Dynamische Molekularfeldtheorie mittels dynamischer Dichtematrix-Renormierung

Michał Karski

Diplomarbeit

Institut für Theoretische Physik
Universität zu Köln

Dezember 2004

Inhaltsverzeichnis

Einleitung

Festkörper bestehen aus einer makroskopischen Anzahl an positiv geladenen Atomkernen und negativ geladenen Elektronen. Die Wechselwirkung zwischen diesen geladenen Teilchen wird durch die elektromagnetische Wechselwirkung, die Coulomb-Wechselwirkung, dominiert. Die Aufgabe der Feskörpertheorie besteht darin, die intrinsischen Eigenschaften eines Festkörpers durch die Konstruktion und Auswertung vereinfachter Modelle zu bestimmen. Es können dabei durchaus mehrere unterschiedliche Modelle die verschiedensten Eigenschaften eines einzigen Materials erfassen. In einfachen Kristallen können die verhältnismäßig schweren Atomkerne näherungsweise als ein starres strikt periodisches Gitter aufgefasst werden. Aufgrund ihrer starken Coulomb-Wechselwirkung wird ein großer Teil der Elektronen zu atomaren Schalen an die Atomkerne gebunden. Die resultierenden Ionen schirmen die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den verbliebenen Elektronen ab und bilden ein starres effektives periodisches Gitterpotential, in dessen Hintergrund sich die Valenzelektronen bewegen. Diese Valenzelektronen bestimmen in führender Ordnung die elektronischen, magnetischen und gemeinsam mit den Gitterschwingungen die thermischen Eigenschaften eines Festkörpers. Die Untersuchung dieser Elektronensysteme stellt eine große Herausforderung für die theoretische Festkörperphysik dar, insbesondere dann, wenn die Korrelationen zwischen den Elektronen die zu untersuchenden Phänomene dominieren und das Vielteilchenproblem sich einer Beschreibung im Rahmen einer Einteilchen-Näherung entzieht.

Das konzeptionell einfachste Modell zur Beschreibung eines Systems stark korrelierter Elektronen in einem starren strikt periodischen Gitterpotential ist das Einband-Hubbard-Modell [1–3]. Es beschreibt lediglich zwei konkurrierende Prozesse, einerseits das Hüpfen der Elektronen zwischen benachbarten Gitterplätzen und die repulsive Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektronen am selben Gitterplatz andererseits. Je nachdem, ob der durch die Bandbreite W charakterisierte kinetische Anteil oder ob die durch die Wechselwirkungsstärke U charakterisierte intraatomare Wechselwirkung dominiert, tendieren die Elektronen zu Delokalisierung und somit zu einem metallischen Verhalten oder zu Lokalisierung. Bei halber Bandfüllung (d. h. im Mittel ein Elektron pro Gitterplatz) führt die Lokalisierung zu einem isolierenden Verhalten. Das System beschreibt dann einen sog. *Mott-Hubbard-Isolator*. Durch die Änderung des Verhältnisses zwischen der Bandbreite und der Wechselwirkungsstärke U/W lässt sich an einem kritischen Wert ein Übergang von einem paramagnetischen Metall zu einem paramagnetischen Isolator induzieren. Es handelt sich hierbei um den sog. *Mott-Hubbard Metall-Isolator-Übergang* [4]. Dieser von Mott [5] im Jahr 1949 erstmals diskutierte Übergang ist einzig auf die starken Korrelationen zwischen den Elektronen zurückzuführen. Derzeit vermutet man, dass sich ein solcher Übergang in einigen Übergangsmetalloxidverbindungen, beispielsweise in V_2O_3, die ein oder mehrere halbgefüllte Bänder aufweisen, experimentell durch die Anwendung von Druck induzieren lässt.

