bei Schritt 2 bis die gewünschte Systemlänge erreicht ist. In jedem Durchlauf wächst die Systemblockgröße um einen Platz, die Superblockgröße um zwei.

7. Berechne, nachdem die gewünschte Systemblockgröße erreicht ist, die gewünschten Grundzustandseigenschaften aus $|\Psi\rangle$. Dieser Schritt kann auch bei jeder Systemlänge vorgenommen

werden.

Für spiegelsymmetrische Systeme können Umgebungs- und Systemblock als Spiegelungen betrachtet werden. Nur der Aufbau eines Blockes muß explizit erfolgen.
Nicht nur der Grundzustand ist hier als betrachteter Zustand möglich. Jeder aus der Matrixdiagonalisierung berechenbare Zustand kann als *Zielzustand* betrachtet werden. Die Algorithmen ermöglichen jedoch nur eine begrenzte Anzahl an Zielzuständen zu berechnen.

Algorithmus für endliche Systeme

In vielen Problemen liefert die DMRG für unendliche Systeme keine befriedigenden Ergebnisse. Die Ursachen hierfür sind, daß mit der Vergrößerung des Systems und der damit verbundenen steigenden Dimension des Hilbertraumes die Genauigkeit der Approximation durch eine reduzierte Basis verloren geht und daß anfangs verursachte Fehler nicht mehr korrigiert werden können.

Um derartige Probleme zu umgehen, wurde der DMRG-Algorithmus für endliche Systeme formuliert. Dessen Idee ist, den Unendliches-System-Algorithmus bei einer gegebenen Superblocklänge L zu stoppen (nach der sogenannten Aufbauphase) und in den folgenden DMRG-Schritten die Vergrößerung des Systemblocks durch eine Verkleinerung des Umgebungsblockes (Superblocklänge bleibt nunmehr konstant) zu kompensieren. Die Transformation auf die reduzierte Basis erfolgt nur im wachsenden Block. Systemblöcke aller Größen und die auf ihnen wirkenden relevanten Operatoren werden gespeichert (auch schon beim Aufbau). Die gespeicherten Blöcke werden später als Umgebungsblöcke genutzt. Wenn der Umgebungsblock eine minimale Länge erreicht (wenn er exakt wird), wechselt man die Richtung, d. h. der Umgebungsblock wächst jetzt auf Kosten des Systemblockes. Einen kompletten Wachsen-und-Schrumpfen-Durchgang des Systemblockes nennt man einen *Sweep* (engl. für Durchlauf). Der Algorithmus ist in Abbildung **3** dargestellt, dort sind die Phasen in Rechts-Links und Links-Rechts benannt. Durch dieses Vorgehen werden die Fehler durch die Trunkierung minimiert. Die reduzierte Basis für eine endliche Systemgröße wird in jedem Sweepschritt optimiert.

Der Algorithmus (siehe Abbildung **3**) kann nun wie folgt formuliert werden:

1. Führe den Unendliches-System-Algorithmus aus, bis die gewünschte Superblocklänge L erreicht ist. Speichere die Systemblöcke S_l, die zugehörigen Hamiltonoperatoren $\hat{H}_l$ und alle anderen benötigten Operatoren bei jedem Zwischenschritt.

2. Führe die Schritte $4-6$ des Unendliches-System-Algorithmus aus, beachte daß nunmehr $l \neq l'$ gilt um S_{l+1} zu erhalten und speichere das Ergebnis.

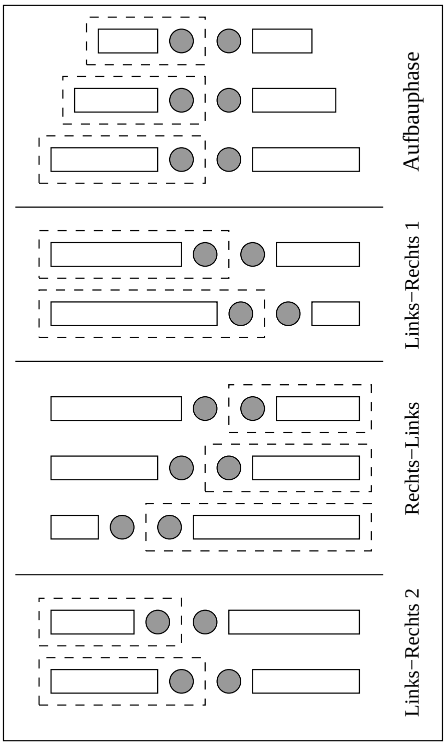

Abb. 3: DMRG-Algorithmus für endliche Systeme.
Der Aufbau erfolgt mittels des Endliches-System-Algorithmus. Das „Sweeping“ erfolgt für jede Frequenz ω einzeln.

3. Bilde aus dem neuen Systemblock S_{l+1} der Länge $l+1$, zwei einzelnen Gitterplätzen und dem Umgebungsblock $E_{L-l'-1}$ mit $l' = L - l - 2$ einen neuen Superblock der Länge L.

4. Wiederhole die Schritte 2 und 3 bis $l = L - 3$ und $l' = 1$. Das ist die Links-Rechts-Phase.

5. Tausche die Rollen von System- und Umgebungsblock (ändere die Richtung) und führe die Schritte $4 - 6$ des Unendliches-System-Algorithmus aus, speichere das Ergebnis.

6. Bilde aus S_{l-1}, zwei Gitterplätzen und $E_{l'+1}$ einen Superblock der Länge L.

7. Wiederhole die Schritte 5 und 6 bis $l = 1$. Das ist die Rechts-Links-Phase.

8. Fahre fort mit Schritt 2.

Im Anhang finden sich ein paar Anmerkungen zur Implementierung, wie sie für die vorliegende Arbeit verwendet wird. Mittels dieser Algorithmen können statische Eigenschaften des Grundzustandes und sonstiger Zielzustände berechnet werden. Oft ist man aber gerade an dynamischen Eigenschaften interessiert.

2.1.4 Dynamische Dichtematrixrenormierung

Die Zeittrajektorien angeregter Zustände durchlaufen einen großen Teil des Hilbertraumes (auch bei $T = 0$). Dynamische Eigenschaften physikalischer Systeme sind dominiert durch angeregte Zustände. Es scheint daher, daß die DMRG unbrauchbar ist für die Berechnung dynamischer Eigenschaften. Dennoch hat sich herausgestellt, daß die DMRG die relevanten Teile des Hilbertraumes erfassen kann. Betrachtet man einen beliebigen Operator $\hat{A}$ im Heisenbergbild $\hat{A}(t) = e^{\mathrm{i}\hat{H}(t)}\hat{A}e^{-\mathrm{i}\hat{H}(t)}$, so ist die zeitliche Korrelationsfunktion ($T = 0$) gegeben durch

$$C_{\hat{A}}(t - t') = \langle 0| \hat{A}^\dagger(t)\hat{A}(t') |0\rangle \tag{2.8}$$

und die frequenzabhängige, fouriertransformierte Spektraldichte gegeben durch

$$C_{\hat{A}}(\omega) = \sum_n |\langle n| \hat{A} |0\rangle|^2 \delta(\omega - E_n)\,. \tag{2.9}$$

$|n\rangle$ sit eine Eigenbasis des Hamiltonoperators mit Energieeigenwerten E_n. $C_{\hat{A}}(\omega)$ kann über eine retardierte Greenfunktion $G_{\hat{A}}(\omega + \mathrm{i}\eta)$ ausgedrückt werden

$$C_{\hat{A}}(\omega) = \lim_{\eta\to 0^+} -\frac{1}{\pi}\Im G_{\hat{A}}(\omega + \mathrm{i}\eta) \tag{2.10}$$

mit

$$G_{\hat{A}}(\omega + \mathrm{i}\eta) = \langle 0| \hat{A}^\dagger \frac{1}{E_0 + \omega + \mathrm{i}\eta - \hat{H}} \hat{A} |0\rangle\ . \tag{2.11}$$

Die Verbreiterung η ist eine infinitesimale positive Zahl. Sie muß aus mathematischen Gründen (sonst wären G beziehungsweise C nicht eindeutig definiert) eingeführt werden[4]. Den vollen Propagator erhält man letztlich durch den Grenzübergang $\eta \to 0$

$$G_R(\omega) = \lim_{\eta\to 0} G(\omega + \mathrm{i}\eta)\,. \tag{2.12}$$

In der DMRG spielt η mehrere Rollen. Erstens stellt es die Kausalität in Gleichung (2.11) sicher. Zweitens führt es zu endlichen Lebenszeiten von Anregungen $\tau \propto 1/\eta$. Damit wird

[4]Aber auch aus numerischen Gründen ist η notwendig. Bei $\eta = 0$ ist die inverse Matrix zu $\hat{H}$ singulär und kann nicht berechnet werden

vermieden, daß die Anregungen in endlichen Systemen bis zum Rand gelangen und dort unerwünschte Effekte hervorrufen. Das bedeutet, daß η zu einer Verbreiterung von $G_{\hat{A}}(\omega)$ des endlichen Systems als einer Art *thermodynamischen Grenzwert* führt. In der Numerik kann nur ein endliches System betrachtet werden. Dessen Spektraldichte besteht aus diskreten δ-Peaks. Die Überlagerung verbreiterter δ-Peaks kann bei einer hinreichenden Dichte der Peaks als kontinuierliche Funktion aufgefasst werden. Die Verbreiterung η gestattet also das Spektrum (nach der Entfaltung) als kontinuierlich ($N \to \infty$) zu interpretieren (siehe Ref. [29]). Die berechneten Daten sind mit einer Lorentzkurve

$$G_{\hat{A}}(\omega + i\eta) = \frac{1}{\pi} \int \mathrm{d}\omega' \, G_{\hat{A}}(\omega) \frac{\eta}{(\omega - \omega')^2 + \eta^2} \tag{2.13}$$

gefaltet.

Summenregeln stellen nützliche Relationen dar (siehe Ref. [30, 31]). Sie können zur Überprüfung der berechneten Daten herangezogen werden. Die wichtigste Summenregel ist in diesem Zusammenhang

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\,\omega C_{\hat{A}}(\omega) = \langle 0| \hat{A}^\dagger \hat{A} |0\rangle \ . \tag{2.14}$$

Ein weiteres wichtiges Kriterium zur Kontrolle der Güte der Ergebnisse ist das sogenannte *Pinningkriterium*. Es wird im Folgenden vorgestellt.

Das Pinningkriterium

Nach Luttinger (siehe Ref. [32, 33]) ist das Verhalten der Selbstenergie Σ einer lokalen Fermiflüssigkeit für Frequenzen nahe der Fermikante bekannt

$$\Re\Sigma(\omega + \mathrm{i}0^+) = \left(1 - \frac{1}{\mathcal{Z}}\right)\omega + \mathcal{O}(\omega^3) \tag{2.15}$$

$$\Im\Sigma(\omega + \mathrm{i}0^+) = -\beta\omega^2 + \mathcal{O}(\omega^4)\,. \tag{2.16}$$

Dabei ist $\mathcal{Z}$ das *Quasiteilchengewicht* mit $0 < \mathcal{Z} \leq 1$ und $\beta > 0$. Mittels der Dysongleichung

$$\rho(\omega) = -\frac{1}{\pi}\Im G^0(\omega - \Sigma(\omega)) \tag{2.17}$$

läßt sich aus dem Niederfrequenzverhalten der Selbstenergie (2.15) und (2.16) das Pinningkriterium herleiten

$$\rho(\omega = 0) = \rho^0(\omega = 0)\,. \tag{2.18}$$

Der Wert der Spektraldichte des wechselwirkenden Systems ($U \neq 0$) ist gleich dem Wert der freien Spektraldichte an der Fermienergie. Das Pinningkriterium und die Summenregel (2.14) stellen wertvolle Kriterien für die Beurteilung der Güte der numerisch berechneten Daten dar.

Zugänge zu dynamischen Eigenschaften über die DMRG basieren auf der Auswertung von Gleichung (2.11). Im Folgenden werden die drei gängigsten Zugänge kurz vorgestellt. In der Literatur wird dabei meist der Begriff dynamische DMRG (dDMRG) nur für die Funktionalmethode (Ref. [34]) verwendet. In der vorliegenden Arbeit wird er für alle drei Zugänge benutzt.

Lanczosmethode

Die erste Methode zur Berechnung der Greenfunktion geht auf K. A. Hallberg (Ref. [7]) zurück und ist unter dem Namen *Lanczos-* oder *Kettenbruch-Methode* bekannt. Diese Methode basiert auf der Tatsache, daß sich die Greenfunktion als Kettenbruch schreiben läßt (vgl. Ref. [35]) ($z \equiv \omega + \mathrm{i}\eta$)

$$G_{\hat{A}}(z) = \cfrac{\langle 0|\, \hat{A}^\dagger \hat{A}\, |0\rangle}{z - a_0 - \cfrac{b_1^2}{z - a_1 \cfrac{b_2^2}{z - \dots}}}. \tag{2.19}$$

Hierbei sind die Koeffizienten a_n, b_n nichts anderes als die Schmidt-Gram-Koeffizienten in der Krylov-Unterraum-Basis (siehe Ref. [12])

$$|f_{n+1}\rangle = \hat{H}\, |f_n\rangle - a_n\, |f_n\rangle - b_n^2\, |f_{n-1}\rangle \tag{2.20}$$

mit

$$\begin{aligned} |f_0\rangle &= \hat{A}\, |0\rangle \\ a_n &= \frac{\langle f_n|\, \hat{H}\, |f_n\rangle}{\langle f_n|f_n\rangle} \\ b_n^2 &= \frac{\langle f_{n-1}|\, \hat{H}\, |f_n\rangle}{\langle f_{n-1}|f_{n-1}\rangle} = \frac{\langle f_n|f_n\rangle}{\langle f_{n-1}|f_{n-1}\rangle}. \end{aligned}$$

Die Krylov-Basiszustände $|f_n\rangle$ sind dabei orthogonal. Das Verfahren entspricht einer Lanczos-Tridiagonalisierung des Hamiltonoperators $\hat{H}$. Gleichsam wird mittels einer Normierung der Lanczosvektoren $|f_n\rangle$ und einer Reskalierung der Koeffizienten a_n und b_n der Hamiltonoperator tridiagonal

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} a_0 & b_0 & & & 0 \\ b_0 & a_1 & b_1 & & \\ & b_1 & a_2 & b_2 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & & \end{pmatrix} . \tag{2.21}$$

Eine Diagonalisierung dieses Hamiltonoperators mit einer Basistransformation von $\{|f_n\rangle\}$ zu einer Eigenbasis $\{|n\rangle\}$ von $\hat{H}$ mit Eigenwerten E_n, führt auf eine andere Darstellung der Greenfunktion

$$G_{\hat{A}}(z) = \sum_n \langle 0| \hat{A}^\dagger |n\rangle \langle n| \frac{1}{E_0 + z - E_n} |n\rangle \langle n| \hat{A} |0\rangle \ . \tag{2.22}$$

Die Summe durchläuft alle Eigenzustände der Approximation. Diese Gleichung kann leicht ausgewertet werden.

Die Lanczos-Methode ist schneller als die folgenden Methoden. Sie ist aber auf kleine Systeme beschränkt. Als Zielzustände werden alle Krylov-Basis-Zustände f_i anvisiert. Rechnerressourcen bedingen somit eine Beschränkung der Systemgröße. Spektren, welche als Kettenbruch aufgebaut werden, enthalten bei kleinen Systemen *Finite-Size-Effekte.*

Korrekturvektormethode

Die Korrekturvektormethode wird für diese Arbeit verwendet. Sie wurde von S. Ramasesha 1997 (Ref. [8]) und von T. D. Kühner und S. R. White 1999 (Ref. [9]) eingeführt. Nach der Vorauswahl einer bestimmten Frequenz[5] ω definiert man einen *Korrekturvektor* als zusätzlichen Zielzustand in der DMRG

$$|c(\omega + \mathrm{i}\eta)\rangle := \frac{1}{E_0 + \omega + \mathrm{i}\eta - \hat{H}} \hat{A} |0\rangle \ . \tag{2.23}$$

Dieser Vektor ermöglicht die leichte Berechnung der retardierten Greenfunktion bei $T = 0$

$$G_A(\omega + \mathrm{i}\eta) = \left\langle 0 \middle| \hat{A}^\dagger \middle| c(\omega + \mathrm{i}\eta) \right\rangle \ . \tag{2.24}$$

Der Korrekturvektor wird dabei berechnet durch die Lösung des linearen Gleichungssystems (LGS)

$$\left(E_0 + \omega + \mathrm{i}\eta - \hat{H}\right) |c(\omega + \mathrm{i}\eta)\rangle = \hat{A} |0\rangle \ . \tag{2.25}$$

Die iterative Lösung des LGS erweist sich als der bei weitem rechenzeitintensivste Schritt der dynamischen Dichtematrixrenormierung (dDMRG). In der Implementierung stellt sich heraus, daß ca. 80% der Rechenzeit für die Berechnung des Korrekturvektors benötigt wird.

[5] Für ein ganzes Spektrum wird ein Sweep pro Frequenz vorgenommen.

Kühner und White schlugen vor, dieses nicht-hermitesche Gleichungssystem in Imaginärteil und Realteil aufzuspalten, für den Imaginärteil separat zu lösen und dann die Relation zum Realteil auszunutzen

$$\left[(E_0 + \omega - \hat{H})^2 + \eta^2\right] \Im \left|c(\omega + \mathrm{i}\eta)\right\rangle = -\eta \hat{A} \left|0\right\rangle \tag{2.26}$$

$$\Re \left|c(\omega + \mathrm{i}\eta)\right\rangle = \frac{\hat{H} - E_0 - \omega}{\eta} \Im \left|c(\omega + \mathrm{i}\eta)\right\rangle \ . \tag{2.27}$$

Dabei werden sowohl $\Im \left|c(z)\right\rangle$ als auch $\Re \left|c(z)\right\rangle$ als Zielzustände der dDMRG betrachtet. So kann das Rechnen mit komplexen Zahlen umgangen werden. Das Standardverfahren zur Lösung solcher Gleichungssysteme ist das „Konjugierte Gradientenverfahren“ (*CG, engl. conjugate gradient*) (siehe Ref. [36, 37]).

Ein solches Vorgehen nutzt die komplex-symmetrische Struktur der Matrix ($\mathbf{M} = \mathbf{M}^t$ mit komplexen Einträgen in $\mathbf{M}$) nicht aus. Im dDMRG-Programm von C. Raas, welches Grundlage der vorliegenden Arbeit ist, wird stattdessen das komplexe lineare Gleichungssystem (2.25) gelöst. Hierbei wird die nicht-hermitesche, aber komplex-symmetrische Matrix

$$\mathbf{A} = [\omega + \mathrm{i}\eta - (\hat{H} - E_0)] \tag{2.28}$$

invertiert. Alternativ wird im Programm von C. Raas (siehe Ref. [38]) und damit in dieser Arbeit auch das „Quasi-Minimum-Residuum-Verfahren“ (*QMR, engl. quasi minimum residual*) (vgl. Ref. [39]), zum Teil mit Vorkonditionierung (*PreQMR, engl. pre conditioned QMR*), eingesetzt und die Symmetrie bewußt ausgenutzt. In dieser Arbeit werden beide Verfahren, je nachdem welches bei der jeweiligen Frequenz schneller ist, verwendet. C. Raas hat die Rechenzeiten beider Verfahren für verschiedene Frequenzen verglichen. Die Ergebnisse sind in Abbildung **4** dargestellt. Bei niedrigen Frequenzen wird das PreQMR-Verfahren verwandt, bei größeren das CG-Verfahren. Erfahrungen zeigen, daß das PreQMR-Verfahren bei negativen Frequenzen schneller konvergiert. Daher wird mit diesem Verfahren bei niedrigen Frequenzen begonnen. Das PreQMR-Verfahren erweist sich oberhalb einer kritischen Frequenz ω_k als rechenintensiv. Eine sehr langsame oder mangelhafte Konvergenz ist die Ursache. Eine vorgegebene Anzahl an Iterationsschritten genügt nicht mehr, um die gewünschte Genauigkeit zu erreichen. Für Frequenzen $\omega \geq \omega_k$ wird deshalb das CG-Verfahren eingesetzt.

Das Gleichungssystem wird singulär für $\eta \to 0$. Für größere η wird die Matrix nahezu diagonal und die Berechnung erfolgt bedeutend schneller. Hier gilt es zwischen benötigter (bzw. gewünschter) Auflösung und Rechenzeit abzuwägen[6]. Es hat sich erwiesen, daß die dDMRG

[6] Ein zu kleines η führt andererseits auch dazu, daß aufgrund der endlichen Systemgröße das Spektrum nicht mehr als kontinuierlich angenommen werden kann → *Finite-Size-Effekt*. Ein zu großes η führt dazu, daß schmale Strukturen nicht mehr aufgelöst werden.

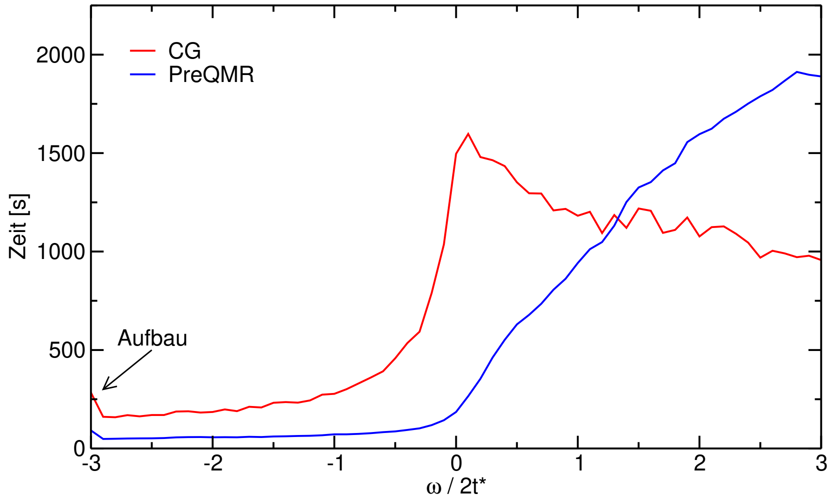

Abb. 4: Rechenzeiten bei PreQMR- und CG-Verfahren nach Raas (vgl. Ref. [38]).
Vergleich der Rechenzeiten von PreQMR- (blaue Linie) und CG (rote Linie)-Verfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme mit spärlich besetzten Matrizen. Bei negativen und hinreichend kleinen positiven Frequenzen ist das PreQMR-Verfahren schneller, bei hohen Frequenzen das CG-Verfahren.

am besten arbeitet, wenn sowohl $\Im\,|c\rangle$ als auch $\Re\,|c\rangle$ als Zielzustände berechnet werden, auch wenn wegen Gleichung (2.27) $\Re\,|c\rangle$ eigentlich nicht berechnet werden muß. Der Fehler durch die Trunkierung wird dadurch kleiner.

Die einfachste Form der Korrekturvektormethode arbeitet mit den vier Zielzuständen $|0\rangle$, $\hat{A}^\dagger\,|0\rangle$, $\Re\,|c\rangle$, $\Im\,|c\rangle$, wobei der Zweite häufig als erster *Lanczos-Vektor* bezeichnet wird[7]. Die Berechnung muß für jede Frequenz einzeln erfolgen, was zu einem großen Rechenaufwand führt. Der Ressourcenbedarf kann in Grenzen gehalten werden, indem man die Basis, welche zur Darstellung des Korrekturvektors bei einer Frequenz optimiert wurde, für die Darstellung des Korrekturvektors benachbarter Frequenzen verwendet. Das funktioniert ohne nennenswerten Fehler, falls sich der Korrekturvektor nur unbedeutend mit ω ändert.

Die Auswertung der Greenfunktion erfolgt über

$$G(\omega + \mathrm{i}\eta) = -\frac{1}{\pi}\Im\,\langle 0|\,\hat{A}^\dagger \underbrace{\frac{1}{E_0 + \omega + \mathrm{i}\eta - \hat{H}}\hat{A}\,|0\rangle}_{\text{Korrekturvektor}} = -\frac{1}{\pi}\,\langle 0|\,\hat{A}^\dagger\Im\,|c(\omega + \mathrm{i}\eta)\rangle \ . \tag{2.29}$$

[7]Im verwendeten Algorithmus wird $|\Psi\rangle = 0.4 \cdot |0\rangle + 0.2 \cdot \hat{A}^\dagger\,|0\rangle + 0.2 \cdot \Re\,|c\rangle + 0.2 \cdot \Im\,|c\rangle$ benutzt.

Jeckelmannsche Funktionalmethode

Eine weitere Methode, welche in der Literatur oft *dynamische DMRG* genannt wird[8], geht auf E. Jeckelmann (2002) (Ref. [34]) zurück. Der Zugang über den Korrekturvektor des vorigen Abschnittes bleibt dabei erhalten. Das lineare Gleichungssystem wird jedoch durch ein Funktionalminimierungsprinzip ersetzt $|A\rangle \equiv \hat{A}\,|0\rangle$

$$W_{A,\eta}(\omega,\Psi) = \langle\Psi|\,(E_0+\omega-\hat{H})^2+\eta^2\,|\Psi\rangle + \eta\,\langle A|\Psi\,\rangle + \eta\,\langle\Psi|A\,\rangle\;, \tag{2.30}$$

wobei der minimierende Zustand

$$|\Psi_{min}\rangle = \Im\,|c(\omega+\mathrm{i}\eta)\rangle \tag{2.31}$$

der Imaginärteil des Korrekturvektors ist. Dabei ist der Wert des Funktionals

$$W_{A,\eta}(\omega,\Psi) = -\pi\eta C_A(\omega+\mathrm{i}\eta)\,. \tag{2.32}$$

Die Auswertung der Greenfunktion erfolgt statt mittels Gleichung (2.29) über

$$G(\omega+\mathrm{i}\eta) = -\frac{1}{\pi}\frac{1}{\eta}\left[\langle\Im c|\,(E_0+\omega-\hat{H})^2+\eta^2\,|\Im c\rangle + \eta\,\langle\Im c|\,\hat{A}\,|0\rangle + \eta\,\langle 0|\,\hat{A}^\dagger\,|\Im c\rangle\right]\,. \tag{2.33}$$

Der dDMRG Algorithmus verläuft also genau wie bei der Korrekturvektormethode, nur wird das CG- bzw. PreQMR-Verfahren durch ein Funktionalminimierungsverfahren ersetzt. Der Vorteil ist, daß mit einer Genauigkeit ϵ des Korrekturvektors, der Funktionalwert mit ϵ^2 bedeutend genauer bekannt ist. Betrachtet man dazu den Wert des Funktionals in Abhängigkeit der Genauigkeit ϵ, so kann man in einer Taylorreihe nach ϵ entwickeln. Eine Entwicklung um das Minimum enthält keinen linearen Term und in niedrigster Ordnung ist ein quadratischer Term relevant.

2.1.5 Dynamische Dichtematrixrenormierung für das Einstörstellen-Anderson-Modell

In diesem Abschnitt werden kurz die wesentlichen Formeln, welche im Vorangegangenen vorgestellt wurden, für das Einstörstellen-Anderson-Modell (vgl. Gleichung (1.24)) notiert. Der Operator $\hat{A}$, welcher die Greenfunktion bestimmt, ist für das Modell $\hat{\mathbf{S}}_0^+$. Es interessiert die Propagation eines Elektrons, welches an der Störstelle zunächst erzeugt $\left(\hat{\mathbf{S}}_0^+\right)$ und später vernichtet $\left(\hat{\mathbf{S}}_0^-\right)$ wird. Damit lautet der Korrekturvektor ($\hat{A} \equiv \hat{\mathbf{S}}_0^+$)

$$|c(\omega+\mathrm{i}\eta)\rangle = \frac{1}{\omega+\mathrm{i}\eta-(\hat{H}-E_0)}\hat{\mathbf{S}}_0^+\,|0\rangle \tag{2.34}$$

[8] In dieser Arbeit wird der Begriff für alle Methoden benutzt.

und die retardierte Greenfunktion

$$G^{>}(\omega + \mathrm{i}\eta) = \langle 0| \hat{\mathbf{S}}_0^- \frac{1}{\omega + \mathrm{i}\eta - (\hat{H} - E_0)} \hat{\mathbf{S}}_0^+ |0\rangle \ , \tag{2.35}$$

wobei der hochgestellte Index den Beitrag positiver Frequenzen bezeichnet. Der Anteil negativer Frequenzen wird eingefügt durch

$$G(\omega + \mathrm{i}\eta) = G^{>}(\omega + \mathrm{i}\eta) + G^{<}(\omega + \mathrm{i}\eta) \tag{2.36}$$

mit

$$G^{<}(\omega + \mathrm{i}\eta) = \langle 0| \hat{\mathbf{S}}_0^+ \frac{1}{\omega + \mathrm{i}\eta + (\hat{H} - E_0)} \hat{\mathbf{S}}_0^- |0\rangle \ . \tag{2.37}$$

Im symmetrischen Modell gilt jedoch $G^{<}(\omega + \mathrm{i}\eta) = -G^{>}(-\omega - \mathrm{i}\eta)$ und die volle retardierte Greenfunktion kann vollständig aus $G^{>}(\omega + i\eta)$ gewonnen werden[9].

Als nützliches Kontrollkriterium kann die Summenregel (2.14)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega \, \rho(\omega) = 1 \tag{2.38}$$

genutzt werden.

2.1.6 Entfaltung der Rohdaten

Wie bereits erwähnt, ist der endliche Imaginärteil η aus Konvergenzgründen unerlässlich. In der Praxis führt dieser dazu, daß die berechneten Daten verbreitert sind. Die verbreiterte Spektraldichte (oder Greenfunktion) entspricht der unverbreiterten ($\eta = 0$), gefaltet mit der Lorentzkurve

$$L_\eta(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\eta}{\omega^2 + \eta^2} \ . \tag{2.39}$$

Da keine Daten bei $\eta = 0$ berechnet werden können - die nichthermitesche Matrix wird dann singulär - liefert die dDMRG Datenpunkte zu gegebenen Frequenzen ξ_i mit endlichen Verbreiterungen η_i

$$g_i = -\frac{1}{\pi} \Im G(\xi_i + \mathrm{i}\eta_i) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\eta_i \rho(\omega) \mathrm{d}\omega}{(\xi_i - \omega)^2 + \eta_i^2} \ . \tag{2.40}$$

Solche Daten nennt man *Rohdaten*. Eine Sequenz kleiner werdender η_i für jeden Wert ξ_i zu betrachten und die Werte für $\eta_i = 0$ zu extrapolieren, ist aufgrund eingeschränkter Rechnerressourcen unmöglich (siehe Ref. [40]). Deshalb wird an dieser Stelle der auf G. S. Uhrig und C.

[9] Ohne Symmetrie müßte der Teil negativer Frequenzen separat mittels dDMRG bestimmt werden.

Raas zurückgehende *Least-Bias-Entfalter* (LBE) (Ref. [29]) eingesetzt. Andere häufig verwendete Entfalter basieren auf der *Fast-Fourier-Transformation* und der *Matrixinversion*. Die Idee des LBE ist, einen Ansatz für eine kontinuierliche, nicht-negative Spektraldichte zu entwerfen. Der Ansatz sollte dabei konsistent zu den Rohdaten g_i $(i = 1 \dots p)$ sein. Ideal ist eine Kurve ohne jede Voreingenommenheit, d. h. eine Spektraldichte, welche nur auf den Rohdaten basiert. Der Informationsgehalt der Rohdaten kann gemessen werden durch seine negative Entropie

$$-S = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\omega) \ln \left(\rho(\omega)\right) \mathrm{d}\omega \,. \tag{2.41}$$

Der Ansatz mit dem geringsten Fehler (*engl. Least-Bias*) ist derjenige mit dem geringsten Informationsgehalt, welcher kompatibel zu den Rohdaten ist. Daher minimiert man $-S$ unter den p Bedingungen (2.40) und der Normierung

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\omega) \, \mathrm{d}\omega \,. \tag{2.42}$$

Mit den Lagrangemultiplikatoren λ_i für die Bedingungen (2.40) und dem Lagrangemultiplikator $\tilde{\mu}$ für die Normierung (2.42) findet man ($\delta S = 0$)

$$0 = -1 - \ln \left(\rho(\omega)\right) + \sum_{i=1}^{p} \lambda_i L_{\eta_i}(\omega - \xi_i) + \tilde{\mu} \,. \tag{2.43}$$

Das führt auf den Ansatz ($\mu = \tilde{\mu} - 1$)

$$\rho(\omega) = \exp\left(\mu + \sum_{i=1}^{p} \lambda_i L_{\eta_i}(\omega - \xi_i)\right) \,. \tag{2.44}$$

Die Lagrangemultiplikatoren sind bestimmt durch die Gleichungen (2.40) und die Normierung. Eine Beobachtung bei der Lösung ist, daß das resultierende Gleichungssystem überbestimmt ist[10]. Die Normierungsbedingung (2.42) wird daher in dieser Arbeit nicht als Gleichung des Systems genutzt, da numerische Rechnungen mit überbestimmten Gleichungssystemen problematisch sind. Anstelle einer Konvergenz tritt oft ein alternierendes Verhalten auf. Die Normierungsbedingung wird jedoch als Summenregel zur Kontrolle benutzt und verifiziert.

Der Ansatz ist positiv und kontinuierlich, was grundlegende Eigenschaften der physikalischen Spektraldichte sind.

[10] Das lineare Gleichungssystem kann mehr als eine Lösung besitzen. Für nahezu alle μ existiert eine Lösung, welche die Normierungsbedingung erfüllt. Der Algorithmus arbeitet schneller, wenn die Normierungsbedingung nicht mit berechnet wird.

Der LBE kann - bedingt durch seine Natur - nur für Funktionen ohne Vorzeichenwechsel verwendet werden. Das sind hier die Imaginärteile von Greenfunktionen. Die zugehörigen Realteile können mittels der Kramers-Kronig-Relationen (siehe Ref. [31, 41])

$$\Re G(\omega) = -\frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tilde{\omega}\frac{\Im G(\tilde{\omega})}{\omega-\tilde{\omega}} \tag{2.45}$$

$$\Im G(\omega) = +\frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tilde{\omega}\frac{\Re G(\tilde{\omega})}{\omega-\tilde{\omega}} \tag{2.46}$$

gewonnen werden. Mit $\mathcal{P}$ ist der Cauchysche Hauptwert der Integrale bezeichnet. Hierzu können Standardalgorithmen, beispielsweise das Runge-Kutta-Verfahren oder das Clenshaw-Curtis-Verfahren, verwendet werden (siehe Ref. [42]).

Die Entfaltung der Rohdaten (Stützpunkte) gelingt nicht beliebig gut (siehe Ref. [29]).

Es ist offensichtlich, daß keine Strukturen aufgelöst werden können, welche schmaler als die gewählte Verbreiterung η sind. In diesem Zusammenhang ist das Auflösungsvermögen nicht beliebig hoch.

Fehler in den Rohdaten können dazu führen, daß in den entfalteten Kurven kleine Oszillationen auftreten, sogenannte *Wiggles*[11]. Der LBE ist auf Rohdaten mit nicht zu großen Fehlern angewiesen.

Um die Überlagerung vieler Lorentzkurven als eine kontinuierliche Funktion aufzufassen, müssen bei einem starken Überlapp die Stützpunkte sehr dicht beieinander liegen. Andernfalls wird die Verbindung der Stützpunkte ebenfalls Wiggles hervorbringen. Liegen die Stützpunkte hingegen zu weit auseinander, so kann zwischen Ihnen kein verlässlicher Kurvenverlauf extrapoliert werden.

2.2 Q-Funktion und direkte Berechnung der Selbstenergie

Störstellenprobleme (z.B. das SIAM) und ihre numerischen Lösungsalgorithmen sind in jüngster Zeit wieder Gegenstand aktueller Forschung (vgl. Einleitung). Gerade in der DMFT ist man nicht primär am vollen Propagator $G_R(\omega)$ interessiert, sondern die zugehörige Selbstenergie $\Sigma(\omega)$ ist das Ziel des Interesses[12]. Die Selbstenergie kann zwar aus dem vollen Propagator berechnet werden, dies stellt jedoch eine Quelle numerischer Fehler dar. Solche Fehler treten vor allem bei kleinen Energien nahe der Fermienergie auf. Dort werden große Werte voneinander

[11] Der Begriff *Wiggles* ist aus dem Englischen übernommen und bezeichnet kleine Oszillationen und Wellen um einen „glatteren“ Graphen aufgrund einer unzureichenden Qualität der Rohdaten.

[12] Die Selbstenergie enthält die gesamte relevante Physik (siehe Ref. [31, 30, 41]).

subtrahiert um kleine Werte zu erhalten. Es ist daher wesentlich vorteilhafter, die Selbstenergie direkt zu berechnen. Die direkte Berechnung der Selbstenergie sollte wesentliche Verbesserungen der Genauigkeit ergeben. Auch sollte die Entfaltung der Rohdaten mittels des LBE bedeutend besser funktionieren. Darauf wird im Folgenden genauer eingegangen.

2.2.1 Die Q-Funktion und die Selbstenergie

Die Q-Funktion geht auf G. S. Uhrig (Ref. [10]) zurück. Sie stellt nichts anderes als eine spezielle, diagonale Einteilchen-Greenfunktion dar. Im Wesentlichen ist die Q-Funktion die uneigentliche Selbstenergie. Die Berechnung der Selbstenergie auf direktem Weg wird durch die Q-Funktion ermöglicht.