Trotz des einfachen Konzepts konnte selbst das stark vereinfachte Einband-Hubbard-Modell mit Ausnahme des eindimensionalen Falls bis heute nicht exakt gelöst werden. Erst der von Metzner und Vollhardt [6] im Jahre 1989 eingeführte Grenzfall unendlicher Koordinationszahl brachte einige signifikante Vereinfachungen bei der Untersuchung dieses Modells mit sich. Die auf diesem Grenzfall aufbauende dynamische Molekularfeldtheorie (DMFT) [6–12] stellt einen der bedeutendsten Fortschritte in der Untersuchung des Mott-Hubbard Metall-Isolator-Übergangs dar. Im Rahmen der DMFT kann das Einband-Hubbard-Modell auf ein effektives Einstörstellen-Anderson-Modell, d. h. auf ein Modell einer einzelnen magnetischen Störstelle eingebettet in einem effektiven, selbstkonsistent zu bestimmenden Bad abgebildet werden. Diese Abbildung ist im Grenzfall unendlicher Koordinationszahl exakt. Die Untersuchung des Gitterproblems lässt sich somit auf ein Problem deutlich geringerer Komplexität reduzieren. In diesem nichtstörungstheoretischen Näherungsverfahren werden die kurzreichweitigen räumlichen Korrelationen vernachlässigt, während die dynamischen Korrelationen, die für eine Beschreibung der unterschiedlichen Phänomene stark korrelierter Gitterlektronen notwendig sind, vollständig einbezogen werden.

Nach seiner Einführung von Anderson [13] im Jahre 1961 wurde das Einstörstellen-Anderson-Modell in den darauf folgenden Jahren ausgiebig untersucht und stellt eines der am besten verstandenen Probleme der Festkörpertheorie dar. Damit dieses Modell die dynamischen Eigenschaften des Einband-Hubbard-Modells im Rahmen der DMFT bestimmen kann, müssen zuvor die Modellparameter des effektiven Bades, in dem die Störstelle eingebettet ist, mittels eines iterativen Lösungsansatzes der DMFT-Gleichungen selbstkonsistent bestimmt werden. Dazu müssen die dynamischen Eigenschaften des Einstörstellen-Anderson-Modells in jeder Iteration berechnet werden. Diese Berechnung bleibt dennoch ein nichttriviales Problem. Man kann jedoch auf eine Fülle von unterschiedlichen numerischen und analytischen Methoden zurückgreifen, die in den letzten 40 Jahren entwickelt und verbessert wurden.

Basierend auf diesen Methoden wurden in den letzten Jahren zahlreiche Störstellenlöser erfolgreich im Rahmen der DMFT eingesetzt, darunter Störstellenlöser basierend auf der exakten Diagonalisierung (ED) [14], der numerischen Renormierung (NRG) [15,16], der iterativen Störungstheorie (IPT) [17,18] und zahlreicher Quanten-Monte-Carlo-Algorithmen (QMC) [19,20]. Jede dieser Methoden weist jedoch sowohl Stärken als auch einige Schwächen auf. Die exakte Diagonalisierung beispielsweise ist derzeit aufgrund des mit der Größe des zu untersuchenden Systems exponentiellen Zuwachses an benötigten Rechenressourcen auf die Untersuchung kleinerer Systemengrößen beschränkt. Finite-Size-Effekte sind somit in den Untersuchungen mittels dieser Methode unvermeidbar und eine Extrapolation in den thermodynamischen Limes erweist sich häufig als problematisch. Mittels der NRG lassen sich zwar prinzipiell unendlich große Systeme untersuchen, die dynamischen Eigenschaften können jedoch nur innerhalb eines niederenergetischen Bereichs mit einer hohen Auflösung bestimmt werden. Für eine möglichst genaue iterative Lösung der DMFT-

Gleichungen müssen jedoch diese Eigenschaften auf der gesamten Energieskala mit einer hohen Auflösung bestimmt werden. Die IPT ist im Wesentlichen eine störungstheoretische Methode (trotz ihres iterativen Einsatzes, der zur Selbstkonsistenz innerhalb der DMFT führt). Ihre Genauigkeit hängt somit von den Konvergenzverhalten der Störungsentwicklung sowie von der Ordnung der berücksichtigten Korrekturen ab. Aus diesem Grund können einige Aspekte, darunter die physikalischen Eigenschaften nahe am Phasenübergang, mittels dieser Methode nur unzureichend erfasst werden. Die Quanten-Monte-Carlo-Algorithmen (QMC) sind nur auf einem Bereich endlicher (möglichst hoher) Temperaturen effizient einsetzbar. Die Ergebnisse für $T = 0$ können nur unter Einsatz von komplizierten Extrapolationen bestimmt werden. Diese Extrapolationen beherbergen jedoch zahlreiche Fehlerquellen. Außerdem erweist sich die analytische Fortsetzung der zur imaginären Zeit bestimmten Daten auf reelle Frequenzen als ein numerisch schlecht konditioniertes Problem.