Betrachtet wird erneut das symmetrische Einstörstellen-Anderson-Modell, gegeben durch den Hamiltonoperator (1.10), welcher auch als

$$\hat{H} = \underbrace{U(\hat{n}_\uparrow - \frac{1}{2})(\hat{n}_\downarrow - \frac{1}{2}) - \mu_0 \sum_{\sigma=\uparrow\downarrow} (\hat{n}_\sigma - \frac{1}{2})}_{\hat{H}_{Imp}} \tag{2.47}$$

$$+ \underbrace{\sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} :\hat{c}^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}:}_{\hat{H}_{Bath}} + \underbrace{\sum_{\mathbf{k},\sigma} V_{\mathbf{k}}(\hat{d}^\dagger_\sigma \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + \hat{c}^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}\hat{d}_\sigma)}_{\hat{H}_{Hybr}} \tag{2.48}$$

notiert werden kann. Die Doppelpunkte im dritten Term bezeichnen die Normalordnung (siehe Ref.[41]). Mittels der Hybridisierungsfunktion

$$\Gamma(z) = \sum_{\mathbf{k}} V^2_{\mathbf{k}} \frac{1}{z - \epsilon_{\mathbf{k}}} \tag{2.49}$$

kann die freie, d.h. nicht-wechselwirkende ($U = 0$), Greenfunktion mit $z = \omega + \mathrm{i}\eta$ als

$$G_0^{-1}(z) = z + \mu_0 - \Gamma(z) \tag{2.50}$$

geschrieben werden. Ist die Selbstenergie an der Störstelle $\Sigma(z)$ bekannt, so ist der volle Propagator gegeben durch die Dysongleichung

$$G^{-1}(z) = z + \mu_0 - \Gamma(z) - \Sigma(z) = G_0^{-1}(z) - \Sigma(z)\,. \tag{2.51}$$

Aus der Definition der retardierten Greenfunktion (siehe Ref. [31])

$$G_{\hat{A},\hat{B}}(z) = \langle\langle \hat{A}|\hat{B}\rangle\rangle := -\mathrm{i}\int_0^\infty \langle\{\hat{A}(t), \hat{B}(0)\}\rangle \mathrm{e}^{\mathrm{i}zt}\mathrm{d}t \tag{2.52}$$

erhält man (siehe Anhang) mit der Q-Funktion

$$Q(z) := \langle\langle \hat{d}_\sigma(\hat{n}_{-\sigma} - \frac{1}{2}) | \hat{d}_\sigma^\dagger(\hat{n}_{-\sigma} - \frac{1}{2}) \rangle\rangle \tag{2.53}$$

die wichtige Relation

$$\Sigma(z) = \frac{U^2 Q(z)}{1 + U^2 Q(z) G_0(z)} \,. \tag{2.54}$$

Gleichung (2.54) hat einige interessante Konsequenzen:

1. Die Kenntnis über eine einzelne diagonale Greenfunktion Q erlaubt es die gesamte Selbstenergie auszurechnen, auch auf verbreiterten Daten.

2. Der volle Propagator kann direkt über die Q-Funktion ausgedrückt werden

$$G(z) = G_0(z)[1 + U^2 Q(z)] G_0(z) \,. \tag{2.55}$$

3. Es gelten Summenregeln für die Spektraldichten zu Q und Σ

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho_Q(\omega) \mathrm{d}\omega \; = \; n(n-1) \tag{2.56}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho_\Sigma(\omega) \mathrm{d}\omega \; = \; U^2 n(n-1) \,. \tag{2.57}$$

4. Q kann numerisch direkt berechnet werden, z. B. mittels der dDMRG.

2.2.2 Die Q-Funktion für das Einstörstellen-Anderson-Modell

In diesem Abschnitt wird die Q-Funktion in der Spinkettendarstellung des symmetrischen SIAM passend zum Hamiltonoperator (1.24) aufgeschrieben. Es gilt mit den im vorigen Kapitel angegebenen Transformationen (vgl. Anhang)

$$\begin{aligned} Q(z) &= \langle\langle \hat{d}_\sigma(\hat{n}_{-\sigma} - \frac{1}{2}) | \hat{d}_\sigma^\dagger(\hat{n}_{-\sigma} - \frac{1}{2}) \rangle\rangle \\ &= \langle\langle \hat{\mathbf{T}}_0^z \hat{\mathbf{S}}_0^- | \hat{\mathbf{S}}_0^+ \hat{\mathbf{T}}_0^z \rangle\rangle \,. \end{aligned} \tag{2.58}$$

Damit schreibt sich der Korrekturvektor für die dDMRG ($\hat{A} = \hat{\mathbf{S}}_0^+ \hat{\mathbf{T}}_0^z$) als

$$|c(z)\rangle = \frac{1}{z - [\hat{H} - E_0]} \hat{\mathbf{S}}_0^+ \hat{\mathbf{T}}_0^z \, |0\rangle \;. \tag{2.59}$$

Die Q-Funktion für positive Energien lautet

$$Q^>(z) = \langle 0 | \, \hat{\mathbf{T}}_0^z \hat{\mathbf{S}}_0^- \, |c(z)\rangle \;. \tag{2.60}$$

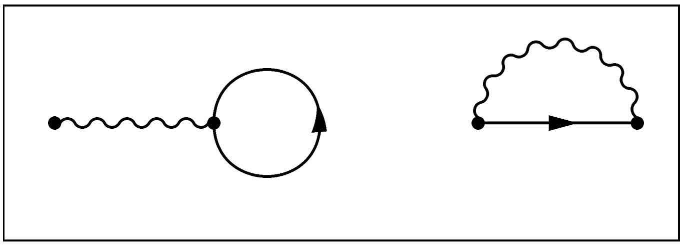

Abb. 5: Hartree- und Fock-Diagramm.
Links ist das Hartree- und rechts das Fockdiagramm dargestellt. Sie enthalten eine propagierende Linie (glatt, durchgezogen) und eine Wechselwirkungslinie (gewellt). Die propagierende Linie besitzt $\mathcal{O}(N)$ Polstellen für den freien Propagator.

Daraus lässt sich im symmetrischen Modell wiederum die gesamte Q-Funktion wie folgt bestimmen

$$Q(z) = Q^{>}(z) + Q^{<}(z) = Q^{>}(z) - Q^{>}(-z)\,. \tag{2.61}$$

Die Erweiterung des Programms zur dDMRG von C. Raas auf diesen Korrekturvektor und die Extraktion der daraus gewonnenen Daten der Q-Funktion ist Hauptaufgabe dieser Arbeit.

2.2.3 Extraktion der Spektraldichte

Mittels der im vorigen Abschnitt hergeleiteten Formeln ergeben sich drei Wege, die Spektraldichte des SIAM aus den Rohdaten der dDMRG für die Q-Funktion zu extrahieren:

1. $Q(z) \xrightarrow{G_0(z)} \Sigma(z)$ und $Q(z) \overset{G_0(z)}{\to} G(z) \overset{\text{LBE, KK}}{\to} G(\omega)$
   Es wird G entfaltet.

2. $Q(z) \xrightarrow{G_0(z)} \Sigma(z) \overset{\text{LBE, KK}}{\to} \Sigma(\omega) \to G(\omega) = \frac{G_0(\omega)}{1-\Sigma(\omega)G_0(\omega)}$
   Hier wird die Selbstenergie entfaltet.

3. $Q(z) \xrightarrow{\text{LBE, KK}} Q(\omega) \to G(\omega) = \frac{G_0(\omega)}{1+U^2 Q(\omega)G_0(\omega)}$
   Die Q-Funktion wird entfaltet.

$G_0(z)$ bezeichnet hierbei die Greenfunktion im Fermigaslimes $U = 0$. Von z abhängige Funktionen sind verbreitert, von ω abhängige unverbreitert. $G_0(z)$ bestimmt die Parameter des Modells. Mit verbreiterter freier Greenfunktion ist ihre Kettenbruchentwicklung bis zur Kettenlänge L bezeichnet.

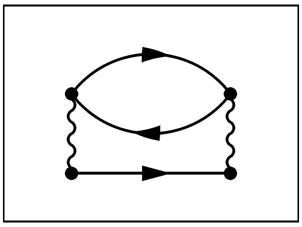

Abb. 6: Diagramm zweiter Ordnung zur Selbstenergie.
Das Diagramm enthält drei propagierende Linien (glatt, durchgezogen) und zwei Wechselwirkungslinien (gewellt). Die propagierenden Linien besitzen für den freien Propagator jeweils $\mathcal{O}(N)$ Polstellen, somit besitzt dieses Diagramm $\mathcal{O}(N^3)$ Polstellen.

Bei der Simulation einer kontinuierlichen Spektraldichte mittels der Verbreiterung η durch diskrete Datenpunkte ist offensichtlich, daß dies mit steigender Dichte von Datenpunkten besser funktioniert. Die Entfaltung selbst arbeitet umso besser, je dichter die Polstellen liegen und je besser die Datenpunkte der Rohdaten diese Polstellen erfassen. Dort liegt mehr spektrales Gewicht.

Die Greenfunktion hat für eine Kette der Länge N eine Anzahl von Polstellen von der Größenordnung $\mathcal{O}(N)$. Die Selbstenergie $\Sigma(\omega)$ hat hingegen $\mathcal{O}(N^3)$ Polstellen, was man anhand der ersten Graphen der Störungsreihe erkennen kann. Selbiges gilt auch für die Q-Funktion. Die ohnehin statischen Anteile der Diagramme 1. Ordnung der Störreihe verschwinden (vgl. Abbildung **5**) für das symmetrische SIAM

$$\Sigma^{\text{Hartree}} \quad \propto \quad \langle \hat{n}_\sigma - \frac{1}{2} \rangle = 0 \tag{2.62}$$

$$\Sigma^{\text{Fock}} \quad \propto \quad \langle \hat{c}^\dagger_{0,\uparrow} \hat{c}_{0,\downarrow} \rangle = 0\,. \tag{2.63}$$

Die Diagramme zweiter Ordnung, von welchen exemplarisch eines in Abbildung **6** dargestellt ist, enthalten drei propagierende Linien, welche für den freien Propagator jeweils $\mathcal{O}(N)$ Polstellen beinhalten. Die Gesamtspektraldichte geht aus den einzelnen Spektraldichten als Faltung hervor (siehe Ref. [43]). Somit besitzt die Selbstenergie $\mathcal{O}(N^3)$ Polstellen. Man erwartet, daß die Selbstenergie den Kontinuumslimes besser realisiert als der volle Propagator. Auch die Q-Funktion besitzt $\mathcal{O}(\mathcal{N}^{\ni})$ Polstellen. Da aber die Q-Funktion Anteile des freien Propagators enthält und die Entfaltung bei hierbei Schwierigkeiten aufgrund der zu stark variierenden Ordinaten aufweist, sind die entfalteten Q-Funktionsdaten *artefaktbehaftet*[13]. Derartige Artefakte der

[13] Die Ergebnisse im dritten Kapitel belegen diese Aussage.

Entfaltung treten auch auf, wenn die Rohdaten oszillirend große Änderungen der Ordinaten bei kleinen Änderungen der Abzissen aufweisen. Man nennt das *Entfaltungsartefakte*. Sie machen sich als Wiggles in den Kurven bemerkbar.

Der zweite Extraktionsweg sollte obiger Argumentation zur Folge bessere Resultate liefern als die anderen Wege. In dieser Arbeit werden die Begriffsbildungen dDMRG über die Greenfunktion und dDMRG über die Q-Funktion die Berechnung der Q-Funktion verwendet.

Kapitel 3

Ergebnisse

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der vorliegenden Arbeit vorgestellt. Zu Beginn sind ein paar Anmerkungen zu den gewählten Parametern angebracht. Die Auswahl der Extraktionsmethode wird getroffen und begründet. Graphen der Spektraldichte zu verschiedenen Parameterwerten werden gezeigt und interpretiert. Der Kondopeak wird untersucht, seine bekannten Eigenschaften dienen als Eichung der neuen „Methode“ der dDMRG über die Q-Funktion. Die Hubbardsatelliten werden anschließend ausgiebig analysiert. Als Energieeinheit wird immer die halbe Bandbreite D des Leitungsbandes der metallischen Umgebung gewählt.

3.1 Vorbemerkungen

3.1.1 Freie Spektraldichte und Modellparameter

Wie bereits erwähnt, besitzt das Einstörstellen-Anderson-Modell verschiedene Parameter. Diese sind durch die freie Greenfunktion G_0 festgelegt, der Parameter U wird zusätzlich gewählt. Der Hamiltonoperator (1.24) des symmetrischen Einstörstellen-Anderson-Modells nach der Jordan-Wigner-Transformation

$$\begin{aligned}\hat{H} &= U\hat{\mathbf{S}}_0^z\hat{\mathbf{T}}_0^z + (V\hat{\mathbf{S}}_0^+\hat{\mathbf{S}}_1^- + V^*\hat{\mathbf{S}}_1^+\hat{\mathbf{S}}_0^-) + (V\hat{\mathbf{T}}_0^+\hat{\mathbf{T}}_1^- + V^*\hat{\mathbf{T}}_1^+\hat{\mathbf{T}}_0^-) \\ &+ \sum_{j\geq 1}[\gamma_j(\hat{\mathbf{S}}_j^+\hat{\mathbf{S}}_{j+1}^-) + \gamma_j^*(\hat{\mathbf{S}}_{j+1}^+\hat{\mathbf{S}}_j^-)] + \sum_{j\geq 1}[\gamma_j(\hat{\mathbf{T}}_j^+\hat{\mathbf{T}}_{j+1}^-) + \gamma_j^*(\hat{\mathbf{T}}_{j+1}^+\hat{\mathbf{T}}_j^-)] \qquad (3.1)\end{aligned}$$

enthält die Parameter U, γ_i und V. Die *Hüpfamplituden* γ_i charakterisieren hierbei das metallische Bad. V bestimmt die Hybridisierung der Störstelle mit dem Bad. Die Wechselwirkungsstärke U legt die abstoßende Wechselwirkung an der Störstelle fest.

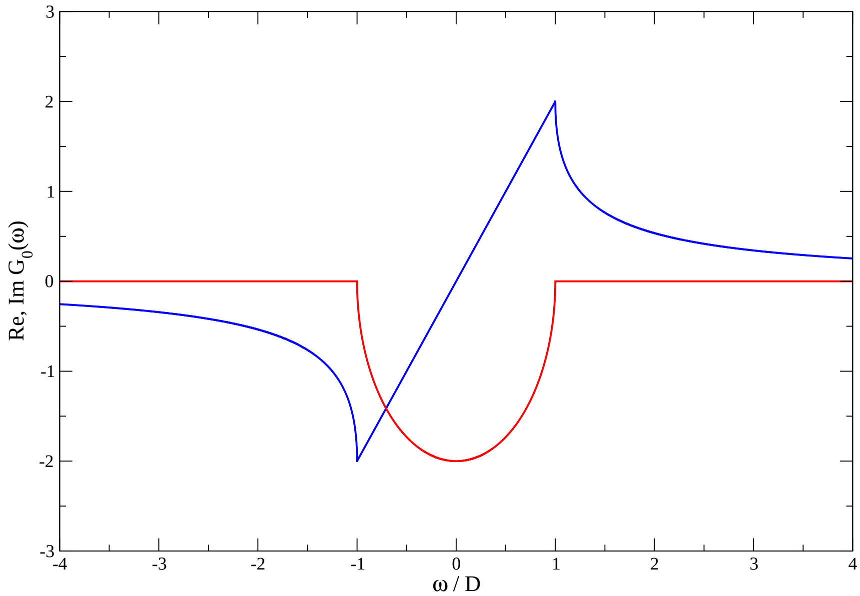

Abb. 1: Die freie Greenfunktion $G_0(\omega)$.
Der achsensymmetrische Imaginärteil (rot) ist eine normierte Halbellipse. Der Realteil (blau) ist punktsymmetrisch zum Koordinatenursprung.

Die freie Spektraldichte $\rho_0(z)$ des Bades aus Leitungselektronen kann aus der zugehörigen freien Greenfunktion, notiert als unendlicher Kettenbruch ($z = \omega + \mathrm{i}0^+$)

$$\Delta(z) = \cfrac{1}{z - \epsilon_0 - \cfrac{|\gamma_0|^2}{z - \epsilon_1 - \cfrac{|\gamma_1|^2}{z - \dots}}} \tag{3.2}$$

gewonnen werden. Die Hybridisierungsfunktion $\Gamma(z) = |V|^2\Delta(z)$ kann dann ebenso als Kettenbruch aufgeschrieben werden. Durch den freien Propagator ($U = 0$)

$$G_0(z) = \frac{1}{z - \Gamma(z)} \tag{3.3}$$

sind die Parameter über Gleichung (3.3) eindeutig festgelegt[1]. $G_0(z)$ bestimmt die freie Spek-

[1]Und umgekehrt legen die Parameter die freie Greenfunktion eindeutig fest.

traldichte

$$\rho_0(z) = -\frac{1}{\pi}\Im G_0(z)\,, \tag{3.4}$$

welche im einfachsten Fall scharfe Bandkanten aufweist. Man wählt der Einfachheit halber meist eine semi-elliptische Spektraldichte. Dies ist äquivalent zu den Parametern $\gamma_i = \frac{D}{2}$ für alle i und $V = \frac{D}{2}$. Der unendliche Kettenbruch für $G_0(\omega)$ ist dem analytischen Ausdruck einer normierten Funktion mit semi-elliptischem Imaginärteil der Breite $W = 2D$ äquivalent. Die gesamte komplexe Funktion schreibt sich als

$$G_0(\omega) = \begin{cases} \frac{2}{D^2}\left(\omega - \mathrm{sign}(\omega)\sqrt{\omega^2 - D^2}\right) & \text{für} \quad |\omega| \geq D \\ \frac{2}{D^2}\left(\omega - \mathrm{i}\sqrt{D^2 - \omega^2}\right) & \text{für} \quad |\omega| \leq D \end{cases} . \tag{3.5}$$

Dieser Arbeit liegt ausschließlich die Wahl $V = \gamma_i = \frac{D}{2}$ für alle i zugrunde. Die gewählte freie Greenfunktion ist in Abbildung **1** dargestellt.

Der letzte zu wählende Parameter ist die repulsive Wechselwirkungsstärke U. Für verschiedene Werte von U werden die Spektraldichten untersucht.

3.1.2 Wahl der methodischen Parameter

Neben den Modellparametern müssen auch die Parameter der Methode, d. h. der dDMRG, gewählt werden. Zum Einen muß die Verbreiterung η gewählt werden - sie mußte aus Konvergenzgründen eingeführt werden. Zum Anderen müssen - eine unendliche Kette kann numerisch nicht behandelt werden - die Länge der Kette L (d. h. L Fermionen oder $2L$ Spins) und die Anzahl der beibehaltenen Basisvektoren m für die Hilbertraumtrunkierung gewählt werden. Die Auswahl des Frequenzintervalls, auf welchem die Green- bzw. die Q-Funktion berechnet werden soll, ist schließlich auch noch zu treffen. Hierzu muß ebenfalls die Rasterung des Intervalls gewählt werden.

Die Auswahl der Frequenzen ω muß dabei so erfolgen, daß einerseits genügend dicht Stützstellen für eine „kontinuierliche" Green- oder Q-Funktion berechnet werden. Andererseits müssen hinreichend breite Intervalle $I = [-B; B]$ betrachtet werden, damit alle relevanten Eigenschaften erfasst werden. In der vorliegenden Arbeit finden Intervallbreiten Verwendung, welche an den Modellparameter U angepasst wurden mit Schrittweiten $\Delta\omega = 0.05D$ oder $\Delta\omega = 0.1D$.

Das Spektrum einer endlichen Kette besteht aus δ-Peaks, es ist also nicht kontinuierlich. Die Verbreiterung η erlaubt es aber, das Spektrum nach der Entfaltung als kontinuierlich zu interpretieren. Dabei muss η groß genug gewählt werden, um nicht die feinen Peak-Strukturen aufgrund der endlichen Kettenlänge aufzulösen (*Finite-Size-Effekte*). Eine zu große Wahl von η

führt hingegen zu einer Ausschmierung physikalisch relevanter Peak-Strukturen. Als eine gute Wahl hat sich

$$\eta \cong \Delta\omega \geq \frac{2B}{L} \tag{3.6}$$

erwiesen. Peaks, deren Breiten schmaler als η sind, können nicht aufgelöst werden (siehe Ref. [29]). Insbesondere hat die Wahl von η und den Frequenzabständen $\Delta\omega$ Einfluß auf die LBE, welche aufgrund unvermeidbarer Fehler in den Rohdaten nicht für beliebig dichte Stützstellen und Verbreiterungen verlässliche Werte liefert.

Die Wahl der Kettenlänge L muß so erfolgen, daß Finite-Size-Effekte vermieden werden. Insbesondere muß die Kette umso länger gewählt werden, je kleiner die Verbreiterung η gewählt wird. Hierdurch entsteht eine - Rechnerressourcen bedingte - Restriktion im Auflösungsvermögen. In der vorliegenden Arbeit wurden Kettenlängen von $L = 120$ bis zu $L = 200$ betrachtet. Zugleich wird der Hilbertraum mit längeren Ketten höherdimensional $\dim \mathcal{H} = 2^{2L}$ und somit der Fehler durch die Trunkierung des Hilbertraumes größer. Eine Kompensation dieses Fehlers ist durch eine größere Anzahl m beibehaltener Basisvektoren möglich. Der Trunkierungsfehler kann durch Vergleich der Werte für verschiedene Anzahlen beibehaltener Zustände m abgeschätzt werden. In dieser Arbeit werden $m = 128$ oder $m = 256$ Zustände verwendet. In einigen wenigen Ausnahmen wird auch $m = 512$ gewählt.

Bei allen Betrachtungen waren die Rechnerressourcen von Bedeutung. So ist die Rechenzeit linear in der Kettenlänge L. Sie wächst quadratisch mit der Anzahl beibehaltener Zustände m. Mit schrumpfender Verbreiterung η nimmt sie stark zu. Hierdurch ist das Auflösungsvermögen beschränkt - so können die Hubbardsatelliten für größere Werte des Parameters $U \geq 3.5D$ in der vorliegenden Arbeit nicht mehr aufgelöst werden. Mit bedeutend längeren Ketten (dies erfordert mehr beibehaltene Zustände) und kleineren η's sollte dies gelingen. Einige Daten aus Rechnungen mit $\eta = 0.04D$ und $\eta = 0.03D$ haben sich bei der Entfaltung als problematisch herausgestellt. Bereits in den verbreiterten Daten sind hierbei Finite-Size-Effekte zu erkennen. Hier könnte eine von C. Raas und G. S. Uhrig eingeführte Erweiterung des LBE Abhilfe schaffen (siehe Ref. [29]). Rechnungen mit diesen kleinen Verbreiterungen müssten mit Kettenlängen $L = 400$ bzw. $L = 600$ und trunkierten Hilbertraumdimensionen $m = 512$ erfolgen[2], die dafür notwendigen Rechenzeiten sind wesentlich länger als die für diese Arbeit verfügbare Zeit. In der vorliegenden Arbeit konnte das aus Zeitgründen nicht realisiert werden.

[2]Es wären auch $m = 256$ bei $L = 400$ möglich.

Symmetrie

Die Symmetrie des Modells zeigt sich in den Graphen. Imaginärteile sind bezüglich der Ordinate spiegelsymmetrisch und Realteile bezüglich des Koordinatenursprungs inversionssymmetrisch. Es genügt daher, die Schaubilder auf dem positiven Teil des berechneten Frequenzintervalls zu betrachten.

3.2 Abschätzung von Fehlern

Die dDMRG-Daten weisen keinerlei statistische Fehler auf. Neben unbedeutenden Rundungsfehlern, treten zwei unvermeidbare systematische Fehler auf.

Der erste Fehler ist der Trunkierungsfehler aufgrund der Darstellung des Hilbertraumes mit einer reduzierten Basis. Eine Kontrolle der Größe dieses Fehlers gelingt durch den Vergleich der Daten zu verschiedenen Anzahlen m beibehaltener Zustände. Ein Vergleich der Datenwerte für 128, 256 und 512 beibehaltene Zustände bei $U = 2.0D$ und $U = 3.0D$ ergibt relative Trunkierungsfehler in der Größenordnung von 10^{-5} bei Frequenzen nahe 0 und von 10^{-3} bei größeren ω. Die Größenordnungen stimmen mit denen von C. Raas mittels der direkten Berechnung der Greenfunktion gefundenen überein (vgl. Ref. [38]).

Ein zweiter nicht vermeidbarer Fehler ist eine Folge der endlichen Systemgröße. Das unendlich große System wird durch eine endliche Kette der Länge L genähert. Eine endliche Kette weist ein diskretes Spektrum bestehend aus δ-Funktionen auf. Die numerischen Daten werden nach der Entfaltung als Näherung einer kontinuierlichen Spektraldichte interpretiert. Eine Kontrolle dieses Fehlers ist durch Vergleich der Daten zu verschiedenen Kettenlängen möglich. Aus einem Vergleich mit $L = 120$, 160 und 200 ergeben sich Fehler in der Größenordnung 10^{-4} bei kleinen Frequenzen bis zu 10^{-3} bei größeren Frequenzen.

3.3 Methode der Extraktion der Spektraldichte

An dieser Stelle soll die Methode zur Extraktion der Spektraldichten des SIAM aus den Rohdaten ausgewählt werden. Bei der Methodenwahl ist zu beachten, daß einerseits bekannt gute Datensätze, wie sie beispielsweise aus der dDMRG mittels direkter Berechnung der Greenfunktion vorliegen, reproduziert werden sollten. Andererseits stellen Summenregel und Pinningkriterium gute Kontrollmöglichkeiten für die Qualität der berechneten Daten dar - diese Kriterien müssen möglichst gut erfüllt sein.

In Abbildung **2** sind die Graphen der Spektraldichten aus der direkten Berechnung der Green-

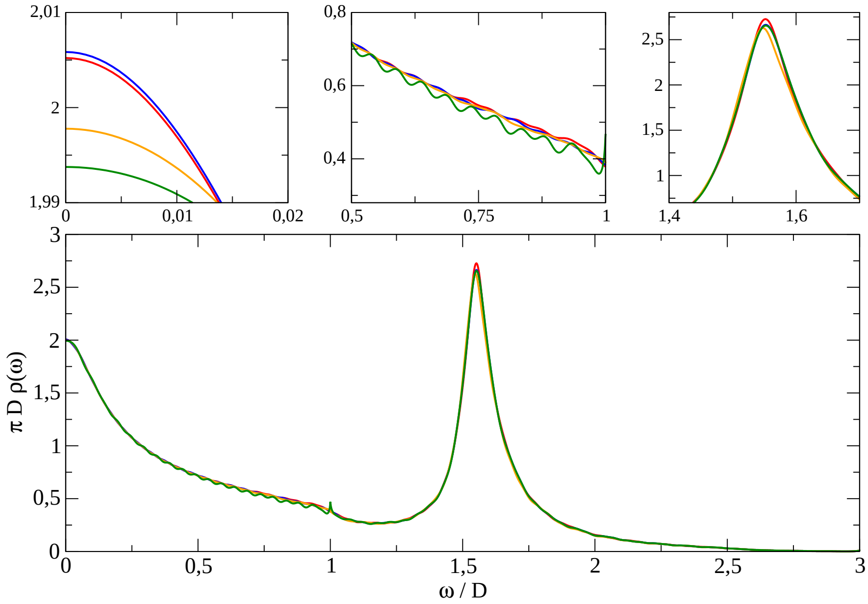

Abb. 2: Graphen der Spektraldichten für $U = 2.0D$.
Die Graphen stammen aus der direkten Berechnung der Greenfunktion (rot) und aus den drei Extraktionswegen aus Abschnitt 2.2.3 (Weg 1 blau, 2 orange und 3 grün). Es sind $m = 128$, $L = 200$, $\eta = 0.05D$ sowie $\Delta\omega = 0.05D$ gewählt. In den oberen Abbildungen sind links die Pinningwerte gezeigt, in der Mitte Entfaltungsartefakte der Q-Funktionsentfaltung, wie sie sich als Wiggles in den Kurven bemerkbar machen. Rechts sind die Hubbardsatelliten gezeigt.

Tabelle 1: Pinningwerte und Summenregeln bei $U = 2.0D$ für Spektraldichten zu verschiedenen Methoden aus Abschnitt 2.2.3. Das Pinning ist für den Weg über die entfaltete Selbstenergie am exaktesten erfüllt, die Summenregel ist für Weg 2 und 3 bis zur Rechnergenauigkeit erfüllt.

Methode	$\pi D\rho(\omega = 0)$	Abs. Fehler	Rel. Fehler	$-D\int_{\infty}^{\infty} G(\omega)$	Abs. Fehler	Rel. Fehler
Green	2.0052137	0.0052137	0.0026	3.16454	0.022948	$7.3 \cdot 10^{-3}$
Qfkt 1	2.0058458	0.0058458	0.0029	3.16017	0.018578	$5.9 \cdot 10^{-3}$
Qfkt 2	1.9977816	0.0022184	0.0011	3.14159	0.000002	$8.4 \cdot 10^{-7}$
Qfkt 3	1.9937578	0.0062422	0.0031	3.14159	0.000002	$8.4 \cdot 10^{-7}$

Tabelle 2: Pinningwerte und Summenregel bei $U = 3.0D$ für Spektraldichten zu verschiedenen Methoden aus Abschnitt 2.2.3. Das Pinning ist für den Weg über die entfaltete Selbstenergie am exaktesten erfüllt, die Summenregel ist für Weg 2 bis zur Rechnergenauigkeit erfüllt.

Methode	$\pi D\rho(\omega = 0)$	Abs. Fehler	Rel. Fehler	$-D\int_{\infty}^{\infty} G(\omega)$	Abs. Fehler	Rel. Fehler
Green	2.0261684	0.0261684	0.0131	3.172800	0.031298	$9.9 \cdot 10^{-3}$
Qfkt 1	2.0180517	0.0180517	0.0090	3.176200	0.034608	$1.1 \cdot 10^{-2}$
Qfkt 2	1.9900412	0.0099588	0.0048	3.141590	0.000002	$8.4 \cdot 10^{-7}$
Qfkt 3	1.9539252	0.0460748	0.023	3.141630	0.034570	$1.2 \cdot 10^{-5}$

funktion und den drei Extraktionswegen aus Abschnitt 2.2.3 über die Q-Funktion zu $U = 2.0D$, $m = 128$, $\eta = 0.05D$ und $\Delta\omega = 0.05D$ für eine Kette der Länge $L = 200$ dargestellt. Für Wechselwirkungstärken $U \leq W = 2D$ sind die Ergebnisse der direkten Greenfunktionsberechnung sehr verlässlich (siehe Ref. [38]). Die Graphen des ersten Extraktionsweges und der direkten Greenfunktionsberechnung sind in sehr guter Übereinstimmung. Das entspricht der Erwartung, da in beiden Fällen der volle Propagator entfaltet wird. Die über die Entfaltung der Selbstenergie gewonnene Spektraldichte stimmt ebenfalls weitgehend mit dem aus der direkten Rechnung überein. Ausnahmen bilden in beiden Fällen die Maximalwerte im Hubbardsatelliten und im zweiten Fall auch am Kondopeak. Die Kurve aus dem dritten Extraktionsweg über die Entfaltung der Q-Funktion zeigt einige Finite-Size-Effekte im Intervall $[0.3D, 1.2D]$ und deutliche Abweichungen von den übrigen Kurven an den Peaks.

Die Pinningwerte weisen relative Fehler von $1.1 \cdot 10^{-3}$ bis $3.1 \cdot 10^{-3}$ auf. Den geringsten relativen Fehler weist das Pinning für die Spektraldichte aus der entfalteten Selbstenergie auf. Die genauen Werte sind in Tabelle **1** angegeben. Die Summenregel (2.14) für die Spektraldichten ist bei allen Graphen näherungsweise erfüllt. In der direkten Rechnung und bei der Entfaltung der vollen Greenfunktion ist der relative Fehler aber um einige Größenordnungen höher als bei den anderen Kurven. Dieser Sachverhalt ist ebenfalls in Tabelle **1** dargestellt. Sowohl das Pinning als auch die Summenregel ist für die Methode am genauesten erfüllt, bei der die Selbstenergie entfaltet wird. Die Reproduktion der Daten aus der dDMRG über die Greenfunktion gelingt mittels der Entfaltung der Greenfunktion selbst genauer. Das liegt daran, daß in beiden Fällen die gleiche Funktion entfaltet wird.

Für größere Werte der Wechselwirkung U sind die Ergebnisse aus der dDMRG über die Greenfunktion nicht mehr so verlässlich (siehe Ref. [38]). Insbesondere kann auf diesem Weg der

Hubbardpeak nicht hinreichend aufgelöst werden. Seine Breite nimmt mit wachsendem U stark ab. Für $U = 3.0D$ erhält man die Ergebnisse in Tabelle **2**. Die zugehörigen Graphen sind in Abbildung **3** dargestellt. Auch hier liefert die Spektraldichte über den zweiten Extrahierungsweg die genauesten Werte für die Summenregel und das Pinningkriterium.

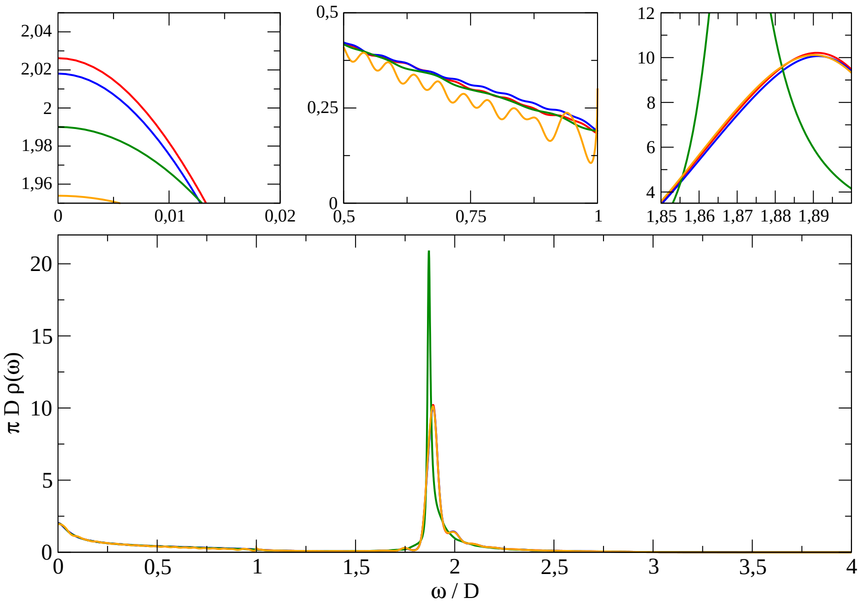

Abb. 3: Graphen der Spektraldichten für $U = 3.0D$.
Die Graphen sind aus der direkten Berechnung der Greenfunktion (rot) und aus den drei Extraktionswegen aus Abschnitt 2.2.3 (Weg 1 blau, 2 grün und 3 orange). Es sind $m = 128$, $L = 200$, $\eta = 0.05D$ sowie $\Delta\omega = 0.05D$ gewählt. In den oberen Abbildungen sind links die Pinningwerte gezeigt, in der Mitte Entfaltungsartefakte der Q-Funktionsentfaltung, wie sie sich als Wiggles in den Kurven bemerkbar machen. Rechts sind die Hubbardsatelliten gezeigt, deutlich zu erkennen ist eine schärfere Struktur in der Kurve der entfalteten Selbstenergie.

Für beide Werte der Wechselwirkung U erweist sich die Entfaltung der Q-Funktion als problematisch, Entfaltungsartefakte zeigen sich als Wiggles[3] und für $U = 3.0D$ als kleine zusätzliche Peaks am Fuß des Hubbardsatelliten. Der Hubbardpeak sieht für das größere U nicht mehr bei allen Extraktionsmethoden ähnlich aus. Die entfaltete Selbstenergie weist einen deutlich schärferen

[3]Vgl. Abschnitt 2.1.6.

Peak auf als die anderen Wege. Diese Verbesserung in der Auflösung des Hubbardsatelliten ist auf die höhere Dichte der Polstellen und der damit verbundenen besseren Entfaltbarkeit mittels des LBE zurückzuführen.

Nach den oben dargestellten Ergebnissen ist die vorteilhafteste Methode zur Gewinnung der Spektraldichte aus den mittels dDMRG berechneten Rohdaten zur Q-Funktion der Weg über die Entfaltung der Selbstenergie. Hierbei weisen das Pinningkriterium und die Summenregel die geringsten Fehler auf. Der Hubbardsatellit für größere U wird deutlich besser aufgelöst. Für alle folgenden Resultate wird diese Methode benutzt. Sie wird im Folgenden als dDMRG über die Q-Funktion bezeichnet.

3.4 Die Spektraldichte, die Q-Funktion und die Selbstenergie

3.4.1 Globale Struktur der Spektraldichte

Die Spektraldichte ist physikalisch leicht interpretierbar. Peaks im Graphen entsprechen Anregungen des Systems. Es liegt nahe, an dieser Stelle die Struktur der Spektraldichte im Ganzen zu betrachten. In Abbildung **4** sind die Spektraldichten zu drei verschiedenen Werten der Wechselwirkung U dargestellt. Sowohl das Pinningkriterium (2.18) als auch die Summenregel (2.38) sind erfüllt.

Die Spektraldichten zeigen um $\omega = 0D$ den Kondopeak. Die Kondotemperatur, d. h. die Breite des Kondopeaks um $\omega = 0D$, nimmt mit wachsendem U ab. Eine quantitative Betrachtung hierzu folgt später. Etwa bei $\omega_{\mathrm{H}} = \frac{U}{2}$ zeigen die Graphen den oberen Hubbardsatelliten. Die Struktur dieses Peaks wird mit steigendem U schärfer, d. h. seine Breite nimmt ab, sein Maximum und sein spektrales Gewicht nehmen zu. Insbesondere weist der Hubbardpeak eine Asymmetrie auf, welche bei größeren Werten von U deutlicher ausgeprägt ist als bei Kleineren. Später wird die Asymmetrie detaillierter diskutiert.

Zwischen den beiden Peaks existiert ein Bereich, in dem die Graphen im Wesentlichen einen Abfall zeigen. Bei Frequenzen oberhalb des Hubbardsatelliten zeigen die Graphen ein Verhalten mit asymptotischem Abfall gegen 0.