Eine vielversprechende Methode stellt die dynamische Dichtematrix-Renormierung dar. Mittels der von Ramasesha [21], Kühner und White [22] entwickelten Korrekturvektor-DMRG lassen sich dynamische Eigenschaften stark korrelierter Systeme bei $T = 0$ auf der gesamten Energieskala mit einer hohen Auflösung untersuchen.

Das Ziel dieser Arbeit ist es, einen von Raas und Uhrig [23, 24] bereits erstellten, auf der dynamischen Dichtematrix-Renormierung basierenden Störstellenlöser in einen iterativen Lösungsansatz der DMFT-Gleichungen zu integrieren und mit Hilfe dessen den Mott-Hubbard Metall-Isolator-Übergang im Rahmen der DMFT am halbgefüllten Einband-Hubbard-Modell auf einem Bethe-Gitter mit einer semielliptischen Zustandsdichte bei $T = 0$ zu untersuchen.

Durch die Untersuchung dieses generischen Problems können die Ergebnisse dieser Arbeit mit den Ergebnissen basierend auf zahlreichen unterschiedlichen Methoden verglichen werden. Diese Arbeit stellt gleichzeitig einen Ausgangspunkt für die in Zukunft geplanten DMFT-Untersuchungen des Einband-Hubbard-Modells jenseits von halber Bandfüllung sowie in symmetriegebrochenen Phasen bis hin zur Betrachtung von unterschiedlichen Mehrband-Hubbard-Modellen im Rahmen der Cluster-DMFT dar.

Aufbau dieser Arbeit

Im **ersten Kapitel** werden das Einband-Hubbard-Modell und das über die DMFT in Beziehung gebrachte Einstörstellen-Anderson-Modell vorgestellt sowie die zur Charakterisierung des Mott-Hubbard Metall-Isolator-Übergangs benötigten Parameter eingeführt. Es folgt eine kurze Einführung in die Grundlagen der DMFT und der dynamischen DMRG.

Im **zweiten Kapitel** wird die Implementierung der einzelnen Arbeitsschritte zur iterativen Lösung der DMFT-Gleichungen für das Bethe-Gitter dargestellt.

Im **dritten Kapitel** werden die Ergebnisse dieser Arbeit präsentiert, darunter die Spektraldichten und die Selbstenergien zu verschiedenen Wechselwirkungsstärken sowohl für die metallische als auch für die isolierende Phase und mit Ergebnissen anderer numerischer sowie störungstheoretischer Methoden verglichen. Basierend auf

diesen Ergebnissen wird anschließend der Mott-Hubbard Metall-Isolator-Übergang untersucht. Zuvor werden die beiden möglichen, bis heute nicht eindeutig geklärten Szenarien für diesen Übergang vorgestellt. Es folgt eine Darstellung wichtiger Observablen zur Charakterisierung und Klassifizierung dieses Übergangs, darunter das Quasiteilchengewicht, die Einteilchen-Anregungslücke, die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz und die mittlere Doppelbesetzung.
Eine Zusammenfassung und ein Ausblick schließen diese Arbeit ab.

1 Modelle und Methoden

1.1 Das Hubbard-Modell

Das Hubbard-Modell wurde 1963 als Modell stark korrelierter Gitterelektronen von J. Hubbard [1], J. Kanamori [2] und M. C. Gutzwiller [3] vorgeschlagen, und zwar unabhängig voneinander. Benannt wurde es nach J. Hubbard, da dieser eine Reihe von Folgearbeiten zu diesem Modell veröffentlichte [25, 26]. Seither wurde es in zahlreichen Modifikationen zur Erklärung verschiedener Phänomene herangezogen, darunter dem Ferro- [1–3], dem Para- [27] und dem Antiferromagnetismus [28] in Übergangsmetallen sowie der Hochtemperatursupraleitung [29]. Des Weiteren stellt das Hubbard-Modell ein generisches Modell zur Beschreibung der wesentlichen Physik des Mott-Hubbard Metall-Isolator-Übergangs dar.