Der Kondopeak und der Hubbardsatellit werden in folgenden Abschnitten ausführlich diskutiert. Der Zwischenbereich und der asymptotische Abfall werden nicht weiter diskutiert. Es ist keine analytische Beschreibung des Kurvenverlauf in den betreffenden Intervallen bekannt. Versuche ein Exponentialgesetz (oder ein Potenzgesetz) anzufitten, sind ohne Erfolg geblieben, so daß an dieser Stelle keine weiteren Aussagen getroffen werden können.

Die Selbstenergie ist physikalisch nicht minder interessant. Sie enthält die gesamten physika-

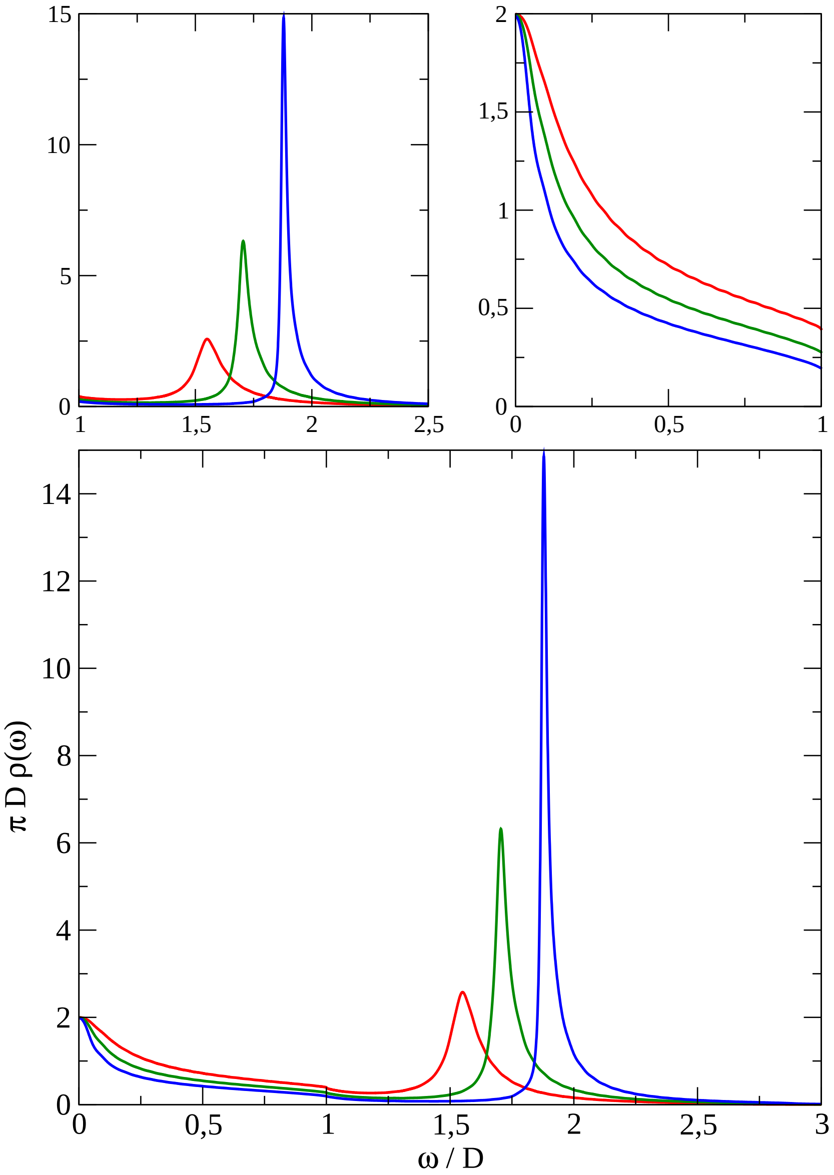

Abb. 4: Graphen der Spektraldichten für $U = 2.0D$ (rot), $U = 2.5D$ (grün), $U = 3.0D$ (blau). Es sind $m = 512$, $L = 120$, $\eta = 0.05D$ sowie $\Delta\omega = 0.05D$ gewählt. In den oberen Abbildungen sind rechts die Kondoresonanzen und links die Hubbardsatelliten gezeigt. Die Pinningwerte bei $\omega = 0D$ weisen relative Fehler von $\leq 8 \cdot 10^{-4}$ für $U = 2.0D$ bis zu $6 \cdot 10^{-3}$ für $U = 3.0D$ auf. Die Summenregel (2.14) ist bei allen Graphen erfüllt mit einem relativen Fehler $\leq 10^{-8}$.

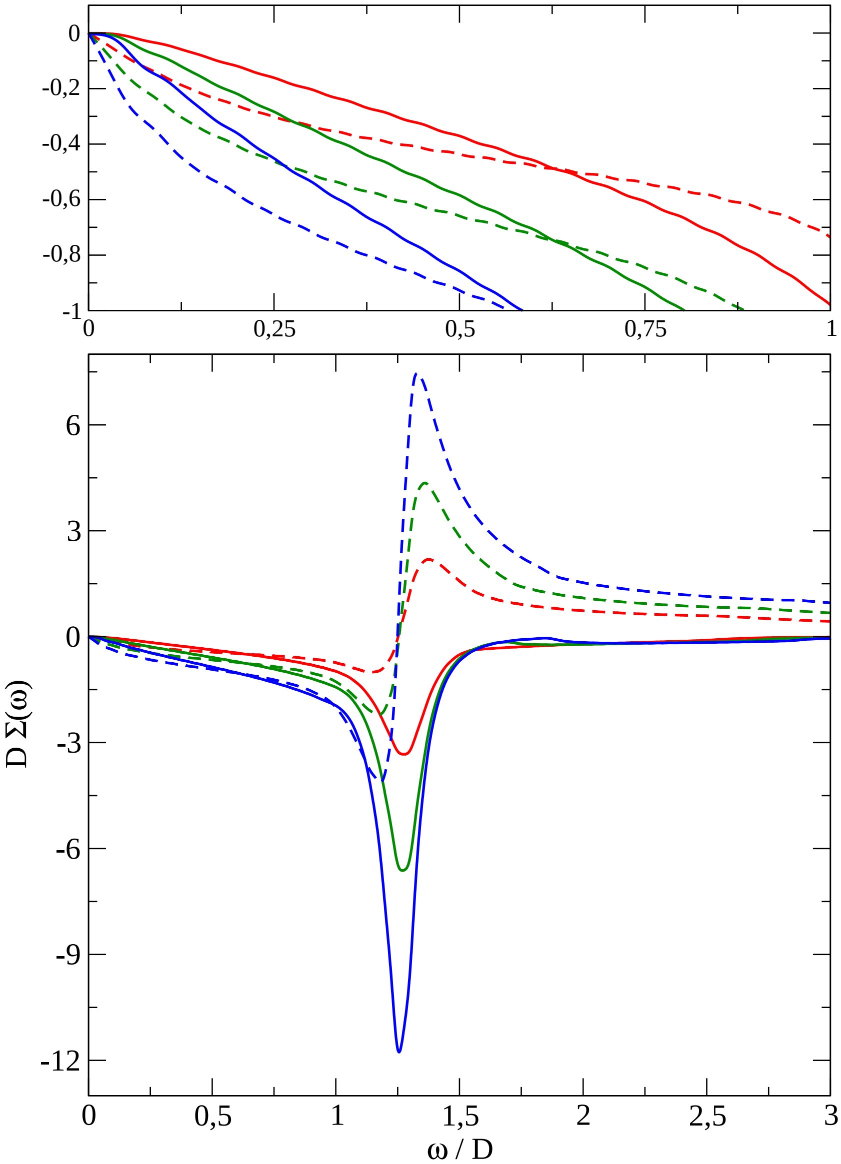

Abb. 5: Graphen der Selbstenergie für $U = 2.0D$ (rot), $U = 2.5D$ (grün), $U = 3.0D$ (blau). Imaginärteile sind durch volle Linien, Realteile durch gestrichelte Linien gezeichnet. Es sind $m = 512$, $L = 120$, $\eta = 0.05D$ sowie $\Delta\omega = 0.05D$ gewählt. In der oberen Abbildung ist das Verhalten in der Umgebung von $\omega = 0D$ dargestellt. Die Summenregel (2.57) ist erfüllt mit einem relativen Fehler $\leq 6 \cdot 10^{-4}$.

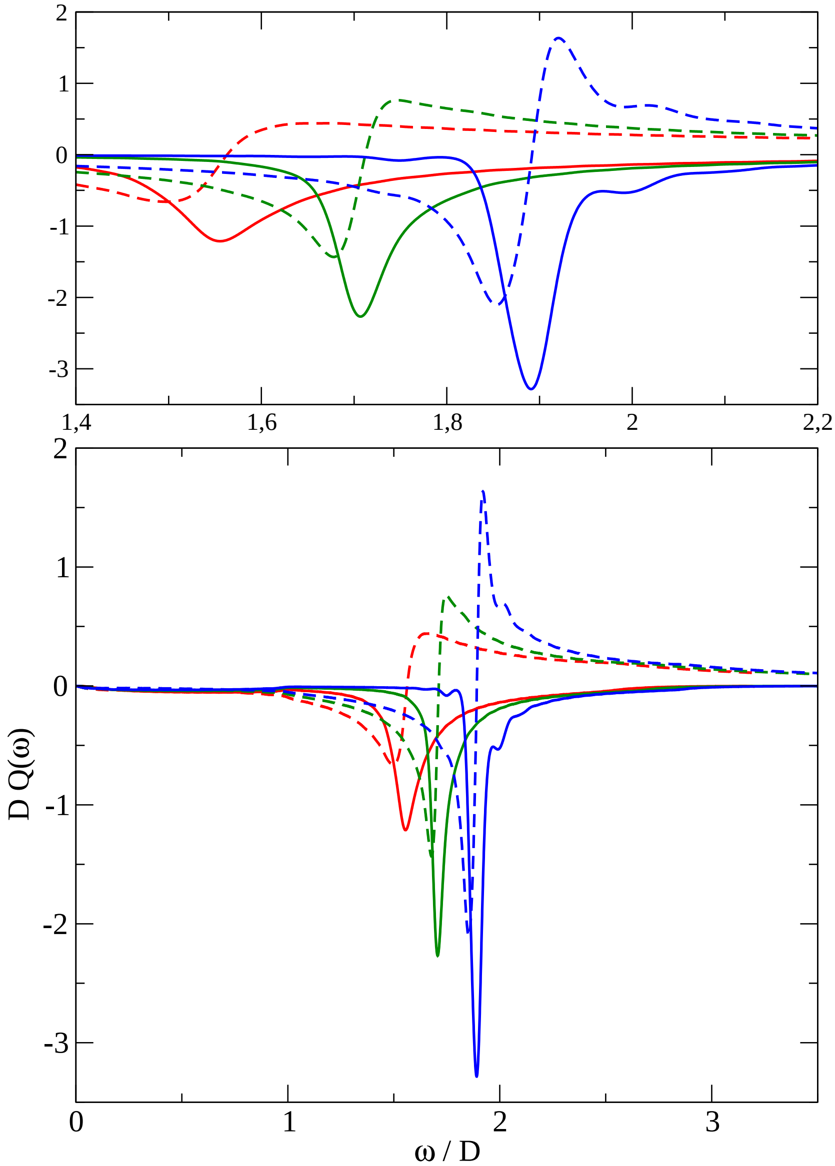

Abb. 6: Graphen der Q-Funktion für $U = 2.0D$ (rot), $U = 2.5D$ (grün), $U = 3.0D$ (blau). Imaginärteile sind durch volle Linien, Realteile durch gestrichelte Linien gezeichnet. Es wurden $m = 512$, $L = 120$, $\eta = 0.05D$ sowie $\Delta\omega = 0.05D$ verwendet. In der oberen Abbildung ist das Verhalten in der Umgebung der Hubbardsatelliten der Spektraldichten dargestellt. Die Summenregel (2.56) ist erfüllt mit einem relativen Fehler von weniger $\leq 3 \cdot 10^{-3}$.

lischen Eigenschaften, welche mit der Wechselwirkung zusammenhängen (siehe Ref. [31, 41]). In Abbildung **5** sind die Imaginär- und Realteile der Selbstenergie zu $U = 2.0D$, $U = 2.5D$, $U = 3.0D$ dargestellt. An der Fermienergie (hier wurde $\epsilon_F = 0D$ gesetzt) verschwindet die Selbstenergie. Oberhalb der Bandkante des Leitungsbandes zeigen sich ausgeprägte Minima der Imaginärteile und damit verbunden Wendepunkte und Vorzeichenwechsel der Realteile. In der Struktur der Graphen ist deutlich erkennbar, daß sie sich gut entfalten lassen. Die Graphen sehen „glatt" aus. Die Steigungen ändern sich nicht abrupt. Schmale Peaks weisen die Schaubilder nicht auf. Die Summenregel für die Selbstenergie (2.57) ist bis zur Rechnergenauigkeit erfüllt.

Die Q-Funktion lässt sich nicht leicht interpretieren. Sie entspricht der uneigentlichen Selbstenergie. Wegen ihrer fundamentalen Bedeutung für die vorliegende Arbeit ist es dennoch sinnvoll, ihre Graphen zu betrachten.

In Abbildung **6** sind Imaginär- und Realteile der Q-Funktion zu $U = 2.0D$, $U = 2.5D$, $U = 3.0D$ abgebildet. Auch hier ist die Summenregel (2.56) erfüllt. Insbesondere für den Wert $U = 3.0D$ zeigen sowohl Imaginärteil als auch Realteil *Unterstrukturen* an beiden Seiten ihrer Peaks. Dabei handelt es sich um Entfaltungsartefakte. Die Anteile des freien Propagators G_0 in der Q-Funktion führen trotz der höheren Polstellendichte zu Problemen bei der Entfaltung dieser uneigentlichen Selbstenergie. Die Imaginärteile zeigen an der Position der Hubbardsatelliten der Spektraldichten ausgeprägte und schmale Minima, ihre Realteile weisen dort Wendepunkte mit Vorzeichenwechsel auf. Daher eignen sie sich nicht so gut zum Entfalten wie die Selbstenergie.

Eine Kontrolle der berechneten Daten ist mittels Pinningkriterium und Summenregel gelungen. Für die Interpretation der Ergebnisse wird auf die folgenden Abschnitte verwiesen.

3.4.2 Vergleich mit der direkten Berechnung der Greenfunktion

Inwieweit die Berechnung der Spektraldichte über die Q-Funktion gegenüber der direkten Berechnung der Greenfunktion vorteilhaft ist, zeigt sich beim direkten Vergleich beider Vorgehensweisen.

In Abbildung **7** sind exemplarisch für $U = 2.0D$ und $U = 3.0D$ die Graphen der Spektraldichten einander gegenübergestellt. Die linke obere Abbildung zeigt die Hubbardsatelliten für $U = 2.0D$, die Rechte für $U = 3.0D$.

Für die kleinere Wechselwirkung sind kaum Unterschiede zu erkennen. Beide Kurven zeigen einen annähernd symmetrischen Peak (eine moderate Wechselwirkung erzeugt kaum Asymmetrie) und keine Entfaltungsartefakte. Der Graph aus der dDMRG über die Greenfunktion weist für $U = 3D$ beiderseits des Hubbardsatelliten Entfaltungsartefakte auf, das Profil ist nahezu

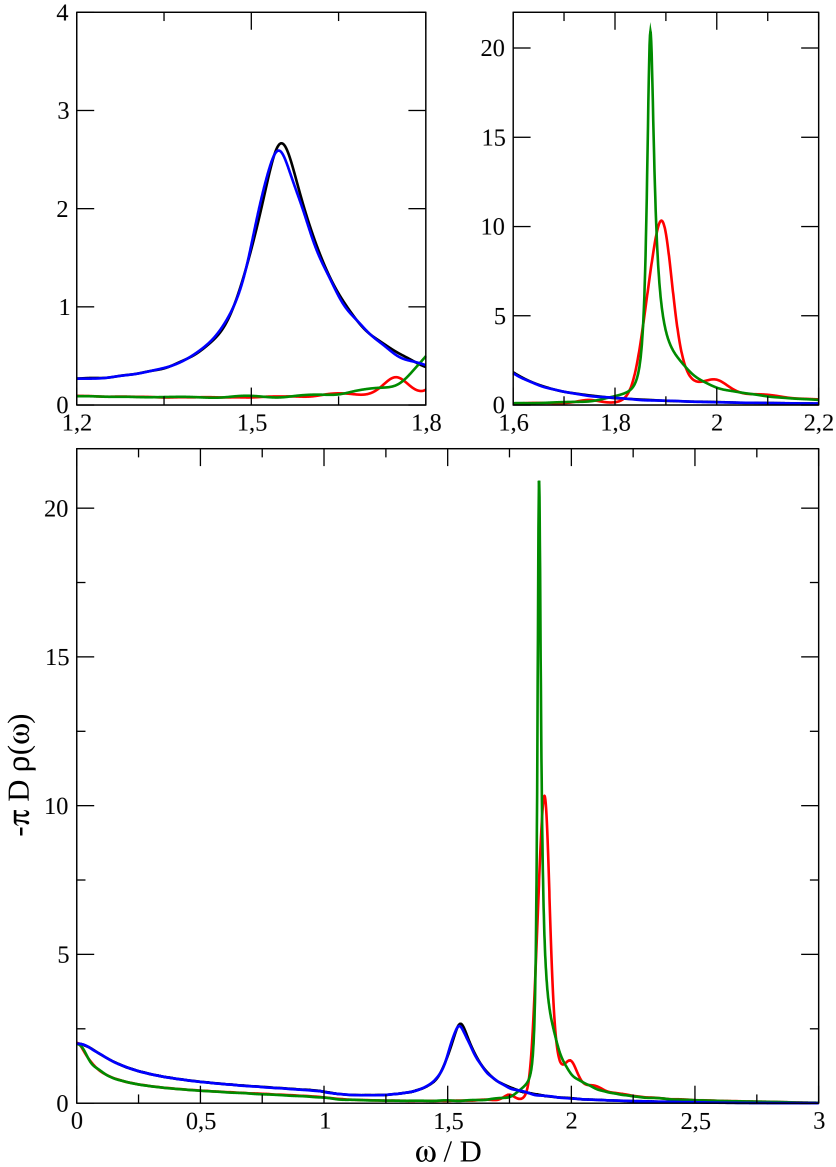

Abb. 7: Vergleich der direkten Berechnung der Greenfunktion mit der Q-Funktionsmethode. Es sind die Spektraldichten zu $U = 2.0D$ und $U = 3.0D$ mit $m = 128$ und $\eta = \Delta\omega = 0.05D$ aufgetragen. Dabei wurde die Greenfunktion direkt berechnet (schwarz für $U = 2.0D$, rot für $U = 3.0D$) oder über die Q-Funktion (grün für $U = 3.0D$, blau für $U = 2.0D$). Die oberen Grafiken zeigen links die Hubbardsatelliten für $U = 2.0D$ und rechts für $U = 3.0D$.

symmetrisch. Die Linienform der Kurve aus der dDMRG über die Q-Funktion zeigt für $U = 3D$ hingegen eine deutliche Asymmetrie und keine Entfaltungsartefakte. Bei größeren Wechselwirkungen U zeigen sich also klare Unterschiede in den Graphen zu beiden Methoden: Der Peak aus der Q-Funktion ist deutlich schärfer, schmaler und höher. Die Summenregel (2.38) ist für die Daten aus der dDMRG über die Q-Funktion für beide Wechselwirkungsstärken mit einem relativen Fehler von weniger als 10^{-6} erfüllt. Bei den Daten der dDMRG über die Greenfunktion betragen die relativen Fehler $7 \cdot 10^{-3}$ für $U = 2D$ und $2 \cdot 10^{-2}$ für $U = 3D$. Auch das Pinningkriterium ist bei der Entfaltung der Selbstenergie besser erfüllt (relativer Fehler dDMRG über die Q-Funktion $< 10^{-4}$ für beide U, dDMRG über die Greenfunktion 10^{-3} bei $U = 2.0D$ und 10^{-2} bei $U = 3.0D$). Abgesehen von Entfaltungsartefakten sind auch aufgrund der Summenregel und des Pinningkriteriums die Kurven aus der Q-Funktion wesentlich glaubhafter.

Der Vergleich der dDMRG-Daten zeigt, daß die Daten mittels der Berechnung über die Q-Funktion genauere Ergebnisse liefern. Die daraus resultierenden Linienprofile der Hubbardsatelliten zeigen deutlich ausgepägtere Maxima und sind bedeutend schmaler. Der Grund hierfür ist die verbesserte Approximation einer kontinuierlichen Spektraldichte durch das diskrete, verbreiterte, Spektrum einer endlichen Kette. Die entfaltete Selbstenergie besitzt bedeutend mehr Polstellen ($\mathcal{O}(N^3)$) als die Greenfunktion ($\mathcal{O}(N)$) selbst. Die gesamte Spektraldichte geht als Faltung aus den Propagatoren in den Diagrammen der Störreihe hervor (siehe Ref. [43]). Die Selbstenergiediagramme enthalten in niedrigster nicht-verschwindender Ordnung drei propagierende Linien (siehe Abschnitt 2.2.3). Bei niedrigen Frequenzen gilt $G_0 \approx$ const. und die Polstellen sind äquidistant verteilt. Die Faltung ergibt keine höhere Polstellendichte. Bei höheren Frequenzen ist G_0 nicht annähernd konstant und besitzt keine äquidistante Verteilung der Polstellen. Die Faltung führt zu einer bedeutend höheren Dichte von Polstellen. Damit verbunden treten bei der Least-Bias-Entfaltung weniger Artefakte auf und schärfere Peaks werden besser erfasst. Das bedeutet, daß vor allem die Hubbardsatelliten mittels der dDMRG über die Q-Funktion bedeutend besser aufgelöst werden als bei der direkten dDMRG-Berechnung der Greenfunktion. Hingegen sind die Unterschiede bei der Kondorsonanz wesentlich kleiner. Eine höhere Auflösung der Kondoresonanzen ist mit längeren Ketten und kleinerem η möglich.

Insgesamt kann hierdurch für die Untersuchung der hochenergetischen Eigenschaften des Systems bei gleichem Rechnerressourcenbedarf ein deutlich höheres Auflösungsvermögen erzielt werden. Bei festem Auflösungvermögen kann die Rechenzeit und der Speicherbedarf deutlich reduziert werden, da bereits mit kürzeren Ketten gleich gute Ergebnisse erzielt werden können.

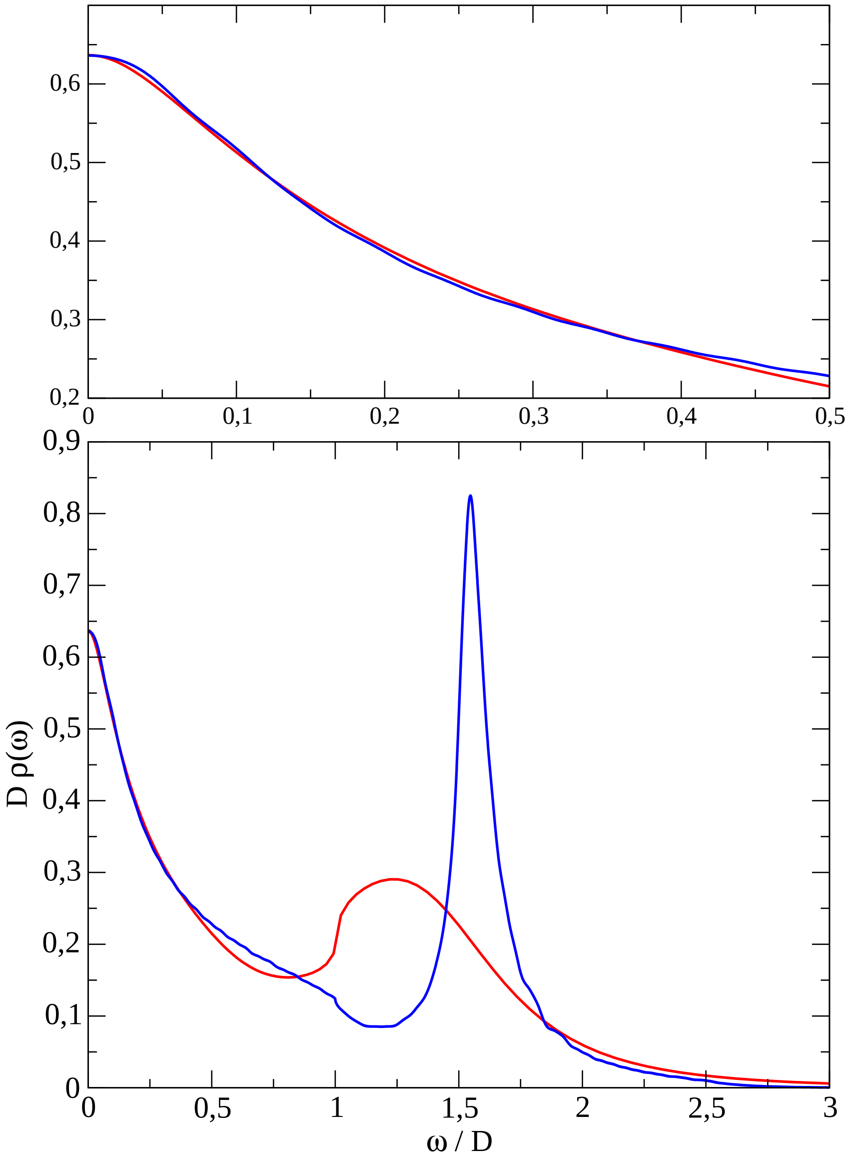

Abb. 8: Graphen der Spektraldichte für $U = 2.0D$ aus dDMRG über Q-Funktion und NRG. Die Graphen stammen aus der NRG (rot) und der dDMRG über Q-Funktion (blau). In der oberen Abbildung ist das Verhalten in der Umgebung von $\omega = 0$ abgebildet. Die NRG-Daten wurden von Frithjof Anders berechnet (siehe Ref. [44]), die NRG-Parameter hierbei sind $\lambda = 1.8$, $N = 1500$ und $b = 0.6$. Die dDMRG-Daten wurden mit $m = 128$, $L = 120$, $\Delta\omega = 0.05D$ und $\eta = 0.05D$ berechnet.

3.4.3 Vergleich mit anderen numerischen Daten

Ein Vergleich mit anderen numerischen Verfahren kann genutzt werden um die Methode der dDMRG über die Q-Funktion zu prüfen. Andererseits kann auf diese Weise die Effizienz der neuen Methode aufgezeigt werden.

Insbesondere nahe der Fermienergie, d. h. nahe $\omega = 0$, hat sich die numerische Renormierungsgruppe als effektives und genaues numerisches Verfahren etabliert. Bei größeren Energien erweist sich die NRG als problematisch. Die hochenergetischen Eigenschaften werden durch die NRG nicht hinreichend erfasst. Bei einem Vergleich der Daten aus NRG und dDMRG können in der Umgebung des Kondopeaks die NRG-Daten als Eichung der dDMRG genutzt werden. Die dDMRG über die Q-Funktion sollte hier ähnliche Ergebnisse wie die NRG liefern. Abweichungen bei größeren Frequenzen bedeuten hingegen keinen Hinweis für eine schlechte Qualität der Daten der dDMRG über die Q-Funktion.

In Abbildung **8** sind die Spektraldichten für $U = 2.0D$ aus der NRG und aus der dDMRG zusammengestellt. Die NRG-Daten hat F. Anders berechnet (siehe Ref. [44]), sie erfüllen die Summenregel (2.38) mit einem relativen Fehler von 10^{-4}. Im Bereich der Genauigkeit der numerischen Rundungen weist die Summenregel für die dDMRG-Daten keinen Fehler auf. Der Vergleich der Pinningwerte zeigt hingegen keinen Fehler bei der NRG, bei der dDMRG einen relativen Fehler der Größenordnung 10^{-4}. In der Nähe von $\omega = 0$ stimmen die Daten überein, bei größeren Energien nicht. Die dDMRG über die Q-Funktion ist in der Lage niederenergetische Eigenschaften zu erfassen.

Die Hubbardpeaks sind in den dDMRG-Daten wesentlich schärfer ausgeprägt als in den NRG-Daten. Da die NRG hochenergetische Eigenschaften nicht hinreichend erfasst, kann man schliessen, daß die dDMRG für höhere Frequenzen gegenüber der NRG Vorteile besitzt.

3.4.4 Der Kondopeak

Bei der Frequenz $\omega = 0D$ bildet sich der Kondopeak, auch Abrikosov-Suhl-Resonanz genannt, in den Graphen der Spektraldichte aus. Aus analytischen und vorhergehenden numerischen Rechnungen sind die Eigenschaften des Kondopeaks bekannt (siehe Ref. [2, 45, 29]). Die folgenden Ergebnisse reproduzieren die von C. Raas durch die dDMRG über die Greenfunktion berechneten Daten (vgl. Ref. [45, 29, 38]) mittels der dDMRG über die Q-Funktion mit dem zweiten Extraktionsweg aus Abschnitt 2.2.3. In Abbildung **9** sind die Spektraldichten für verschiedene Werte von U abgebildet. Die vollen Halbwertsbreiten der Kondoresonanzen (*engl. Full Width at Half Maximum, FWHM*) nehmen mit wachsendem U exponentiell ab (vgl. Gleichung (1.9)). Durch Ablesen der Frequenzen zu $\pi D\rho(\omega) = 1$ kann die FWHM bestimmt werden. In Tabelle **3**

Tabelle 3: Die Breiten der Kondoresonanzen für verschiedene U als FWHM. Für $U > 4.0D$ waren die Summenregeln nicht mehr genau erfüllt, da die Hubbardsatelliten nicht hinreichend aufgelöst wurden. Deswegen werden hier nur Datensätze für $U \leq 4.0D$ berücksichtigt. Die Fehler resultieren als statistische Fehler aus dem Fit und systematische Fehler aus der dDMRG.

U	FWHM	U	FWHM
$1.00D$	$1.56 \pm 2 \cdot 10^{-2}$	$2.75D$	$0.26 \pm 2 \cdot 10^{-2}$
$1.25D$	$1.23 \pm 2 \cdot 10^{-2}$	$3.00D$	$0.21 \pm 2 \cdot 10^{-2}$
$1.50D$	$0.94 \pm 2 \cdot 10^{-2}$	$3.25D$	$0.17 \pm 2 \cdot 10^{-2}$
$1.75D$	$0.72 \pm 2 \cdot 10^{-2}$	$3.50D$	$0.13 \pm 2 \cdot 10^{-2}$
$2.00D$	$0.56 \pm 2 \cdot 10^{-2}$	$3.75D$	$0.10 \pm 2 \cdot 10^{-2}$
$2.25D$	$0.43 \pm 2 \cdot 10^{-2}$	$4.00D$	$0.08 \pm 2 \cdot 10^{-2}$
$2.50D$	$0.34 \pm 2 \cdot 10^{-2}$		

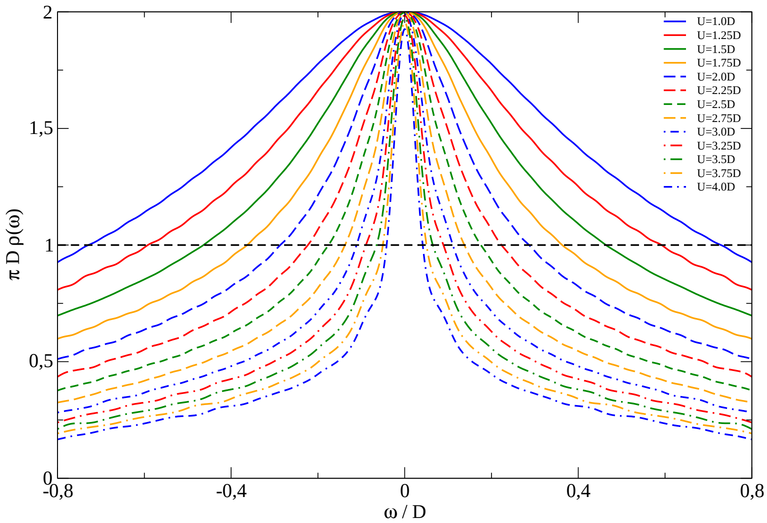

Abb. 9: Kondopeaks in den Spektraldichten.
Die Graphen sind für $U = 1.0D$ bis $U = 4.0D$ in $0.25D$-Schritten gezeichnet, dabei sind die breiteste Kurve für $U = 1.0D$ und abnehmend bis $U = 4.0D$. Es wurden $m = 128$, $L = 120$, $\eta = 0.05D$ sowie $\Delta\omega = 0.05D$ verwandt. Die gestrichelte, waagerechte, schwarze Linie ist zur Veranschaulichkeit der FWHM eingezeichnet.

sind die zugehörigen Werte angegeben. Der exponentielle Abklang in Gleichung (1.9) der Breite (siehe Ref. [2]) mit

$$T_K = \alpha V \sqrt{\frac{D}{U}} \exp\left(-\pi \frac{UD}{(4V)^2}\right) \tag{3.7}$$

kann mittels eines Fits bestätigt werden (vgl. Abbildung **10**). Die Proportionalitätskonstante beträgt $\alpha_{\text{fit}} = 7.173$. C. Raas hat die Proportionalitätskonstante über die direkte Berechnung der Greenfunktion mittels dDMRG zu 7.774 bestimmt (siehe Ref. [38]).

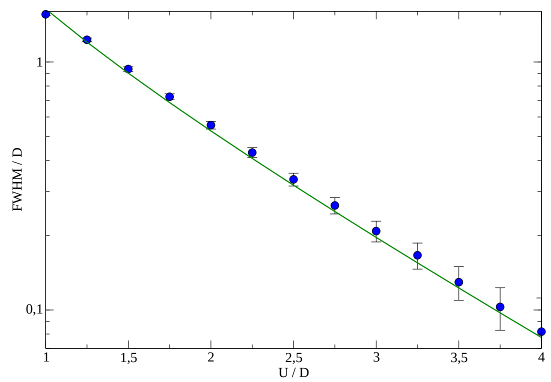

Abb. 10: Die Kondotemperaturskala.
Es sind die Werte der FWHM als Symbole und als durchgezogene, grüne Linie ein Fit mittels Gleichung (1.9) eingezeichnet. Der Proportionalitätsfaktor beträgt 7.173. Für $U > 4.0D$ waren die Summenregeln nicht mehr im Rahmen der Genauigkeit für $U \leq 4.0D$ erfüllt, da die Hubbardsatelliten nicht mehr aufgelöst werden konnten. Deswegen werden hier nur Datensätze für $U \leq 4.0D$ berücksichtigt. Die Fehler resultieren als statistische und systematische Fehler.

Das durch analytische Rechnungen bekannte Verhalten des exponentiellen Abklangs der Breite kann somit durch die berechneten Daten bestätigt werden. Auch das Pinningkriterium ist erfüllt, hierbei treten relative Fehler von unter 1% für $U < 3.5D$ auf. Für größere Werte von U ist das Pinningkriterium mit relativen Abweichungen in der Größe $\approx 1\%$ vom analytischen Resultat erfüllt.

Zusammenfassend ist die dDMRG über die Q-Funktion in der Lage das niederenergetische Verhalten des SIAM, welches sich in der Abrikosov-Suhl-Resonanz ausdrückt, mit einer hohen Genauigkeit zu erfassen. Die Übereinstimmung mit diesem sehr gut bekannten Verhalten und mit den NRG-Daten bei kleinen ω zeigen, daß die dDMRG über die Q-Funktion eine geeignete

Tabelle 4: Position und Breite der Hubbardsatelliten.
Parameter der Fits an die Hubbardsatelliten mittels einer asymmetrischen Lorentzkurve. Für $U > 3.5D$ wurden die Hubbardsatelliten unzureichend aufgelöst, daher werden hier nur Datensätze für $U \leq 3.5D$ berücksichtigt.

U	a	γ	b	ω_c
$2.00D$	0.0108	0.0678	-5.2798	1.5359
$2.25D$	0.0069	0.0418	-5.2291	1.6165
$2.50D$	0.0038	0.0239	-16.2958	1.6961
$2.75D$	0.0026	0.0165	-24.7558	1.7781
$3.00D$	0.0019	0.0100	-35.4508	1.8684
$3.25D$	0.0010	0.0051	-33.8258	1.9608
$3.50D$	0.0007	0.0028	-18.1107	2.0494

Methode zur Untersuchung des SIAM ist.

3.4.5 Die Hubbardsatelliten

Für $U > D$ bilden sich außerhalb des freien Bandes die Hubbardsatelliten aus. Diese liegen bei Frequenzen von $\omega_\pm \approx \pm(\frac{U}{2} + \delta_{\text{shift}})$ mit $\delta_{\text{shift}} > 0$. In Abbildung **11** sind die Hubbardpeaks für $U = 1.50D$ bis $U = 4.00D$ dargestellt. Mit steigendem U nimmt die Schärfe der Hubbardsatelliten stark zu, sie werden schmaler und sind zunehmend stark ausgeprägt. Das Gewicht der Peaks nimmt zu.

Für Werte $U \geq 3.50D$ werden die Peaks mit wachsendem U wieder breiter und die Höhe der Maxima nimmt ab (vgl. mit den Werten in Tabelle **4**). Die Verbreiterung η ist für diese Wechselwirkungen zu groß gewählt worden. Damit kann eine noch schmalere Peakstruktur nicht aufgelöst werden. Mit längeren Ketten und kleineren Verbreiterungen sollten die Strukturen für große U aufgelöst werden können. Aus zeitlichen Gründen konnte das innerhalb der vorliegenden Arbeit nicht realisiert werden.