1.1.1 Beschreibung stark korrelierter Gitterelektronen

Der Hamilton-Operator eines Systems stark korrelierter Gitterelektronen in einem ortsfesten, periodischen Gitterpotential der Ionen $V_{\text{ion}}(\mathbf{r})$ nimmt in zweiter Quantisierung die folgende Gestalt an

$$\begin{aligned}\hat{H} =& \sum_{\sigma} \int \mathrm{d}\mathbf{r}\, \hat{\psi}^{\dagger}_{\sigma}(\mathbf{r}) \Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_{\text{ion}}(\mathbf{r}) \Big] \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) \\ &+ \sum_{\sigma,\sigma'} \int \mathrm{d}\mathbf{r} \int \mathrm{d}\mathbf{r}'\, \hat{\psi}^{\dagger}_{\sigma}(\mathbf{r}) \hat{\psi}^{\dagger}_{\sigma'}(\mathbf{r}') V_{\text{ee}}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) \;, \end{aligned} \tag{1.1}$$

mit den Feldoperatoren $\hat{\psi}^{\dagger}_{\sigma}(\mathbf{r})$ bzw. $\hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r})$, die ein Elektron mit Spin σ am Ort $\mathbf{r}$ erzeugen bzw. vernichten, dem Laplace-Operator Δ und der Wechselwirkung zwischen den Elektronen $V_{\text{ee}}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ (hier der reinen Coulomb-Wechselwirkung $V_{\text{ee}}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = e^2/|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$). Unter dem Einfluss des periodischen Gitterpotentials $V_{\text{ion}}(\mathbf{r})$ spaltet sich das freie elektronische Band in unendlich viele Bänder mit den Blochfunktionen $\phi_{\mathbf{k}\alpha}(\mathbf{r})$ auf. Aus diesen lassen sich die am Platz $\mathbf{R}_i$ lokalisierten Wannier-Funktionen

$$\Phi_{i\alpha}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \phi_{\mathbf{k}\alpha}(\mathbf{r}) \tag{1.2}$$

bilden, wobei L die Anzahl der Gitterplätze angibt. Des Weiteren lassen sich Erzeuger- und Vernichteroperatoren $\hat{c}^{\dagger}_{i\alpha\sigma}$ und $\hat{c}_{i\alpha\sigma}$ für die Elektronen mit Spin $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ in einem Band α an der Stelle $\mathbf{R}_i$ konstruieren

$$\hat{c}^{\dagger}_{i\alpha\sigma} = \int \mathrm{d}\mathbf{r}\, \Phi_{i\alpha}(\mathbf{r}) \hat{\psi}^{\dagger}_{\sigma}(\mathbf{r}) \quad \longleftrightarrow \quad \hat{\psi}^{\dagger}_{\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_{i,\alpha} \Phi^{*}_{i\alpha}(\mathbf{r}) \hat{c}^{\dagger}_{i\alpha\sigma} \;, \tag{1.3}$$

mittels derer der Hamilton-Operator in eine Gitterbasisdarstellung [1]

$$\hat{H} = \sum_{i,j,\alpha,\sigma} t_{ij}^{\alpha} \hat{c}_{i\alpha\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\alpha\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,m,n} \sum_{\alpha,\alpha',\beta,\beta'} \sum_{\sigma,\sigma'} v_{ijmn}^{\alpha\alpha'\beta\beta'} \hat{c}_{i\alpha\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\alpha'\sigma'}^{\dagger} \hat{c}_{n\beta'\sigma'} \hat{c}_{m\beta\sigma} , \tag{1.4}$$

mit den Hüpfamplituden

$$t_{ij}^{\alpha} = \int \mathrm{d}\mathbf{r}\, \Phi_{i\alpha}^{*}(\mathbf{r}) \Big[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\mathrm{ion}}(\mathbf{r}) \Big] \Phi_{j\alpha}(\mathbf{r}) \tag{1.5}$$

und den Matrixelementen

$$v_{ijmn}^{\alpha\alpha'\beta\beta'} = \int \mathrm{d}\mathbf{r} \int \mathrm{d}\mathbf{r}'\, \Phi_{i\alpha}^{*}(\mathbf{r}) \Phi_{j\alpha'}^{*}(\mathbf{r}) V_{\mathrm{ee}}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \Phi_{n\beta'}(\mathbf{r}) \Phi_{m\beta}(\mathbf{r}) \tag{1.6}$$

transformiert werden kann.