Eine Asymmetrie der Hubbardsatelliten ist insbesondere bei größeren Werten von U zu erkennen. An der niederfrequenten Seite zeigen die Kurven ein sehr abruptes Ansteigen. Dagegen ist der Abfall an der hochfrequenten Seite deutlich sanfter. Für $U \geq 3.25D$ findet man eine *Schulter* an der oberen Flanke der Satelliten. Hierbei handelt es sich um ein Entfaltungsartefakt (siehe auch Abschnitt 2.1.6). Auch bei kleineren Wiggles links vom Peak handelt es sich um

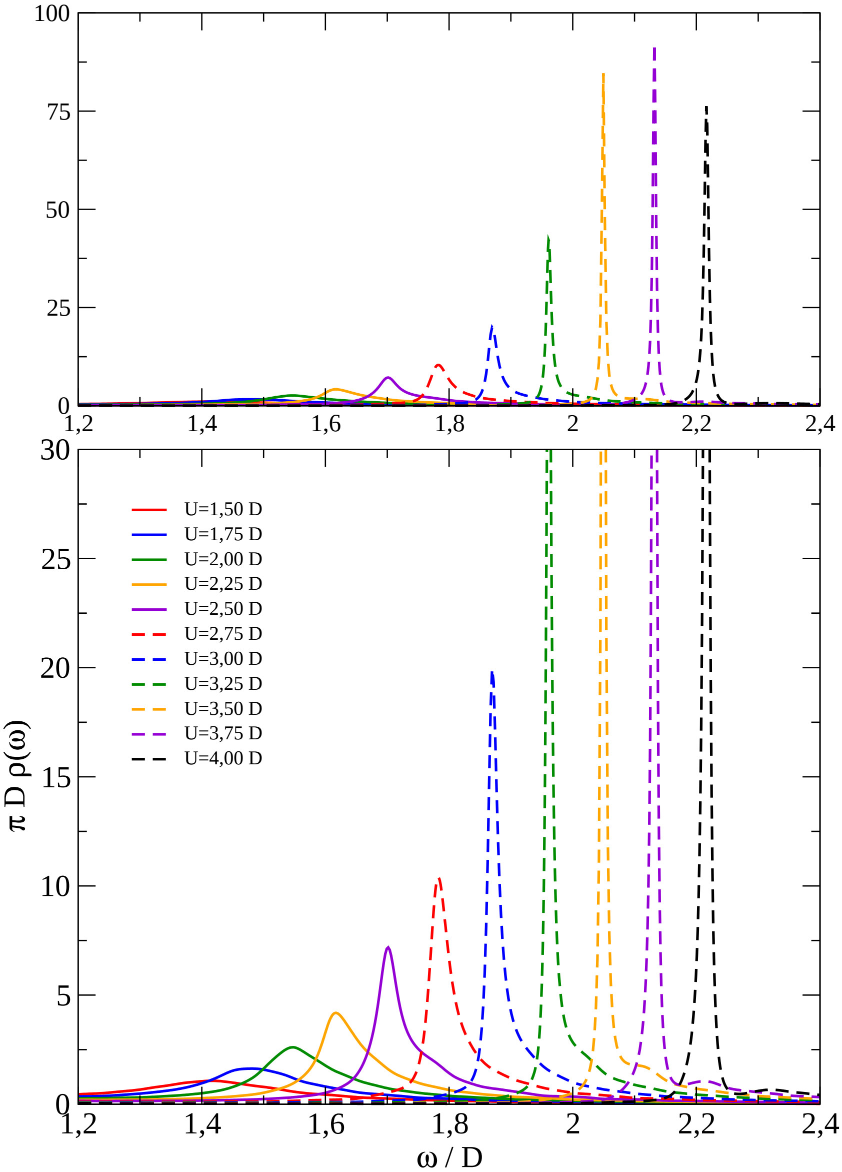

Abb. 11: Die Hubbardsatelliten.

Für Wechselwirkungen von $U = 1.50D$ bis $U = 4.00D$ sind die Graphen gezeichnet. Es wurden $m = 128$ und $\eta = \Delta\omega = 0.05D$ gewählt. In der oberen Abbildung erkennt man, daß für $U \geq 3.5$ die Breite der Peaks wieder mit U zunimmt und das Maximum kleiner wird. Die Kurven zeigen eine deutliche Asymmetrie der Peaks. Mittels eines Fits mit einem asymmetrisierten Lorentzprofils (3.8) wurden aus diesen Graphen die Breiten und Positionen der Hubbardsatelliten bestimmt.

derartige Artefakte.

Eine quantitative Analyse der Hubbardsatelliten gelingt mittels Fits. Bisher ist keine analytische Beschreibung der Linienform bekannt. Ein Fit über eine asymmetrische Lorentzkurve

$$-\Im G(\omega) = \frac{a}{\pi} \cdot \frac{\gamma + (1 - b(\omega - \omega_c))}{\gamma^2 + (\omega - \omega_c)^2} \tag{3.8}$$

erscheint naheliegend. Die Fits mit obigem Profil passen (für $U \geq 2.00D$) nahezu exakt zu den berechneten Daten. Hierin sind γ die Breite und ω_c die Position des Peaks, sowie a_1 und a_2 Fitparameter.

Mangels einer analytischen Beschreibung der Linienform liegt den Fits die Annahme zugrunde, daß die Profile die Form in Gleichung (3.8) besitzen. Qualitativ kann ein solches Verhalten verstanden werden. Der doppelt besetzte Störstellenlevel besitzt die Energie $\frac{U}{2}$ im atomaren Grenzfall $V = 0$. Diese Energie wird durch eine endliche Hybridisierung V verschoben (δ_{shift}) und verbreitert, siehe Ref. [45, 11].

Bei endlicher Hybridisierung V werden die isolierten Störstellenniveaus mit Zuständen der metallischen Umgebung zu Energien innerhalb des Leitungsbandes $[-D, D]$ gemischt. Für $U > D$ führt eine Störungsrechnung zweiter Ordnung in V zu einer Repulsion zwischen den Störstellenleveln und den Badzuständen. Die Verschiebung ist von der Ordnung $\frac{V^2}{U}$. Die Positionen der Hubbardsatelliten sind demnach durch

$$\omega_c = \pm \left(\frac{U}{2} + B \cdot \frac{V^2}{U} \right) \tag{3.9}$$

gegeben. Die Störstellenniveaus mischen sich auch mit Teilchen-Loch-Anregungen innerhalb des Leitungsbandes. Im symmetrischen SIAM sind der doppelt besetzte und der leere Störstellenzustand entartet. Daher sind auch Teilchen-Teilchen- und Loch-Loch-Anregungen von Bedeutung.

Diesen qualitativen Argumenten folgend sollten die Hubbardsatelliten ein Lorentzprofil besitzen. Die berechnete asymmetrische Form kann durch eine Erweiterung obiger Argumentation verstanden werden.

Die spezifische Breite der sehr schmalen Peaks resultiert aus dem Zerfall des doppelt besetzten Störstellenlevels in Teilchen-Loch-Anregungen der Fermiflüssigkeit. Fermis *Goldene Regel* besagt, daß ein derartiger Zerfall nur stattfindet, wenn die Energien von Ausgangs- und Endzustand gleich sind. Die Anregung extrem vieler Teilchen-Loch-Paare ist notwendig für den Zerfall der relativ großen Energie $\frac{U}{2}$. Teilchen-Loch-Anregungen haben Energien kleiner als die Bandbreite. Für $U \neq 0$ ist die Bandbreite effektiv reduziert. Sie ist von der Größe der Kondoenergie (1.9). Daraus resultiert eine endliche, aber sehr große, Lebenszeit des doppelt besetzten Störstellenzustands.

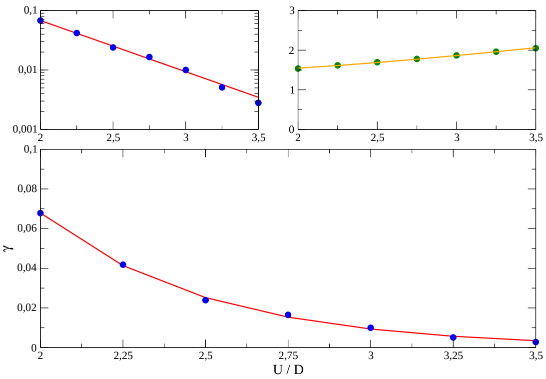

Abb. 12: Die Breite und die Position der Hubbardpeaks.
Aufgetragen ist die FWHM (blaue Punkte) der Hubbardsatelliten gegen die Wechselwirkung U, ein Exponentialgesetz (3.10) (rote Linie) beschreibt, wie man anhand eines logarithmischen Auftrags erkennt (links oben), den Zusammenhang. Rechts oben sind die Positionen ω_c der Hubbardpeaks (grüne Punkte) gegen die Wechselwirkung U aufgetragen. Hier findet man einen Zusammenhang (3.11) (orange Linie). Für $U > 3.5D$ wurden die Hubbardsatelliten unzureichend aufgelöst, daher werden hier nur Datensätze für $U \leq 3.5D$ berücksichtigt.

Die hochenergetische Flanke kann als Effekt der Erzeugung von Teilchen-Loch-Anregungen durch die Doppelbesetzung verstanden werden. Das ist nicht dasselbe wie der oben beschriebene Zerfall. Beim Zerfall wird die Doppelbesetzung vernichtet. Sie bleibt aber erhalten bei der Erzeugung von Teilchen-Loch-Anregungen. Daher findet man den Beitrag dieses Prozesses an der hochenergetischen Seite. Ein weiteres Teilchen-Loch-Paar kostet eine zusätzliche Energie. Dieser an der hochenergetischen Seite vorkommende Erzeugungsprozeß impliziert eine Asymmetrie. Es liegt deswegen nahe, das asymmetrische Lorentzprofil (3.8) zum Fitten zu benutzen. In Tabelle **4** sind die hieraus resultierenden Parameter angegeben.

Die Breite der Hubbardsatelliten nimmt mit wachsendem U stark ab, siehe hierzu Abbildung **12**. Hier kann eine exponentielle Abnahme festgestellt werden

$$\gamma = \alpha \cdot \exp\left(-\beta U\right) . \tag{3.10}$$

Der Fit ist in Abbildung **12** eingezeichnet. Die Parameter ergeben $\alpha = 3.57$ und $\beta = 1.98$. In der linken oberen Abbildung ist die Abhängigkeit gut zu erkennen, es handelt sich um einen logarithmischen Auftrag der Ordinate. Für eine solche exponentielle Abhängigkeit ist bislang

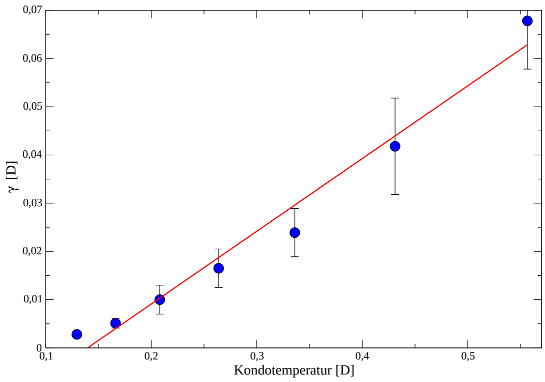

Abb. 13: Vergleich der Breite der Hubbardpeaks und der Kondotemperatur.
Aufgetragen ist die Breite (blaue Punkte) der Hubbardsatelliten gegen die Kondotemperatur T_K, ein lineares Gesetz (3.12) beschreibt die Abhängigkeit (rote Linie). Die Fehlerbalken sind ebenfalls logarithmisch skaliert. Insbesondere der Datenpunkt für $U = 3.5D$ liegt nicht mehr auf der Geraden.

keine analytische Beschreibung bekannt. Auch ist aufgrund numerischer Rechnungen bisher keine solche Aussage getroffen worden.

Die Positionen der Hubbardsatelliten können zu

$$\omega_\pm = \pm(\frac{U}{2} + B \cdot \frac{V^2}{U}) \tag{3.11}$$

bestimmt werden. Die Positionen sind in der Vergrößerung von Abbildung **12** dargestellt. Der ermittelte Proportionalitätsfaktor beträgt $B = 4.42$.

Interessant ist der Vergleich der Breite der Hubbardpeaks mit der Kondotemperatur, siehe hierzu Abbildung **13**. Die Daten sind konsistent zu einem linearen Zusammenhang

$$\gamma = aT_K + c\,. \tag{3.12}$$

Die Fitparameter sind zu $a = 0.15 \pm 0.01$ und $c = -0.02 \pm 0.003$ bestimmt worden. Zu beachten ist hierbei, daß über die Kondotemperatur neben numerischen Daten auch analytische Aussagen bekannt sind (vgl. Abschnitt 1.1.2). Insbesondere der Faktor $\sqrt{\frac{D}{U}}$ in Gleichung (1.9) kann sich in Graphen aus den numerischen Daten erst bei der Betrachtung über ein großes Intervall zeigen.

Ein solcher Faktor ist aufgrund der in dieser Arbeit berechneten Daten bei der Breite γ der Hubbardsatelliten nicht festzustellen. Analytische Aussagen darüber, ob γ wie T_K skaliert, sind bislang nicht bekannt. Im Rahmen obiger qualitativen Argumentation kann aber die intrinsische Abnahme der Breite mit U verstanden werden.

Einige Datenpunkte in Abbildung **13** liegen mit ihren Fehlerbalken nicht auf der bestimmten Geraden. Die Fehlerbalken enthalten statistische Fehler aufgrund der Bestimmung der Breiten γ mittels Fits mit Gleichung (3.10) und systematische Fehler aus der numerischen Methode. Zu beachten ist, daß die durch Fits ermittelten Werte vom Fitintervall abhängig sind. Der resultierende Fehler wurde als systematischer Fehler zu 0.001 bis 0.01 durch Vergleich der Werte auf verschiedenen Fitintervallen abgeschätzt.

Insbesondere der Punkt für $U = 3.5D$ (links unten) liegt deutlich oberhalb der Geraden. Der Hubbardsatellit ist bereits bei dieser Wechselwirkung nicht hinreichend gut aufgelöst worden.

Die Aussage, daß die Breite der Hubbardsatelliten mit der Kondotemperatur skaliert, kann auf Basis der dDMRG-Daten aus der Q-Funktionsmethode dennoch getroffen werden. Weitere und genauere Rechnungen, welche zu einem eventuellen Faktor $\sqrt{\frac{D}{U}}$ in Gleichung (3.10) führen, konnten innerhalb der vorliegenden Arbeit nicht realisiert werden.

Kapitel 4

Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde das von C. Raas entwickelte Programm zur dDMRG auf eine direkte Berechnung der Selbstenergie erweitert und auf das SIAM angewendet. Die hierfür notwendigen Formeln wurden von G. S. Uhrig (siehe Ref. [10]) abgeleitet. Dabei wurde insbesondere die fundamentale Q-Funktion eingeführt. Sie ist eine spezielle, diagonale Einteilchen-Greenfunktion und entspricht im Wesentlichen der uneigentlichen Selbstenergie. Das erweiterte Programm wurde zur Berechnung von Spektraldichten des SIAM zu verschiedenen Werten der Wechselwirkung U eingesetzt.

Die mittels der dDMRG berechneten - und notwendigerweise verbreiterten - Daten wurden unter Verwendung eines von G. S. Uhrig und C. Rass (vgl. Ref. [29]) entwickelten Entfaltungsverfahren, der Least-Bias-Entfaltung, ausgewertet. Diese neue Methode ist nicht-linear und nutzt Eigenschaften der Spektraldichte, wie Positivität und Normierung konsequent aus. Die kontrollierte Entfaltung der numerisch berechneten Rohdaten führt auf Spektraldichten mit scharfen Strukturen. Bisher wurden die Strukturen nicht in dieser Schärfe aufgelöst. Wesentlicher Aspekt ist dabei die für eine Entfaltung geeignetere Struktur der Selbstenergie im Vergleich zur Greenfunktion. Die Selbstenergie besitzt $\mathcal{O}(N^3)$ Polstellen, die Greenfunktion nur $\mathcal{O}(N)$ für ein System mit N Fermionen. Dieses Argument gilt bei höheren Frequenzen, da dann die Polstellen entsprechend verteilt sind.

Durch Vergleich mit Daten aus der NRG und der direkten Berechnung der Greenfunktion mittels dDMRG sowie analytischen Relationen[1] konnte die Methode geeicht werden. Die niederenergetischen Eigenschaften zeigen sich in der Kondoresonanz, sie wurden genau erfasst und reproduziert. Im Vergleich zum bisherigen Einsatz der dDMRG über die Greenfunktion erweist sich die Berechnung der Selbstenergie mit der dDMRG als überlegen, insbesondere bei hohen

[1] Summenregel und Pinningkriterium

Frequenzen (siehe Ref. [43, 10]).

Das hochenergetische Verhalten des SIAM drückt sich in den *Hubbardsatelliten* aus. Im Vergleich zur dDMRG über die Greenfunktion wurden die Linienprofile wesentlich schärfer aufgelöst. Eine Asymmetrie in den Hubbardsatelliten konnte durch die numerischen Daten aufgezeigt werden. Ein quantitatives Argument kann eine solche Asymmetrie erklären. Die spezifische Form ist dabei wesentlich ausgeprägter als mit bisherigen Methoden beobachtet.

Ein analytischer Ausdruck für die Linienform ist bislang nicht bekannt. Die Analyse der Daten wurde mit Hilfe eines asymmetrischen Lorentzprofils vorgenommen. Die Positionen der Hubbardsatelliten und ihre Breiten konnten auf diese Weise gewonnen werden. Die Positionen können als verschobene atomare Eigenschaft verstanden werden. Ein aus einer störungstheoretischen Behandlung gewonnener Ausdruck für die Lage der Hubbardpeaks konnte bestätigt werden. Eine Analyse der Breiten der Hubbardsatelliten führte auf einen exponentiellen Abfall mit der wechselwirkung U. Bisher ist ein solcher Zusammenhang weder analytisch abgeleitet noch durch numerische Rechnungen erkannt worden. Ein Vergleich zwischen der Breite der Hubbardpeaks und der Kondoskala ergab einen linearen Zusammenhang zwischen beiden. Für eine detailliertere Untersuchung dieser Abhängigkeit waren die berechneten Daten jedoch zu ungenau.

Analytische Gesetze für das Verhalten zwischen der Kondoresonanz und den Hubbardsatelliten sowie für das Verhalten bei hohen Frequnezen sind bislang nicht bekannt. Es konnten auf Basis der berechneten Daten keine Exponential- oder Potenzgesetze gefunden werden. Auch konnten die Spektraldichten für $U \geq 3.5D$ aus Zeitgründen nicht hinreichend aufgelöst werden.

Gegenüber bisherigen numerischen Methoden hat sich die dDMRG mit der direkten Berechnung der Selbstenergie, in Verbindung mit der Least-Bias-Entfaltung, bei hohen Frequenzen als überlegen erwiesen. Bei gegebenen Systemgrößen erzielt diese neue Methode ein deutlich verbessertes Auflösungsvermögen. Das ist insbesondere für die Betrachtung hochenergetischer Eigenschaften wichtig. Gerade im Hinblick auf die jüngsten Fortschritte bei der optischen Manipulation von *Quantum Dots* sind die experimentellen Daten in Reichweite gerückt (siehe Ref. [46, 47]).