1.1.2 Das Einband-Hubbard-Modell

Das durch den Hamilton-Operator (1.4) formalisierte Modell stark korrelierter Gitterelektonen beinhaltet eine sehr große Anzahl von Modellparametern. Diese lässt sich unter Verwendung von vereinfachten Annahmen deutlich reduzieren, ohne dass die wesentlichen Effekte der stark korrelierten Gitterelektronen unzureichend erfasst werden. Eine Beschränkung der Untersuchung auf ein einzelnes Band liefert $\alpha = \alpha' = \beta = \beta' = 1$. Somit können zum einen die Summen über den Bandindex als auch der Bandindex selbst weggelassen werden. Wird des Weiteren das einzelne Band als schmal angenommen, so ähneln die Wannier-Funktionen den an verschiedenen Plätzen zentrierten atomaren s-Wellenfunktionen. Diese weisen untereinander einen geringen Überlapp auf, so dass das intraatomare Matrixelement v_{iiii}, die sog. *„on site"-Wechselwirkung* in (1.6), im Vergleich zu allen übrigen Matrixelementen deutlich dominiert. Es genügt daher zumeist, ausschließlich dieses zu berücksichtigen. Die Beiträge aller übrigen Matrixelemente werden vernachlässigt [1]

$$v_{ijmn}^{\alpha\alpha'\beta\beta'} \equiv v_{ijmn} = U \delta_{ij} \delta_{im} \delta_{in} \; . \tag{1.7}$$

Eine Beschränkung der Elektronenbewegung auf isotrope Nächstnachbarn-Hüpfprozesse vereinfacht die Hüpfamplituden (1.5) zu

$$t_{ij}^{\alpha} \equiv t_{ij} = \begin{cases} -t\,, & \text{falls } i \text{ und } j \text{ nächste Nachbarn sind} \\ 0\,, & \text{sonst.} \end{cases} \tag{1.8}$$

Vernachlässigt man die zu $\hat{n}_{i\sigma}^2 = \hat{n}_{i\sigma}$ proportionalen Beiträge, die lediglich das chemische Potential verschieben, so gelangt man schließlich zu einem Hamilton-Operator für das sog. *Einband-Hubbard-Modell*

$$\hat{H}_{\mathrm{HM}} = -t \sum_{\langle i,j \rangle,\sigma} \left(\hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} + \mathrm{h.c.} \right) + U \sum_{i} \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \; . \tag{1.9}$$

Hierbei parametrisiert t die kinetische Energie und $U \geq 0$ die lokale repulsive Coulomb-Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen mit entgegengesetzten Spins am gleichen Gitterplatz. Die Klammern $\langle \ldots \rangle$ bezeichnen die Summation über die direkt benachbarten Gitterplätze. $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{c}_{i\sigma}$ ist der Besetzungszahloperator, der die Besetzung eines Gitterplatzes i mit einem Spin σ misst. Mittels Fourier-Transformation der Erzeuger- und Vernichteroperatoren

$$\hat{c}_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \tag{1.10}$$

lässt sich der Hamilton-Operator (1.9) im Impulsraum in folgender Weise darstellen

$$\hat{H}_{\mathrm{HM}} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{U}{L} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\uparrow} \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}'\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \ , \tag{1.11}$$

mit der Dispersionsrelation

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -t \sum_{\langle i,0 \rangle} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \ , \tag{1.12}$$

wobei die Summe sich hier über die zum Platz 0 benachbarten Gitterplätze erstreckt. Die Konvention $t \geq 0$ sorgt dafür, dass die Dispersionsrelation für fast alle Gittertypen ein Minimum im Zentrum der Brillouinzone aufweist.

Das Einband-Hubbard-Modell ist das konzeptionell einfachste Modell korrelierter Gitterelektronen. Es beinhaltet eine überschaubare Anzahl von Modellparametern, darunter die Bandbreite W des Einelektron-Bandes mit der Dispersionsrelation $\epsilon_{\mathbf{k}}$, die mit der Hüpfamplitude t verknüpft ist, die Wechselwirkungsstärke U, die Dimension d, die Wahl der Gitterstruktur, die Temperatur T und die Elektronendichte $n = N/L$. Die Gesamtzahl der durch das Modell beschriebenen Gitterelektronen $N = N_{\uparrow} + N_{\downarrow}$ ist hierbei auf $0 \leq N \leq 2L$ beschränkt.