In naher Zukunft gilt es, die Methode durch zeitaufwendigere Rechnungen zur Auflösung der Spektraldichten für größere Wechselwirkungsstärken U und für Hybridisierungen $V \neq \frac{D}{2}$ einzusetzen. Wichtig ist es, eine analytische Beschreibung der Linienform des Hubbardsatelliten zu finden. Die numerischen Daten können benutzt werden um eine solche Beschreibung zu verifizieren oder zu falsifizieren. Die Regionen zwischen Kondoresonanz und Hubbardsatellit und die *Schwänze* der Spektraldichten sollten weitergehend untersucht werden.

Ebenfalls kann das asymmetrische SIAM untersucht werden. Denkbar ist ferner, daß die Methode innerhalb der dDMRG weitere Verbreitung findet, da sie bei hohen Frequenzen Vorteile aufweist. In Anwendungen, bei denen die dDMRG zur Bestimmung der Selbstenergie eingesetzt wird (DMFT) ist die Berechnung über die Q-Funktion ebenfalls vorteilhaft. Innerhalb der Untersuchung des Mott-Hubbard-Metall-Isolator-Überganges durch die DMFT von M. Karski (vgl. Ref. [48]) kann die Berechnung der Selbstenergie im dDMRG-Störstellenlöser helfen, die gefundenen Unterstrukturen an den inneren Seiten der Hubbardbänder aufzulösen und die Ergebnisse zu verstehen.

Insgesamt hat die durch diese Arbeit eingeführte Methode der dDMRG über die Q-Funktion gegenüber der bisherigen Umsetzung der dDMRG über die Greenfunktion wichtige Vorteile: Eine höhere Genauigkeit, ein deutlich verbessertes Auflösungsvermögen bei höheren Energien und eine robustere Entfaltung!

Insbesondere wurde in dieser Arbeit mittels der erweiterten dDMRG erstmals ein exponentieller Abfall der Breite des Hubbardsatelliten mit der Wechselwirkungsstärke U erkannt.

Anhang A

Herleitung der Q-Funktion und wichtiger Relationen

An dieser Stelle werden einige Rechnungen, welche im Kapitel über die Q-Funktion nicht vorgenommen wurden, nachgeholt (siehe Ref. [10]).

Aus der Definition der retardierten Greenfunktion (vgl. Ref. [31])

$$G_{\hat{A}\hat{B}}(z) = \langle\langle \hat{A}|\hat{B}\rangle\rangle := -\mathrm{i}\int_0^\infty \langle\{\hat{A}(t), \hat{B}(0)\}\rangle \mathrm{e}^{\mathrm{i}zt}\,\mathrm{d}t \tag{A.1}$$

folgt mittels partieller Integration

$$z\langle\langle \hat{A}|\hat{B}\rangle\rangle + \langle\langle [\hat{H}, \hat{A}]|\hat{B}\rangle\rangle = \langle\{\hat{A}(0), \hat{B}(0)\}\rangle \tag{A.2}$$

wobei die Zeitentwicklung eines Operators im Heisenbergbild $\hat{A}(t) = \exp(\mathrm{i}\hat{H}t)\hat{A}\exp(-\mathrm{i}\hat{H}t)$ verwendet wird. Wegen der zeitlichen Translationsinvarianz gilt ebenso

$$z\langle\langle \hat{A}|\hat{B}\rangle\rangle - \langle\langle \hat{A}|[\hat{H}, \hat{B}]\rangle\rangle = \langle\{\hat{A}(0), \hat{B}(0)\}\rangle\,. \tag{A.3}$$

Mit $\hat{A} = \hat{d}_\sigma$ und $\hat{B} = \hat{d}^\dagger_\sigma$ folgt aus Gleichung (A.2) mit der Greenfunktion $\langle\langle \hat{d}_\sigma|\hat{d}^\dagger_\sigma\rangle\rangle$

$$(z + \mu_0)G(z) - UF(z) - \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}}\langle\langle \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}|\hat{d}^\dagger_\sigma\rangle\rangle = 1 \tag{A.4}$$

wobei die Funktion $F(z) := \langle\langle \hat{d}_\sigma(\hat{n}_{-\sigma} - \frac{1}{2})|\hat{d}^\dagger_\sigma\rangle\rangle$ eingeführt wird. Weiter folgt aus Gleichung (A.2) mit $\hat{A} = \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}$ und $\hat{B} = \hat{d}^\dagger_\sigma$

$$(z - \epsilon_{\mathbf{k}})\langle\langle \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}|\hat{d}^\dagger_\sigma\rangle\rangle - V_{\mathbf{k}}G(z) = 0\,. \tag{A.5}$$

Aus Gleichung (A.4) und Gleichung (A.5) kann

$$(z + \mu_0 - \Delta(z))G(z) - UF(z) = 1 \tag{A.6}$$

hergeleitet werden. Zusammen mit der Dysongleichung (2.51) folgt

$$\Sigma(z) = U\frac{F(z)}{G(z)}\,. \tag{A.7}$$

Weiterhin kann aus Gleichung (A.3) mit der Wahl $\hat{A} = \hat{d}_\sigma(\hat{n}_{-\sigma} - \frac{1}{2})$ und $\hat{B} = \hat{d}_\sigma^\dagger$

$$(z + \mu_0)F(z) - UQ(z) - \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}}\langle\langle \hat{d}_\sigma | \hat{c}^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}\rangle\rangle = 0 \tag{A.8}$$

gefolgert werden. Hierbei wurde die wichtige fermionische Greenfunktion, die Q-Funktion,

$$Q(z) := \langle\langle \hat{d}_\sigma(\hat{n}_{-\sigma} - \frac{1}{2}) | \hat{d}^\dagger_\sigma(\hat{n}_{-\sigma} - \frac{1}{2})\rangle\rangle \tag{A.9}$$

eingeführt. Gleichung (A.3) mit der Wahl $\hat{B} = \hat{c}^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}$ und $\hat{A}$ wie zuvor impliziert

$$(z - \epsilon_{\mathbf{k}})\langle\langle \hat{d}_\sigma(\hat{n}_{-\sigma} - \frac{1}{2}) | \hat{d}^\dagger_\sigma(\hat{n}_{-\sigma} - \frac{1}{2})\rangle\rangle - V_{\mathbf{k}}F(z) = 0\,. \tag{A.10}$$

Aus Gleichung (A.7) und Gleichung (A.10) schließt man

$$(z + \mu_0 - \Delta(z))F(z) - UQ(z) = 0\,. \tag{A.11}$$

Es folgt mit Gleichung (A.6)$\Longrightarrow F(z) = UQ(z)G_0(z)$ und Gleichung (A.3) die wichtige Relation

$$\Sigma(z) = \frac{U^2 Q(z)}{1 + U^2 Q(z) G_0(z)}\,. \tag{A.12}$$

Hiermit ist Gleichunmg (2.54) hergeleitet.

Die Transformation auf eine Spinkette ergibt

$$\begin{aligned}
Q(z) &= \langle\langle \hat{d}_\sigma(\hat{n}_{-\sigma} - \frac{1}{2}) | \hat{d}^\dagger_\sigma(\hat{n}_{-\sigma} - \frac{1}{2})\rangle\rangle \\
&= \langle\langle \hat{\mathbf{S}}^-_0(\hat{n}_{-\sigma} - \frac{1}{2}) | \hat{\mathbf{S}}^+_0(\hat{n}_{-\sigma} - \frac{1}{2})\rangle\rangle \\
&= \langle\langle \hat{\mathbf{S}}^-_0(\frac{1}{2} + \hat{T}^z_0 - \frac{1}{2}) | \hat{\mathbf{S}}^+_0(\frac{1}{2} + \hat{T}^z_0 - \frac{1}{2})\rangle\rangle \\
&= \langle\langle \hat{T}^z_0 \hat{\mathbf{S}}^-_0 | \hat{\mathbf{S}}^+_0 \hat{T}^z_0\rangle\rangle\,.
\end{aligned}$$

In dieser Notation ist das Verfahren der dDMRG optimal anzuwenden.

Anhang B

Anmerkungen zur Implementierung

Diese Arbeit baut auf einem von C. Raas geschriebenen C^{++} Programm auf. In diesem Programm ist die dDMRG für die direkte Berechnung der Greenfunktion implementiert. Die Erweiterung auf die Q-Funktion, d. h. den Operator $\hat{\mathbf{S}}_0^+ \hat{\mathbf{T}}_0^z$ stellt die Hauptaufgabe der vorliegenden Arbeit dar.

Die Algorithmen der DMRG, wie sie unter „Methodische Aspekte“ vorgestellt worden sind, können ideal auf translationsinvariante oder spiegelsymmetrische Systeme angewendet werden. Das symmetrische SIAM weist keine Translationsinvarianz auf. Oberflächlich neigt man leicht zur Annahme, die Spinkette sei spiegelsymmetrisch bezüglich der Störstelle. Sie ist es jedoch nicht. Im Rahmen der dDMRG wird $\hat{\mathbf{S}}_0^+ |0\rangle$ als Zielzustand betrachtet. Hierdurch wird der Platz der Störstelle, welcher an die S-Kette koppelt, ausgezeichnet und die Spiegelsymmetrie ist verletzt. Der Umgebungsblock kann nicht aus einer Spiegelung des Systemblockes gewonnen werden. Aus diesem Grund wird eine Abwandlung des Algorithmus implementiert.

Bis zu einer durch die Zahl beibehaltener Zustände m vorgegebenen Fermionenzahl L_c wird die Basis nicht trunkiert, es gilt

$$2^{L_c} = m \,. \tag{B.1}$$

Ein Block der Größe L_c ist in wenigen Schritten aufgebaut. Als Umgebungsblöcke werden nach Erreichen dieser Größe nur Blöcke mit $l' = L_c$ oder $l' = L_c - 1$ verwendet. Die Größe der Umgebungsblöcke alterniert, um stets eine gerade Superblocklänge zu erhalten. Der Fall einer metallischen Umgebung setzt eine solche gerade Anzahl voraus. Die Kettenbruchentwicklung der freien Greenfunktion ist nur für eine gerade Entwicklungstiefe Propagator einer metallischen Lösung (siehe Ref. [49]).

Der Systemblock wächst in der umgesetzten Implementierung stets um einen Platz, der Umgebungsblock wird passend dazu exakt aufgebaut. Auch während der Sweeps wird immer nur ein Platz am Systemblock hinzugefügt und der Umgebungsblock entsprechend ausgewählt.

Entsprechend obiger Ausführungen endet die Aufbauphase des Endliches-System-Algorithmus in einer Konfiguration, bei der das äußere Ende durch einen minimalen Umgebungsblock erfaßt wird. Die Störstelle befindet sich innerhalb des Systemblocks. Messungen[1] sollen in der symmetrischen Konfiguration erfolgen. Daher wird zwischen der Aufbau- und der Sweepingphase ein Rechts-Links-Sweep und ein halber Links-Rechts-Sweep eingeschoben. Hiernach befindet sich die Störstelle an der Grenze von Umgebungs- und Systemblock. In dieser Konfiguration befindet sich das System nach jedem vollen Sweep. Es wird auschließlich in dieser Konfiguration gemessen.

Alternativ kann als Meßwert auch der Mittelwert über die letzten Schritte des Sweeps gebildet werden. Auch diese Möglichkeit ist im Programm implementiert. Die Abweichungen sind deutlich geringer als die ermittelten Fehler aufgrund der endlichen Systemgröße und der Trunkierung.

[1]Als Messung bezeichnet man innerhalb der Numerik die Berechnung von relevanten Erwartungswerten, Eigenwerten und Zuständen.

Abbildungsverzeichnis

Tabellenverzeichnis

Literaturverzeichnis

[1] P. W. Anderson. *Phys. Rev.*, **124** 41, 1961.

[2] A. C. Hewson. *The Kondo Problem to Heavy Fermions.* Cambridge University Press.

[3] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and J. Rozenberg. *Rev. Mod. Phys.*, **68** 13, 1996.

[4] G. Kotliar and D. Vollhard. *Physics Today*, **03** 2004, 2004.

[5] K. G. Wilson. *Rev. Mod. Phys.*, **47** 773, 1975.

[6] S. R. White. *Phys. Rev. Lett.*, **69** 2863, 1992.

[7] K. A. Hallberg. *Phys. Rev. B*, **52** 9827, 1995.

[8] S. Ramasesha, K. Pati S. R. Krishnamurthy H. Z. Shuai, and L. Bredas J.˙ *Synthetic Metals*, **85** 1019, 1997.

[9] T. D. Kühner and S. R. White. *Phys. Rev. B*, **60** 335, 1999.

[10] G. S. Uhrig. Sum rule for the self-energy of single impurity models. unveröffentlicht, 2003.

[11] R. Schrieffer J. and A. Wolff P.˙ *Phys. Rev.*, **149** 491, 1966.

[12] V. S. Viswanath and G. Müller. *The Recursion Method - Application to Many-Body Dynamics.* Lecture Notes. Springer.

[13] D. G. Pettifor and D. L. *The Recursion Method And Its Applications.* Series in Solid-State Sciences. Springer.

[14] P. Jordan and E. Wigner. *Z. Phys.*, **47** 631, 1928.

[15] T. Hövelborn. Boundary dynamics of the xy-chain with the density matrix renormalization group, 2000.

[16] S. R. White. *Phys. Rev. B*, **48** 10345, 1993.

[17] S. R. White and R. M. Noack. *Phys. Rev. Lett.*, **68** 3487, 1992.

[18] R. M. Noack. The density matrix renormalization group: Method and application to strongly interacting electron systems, 1999. Habilitationsschrift.

[19] U. Schollwöck. Density-matrix renormalization group. *cond-mat*, /0409292, 2004.

[20] I. Peschel, X. Wang, M. Kaulke, and K. A. Hallberg. *Density-Matrix Renormalization - a new numerical method*. Lecture Notes. Springer.

[21] S. R. White. *Physics Report*, **301** 187, 1998.

[22] J. Gaite. *Mod. Phys. Lett. A*, **16** 1109, 2001.

[23] J. Gaite. *condmat*, /0301120, 2003.

[24] J. I. Latorre, E. Rico, and G. Vidal. *Quant. Inf. and Comp.*, **4** 048, 2004.

[25] T. J. Osborne and M. A. Nielsen. *quant-ph*, /0109024, 2001.

[26] J. Cullum and R. A. Willoughtby. *Lanczos-Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Computations*. Birkhäuser.

[27] G. Golub and C. F. van Loan. *Matrix Computations*. The John Hopkins University Press.

[28] G. L. G. Sleijpen and H. A. van der Vorst. *Jour. Matrix Anal. Appl.*, **17** 401, 1996.

[29] C. Raas and G. S. Uhrig. *cond-mat*, /0412224, 2004.

[30] A. L. Fetter and J. D. Walecka. *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. Lecture Notes. Dover Publications.

[31] G. Rickayzen. *Green's Functions and Condensed Matter*. Academic Press.

[32] J. M. Luttinger. *Phys. Rev.*, **119** 1153, 1960.

[33] J. M. Luttinger. *Phys. Rev.*, **121** 942, 1960.

[34] E. Jeckelmann. *Phys. Rev. B*, **66** 45114, 2002.

[35] E. R. Gagliano and C. A. Balseiro. *Phys. Rev. Lett.*, **59** 2999, 1987.

[36] M. R. Hestens and E. Stiefel. *NBS Jour. Res.*, **49** 409, 1952.

[37] G. Golub and C. F. van Loan. *Matrix Computations.* The John Hopkins University Press.

[38] C. Raas. *Spektraldichten des Einstörstellen-Anderson-Modells bei niedrigen und hohen Energien mittels dynamischer Dichtematrixrenormierung.* PhD thesis, Universität zu Köln, 2005. unveröffentlicht.

[39] H. A. van der Vorst. Iterative methods for large linear systems.

[40] S. Nishimoto, F. Gebhard, and E. Jeckelmann. *Jour. Phys.: Condens. Matter*, **16** 613, 2004.

[41] W. Nolting. *Grundkurs Theoretische Physik: Vielteilchentheorie.* Springer.

[42] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vettering, and B. P. Flynnery. *Numerical Recipes in* C^{++}. Cambridge University Press.

[43] E. Müller-Hartmann. *Z. Phys. B - Condensed Matter*, **74** 211, 1989.

[44] F. B. Anders. Persönliche Mitteilung.

[45] C. Raas, G. S. Uhrig, and F. B. Anders. *Phys. Rev. B*, **69** 41102, 2004.

[46] K. Karrai, R. J. Warburton, C. Schulhauser, A. Hägele, B. Urbaszek, E. J. McGhee, A. O. Govorov, J. M. Garcia, B. D. Gerardot, and P. M. Petroff. *Nature*, **427** 135, 2004.

[47] R. J. Warburton, C. Schäflein, D. Haft, F. Bickel, A. Lorke, K. Karrai, J. M. Garcia, W. Schönfeld, and P. M. Petroff. *Nature*, **405** 926, 2000.

[48] M. Karski. Dynamische molekularfeldtheorie mittels dynamischer dichtematrixrenormierung, 2004.

[49] M. Karski, C. Raas, and G. S. Uhrig. Electron spectra close to a metal-to-insulator transition. 2005.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. E. Müller-Hartmann, dem Leiter meiner Arbeitsgruppe in Köln, und Herrn Prof. Dr. Götz S. Uhrig, dem Betreuer meiner Arbeit, für die Vergabe und Betreuung dieser Arbeit bedanken.
Herrn Prof. Dr. M. Braden danke ich für die Bereitschaft als Koreferent meiner Arbeit zu fungieren.
Herrn Carsten Raas danke ich für die Bereitstellung des C^{++} Programms zur dDMRG, auf welchem meine Arbeit aufgebaut hat, für zahlreiche hilfreiche Diskussionen und für die kritische Durchsicht einiger Teile dieser Arbeit.
Herrn Frithjof B. Anders danke ich für die Bereitstellung von NRG-Daten zur Q-Funktions-Methode.
Herrn Mihal Karski danke ich für einige anregende und gewinnbringende Gespräche sowie für die kritische Durchsicht der Arbeit.
Herrn Alexander Reischl danke ich ebenfalls für die kritische Durchsicht der Arbeit.
Ich danke der Arbeitsgruppe von Herrn Prof. Dr. E. Müller-Hartmann für die freundliche und angenehme Arbeitsatmosphäre und hilfreiche Diskussionen.
Meiner Frau Maja K. Faßbender gilt ein ganz besonderer Dank. Sie hat, neben dem Korrekturlesen, in vielen Stunden Motivationshilfe geleistet und mich zu jeder Zeit mit voller Kraft unterstützt.

Erklärung

Hiermit erkläre ich, daß die vorliegende Arbeit von mir selbständig angefertigt wurde. Außer den angegebenen Quellen habe ich keine weiteren Hilfsmittel verwendet. Alle Zitate wurden von mir kenntlich gemacht.

Köln, den 13. April 2005

Rolf Faßbender

Referent:	Prof. Dr. G. S. Uhrig (Universität des Saarlandes, Saarbrücken)
Koreferent:	Prof. Dr. M. Braden (Universität zu Köln)