In einigen Fällen entspricht es der Konvention, den Hamilton-Operator (1.9) mit einem zusätzlichen Term zu ergänzen, um die auf paaren[1] Gittern enthaltene Teilchen-Loch-Symmetrie besonders hervorzuheben ($\hat{N} = \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i\sigma}$)

$$\hat{H}_{\mathrm{HM}} \rightarrow \hat{H} = \hat{H}_{\mathrm{HM}} - \frac{U}{2}\left(\hat{N} - \frac{L}{2}\right) . \tag{1.13}$$

Der ergänzte Hamilton-Operator nimmt somit die folgende Form an

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle,\sigma} \left(\hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma} + \mathrm{h.c.}\right) + U \sum_{i} \left(\hat{n}_{i\uparrow} - \frac{1}{2}\right)\left(\hat{n}_{i\downarrow} - \frac{1}{2}\right) . \tag{1.14}$$

[1] Ein hinsichtlich des Einband-Hubbard-Modells paares („bipartite“) Gitter ist ein Gitter, das in zwei Untergitter A und B unterteilt werden kann, so dass Elektronen-Hüpfprozesse nur zwischen einem Platz i eines der beiden Untergitter (z. B. $i \in A$) und einem Platz j des anderen Untergitters ($j \in B$) stattfinden können.

Hieraus lässt sich unmittelbar erkennen, dass auf paaren Gittern die Teilchen-Loch-Transformation

$$\tau: \quad \hat{c}^\dagger_{i\sigma} \to \gamma_i \hat{c}_{i\sigma}; \quad \hat{c}_{i\sigma} \to \gamma_i \hat{c}^\dagger_{i\sigma} \quad \text{mit} \quad \gamma_i = \begin{cases} +1\,, & \text{falls } i \in A \\ -1\,, & \text{falls } i \in B \end{cases} \tag{1.15}$$

den Hamilton-Operator $\hat{H}$ auf sich selbst abbildet. Des Weiteren lässt sich als Konsequenz aus der Teilchen-Loch-Symmetrie folgern, dass die Festlegung des chemischen Potentials auf Null ($\mu = 0$) halbe Bandfüllung für jedes U und alle $T \geq 0$ garantiert. Aus

$$\langle \hat{N} \rangle(\mu) = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \mathrm{Sp} \left(\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \right) \tag{1.16}$$

ergibt sich in Verbindung mit (1.14) und (1.15)

$$\begin{aligned} \langle \hat{N} \rangle &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \mathrm{Sp} \left(\mathrm{e}^{-\beta(\hat{H} - \mu(2L - \hat{N}))} \right) \\ &= 2L - \langle \hat{N} \rangle(-\mu)\,. \end{aligned} \tag{1.17}$$

Somit folgt $\langle \hat{N} \rangle(\mu = 0) = L$.

Das Einband-Hubbard-Modell konnte bisher nur in einer Dimension mittels des Bethe-Ansatzes [30] exakt gelöst werden. Es ist jedoch unklar, inwieweit sich die Eigenschaften des eindimensionalen Modells auf höherdimensionale ($d > 1$) Modelle übertragen lassen. Das eindimensionale Hubbard-Modell beschreibt beispielsweise eine Luttinger-Flüssigkeit [31], wohingegen von dem dreidimensionalen Modell beim Auftreten schwacher Wechselwirkung ein Fermiflüssigkeitsverhalten erwartet wird. Für höhere Dimensionen $d > 1$ existieren dennoch einige einfache Grenzfälle, die exakt gelöst werden können. Im Folgenden werden diese für den in dieser Arbeit zu betrachtenden Fall halber Bandfüllung ($n = 1$) kurz dargestellt. Eine ausführliche, von der Wahl der Bandfüllung unabhängige Beschreibung dieser Grenzfälle, lässt sich beispielsweise in der Referenz [4] nachlesen.

1. **Fermigas-Limes:**
   Im Falle verschwindender Wechselwirkungsstärke ($U = 0$) ist der in (1.10) verbleibende Beitrag der kinetischen Energie

   $$\hat{H}_{\mathrm{kin}} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \tag{1.18}$$

   diagonal im Impulsraum. Das Modell beschreibt dann ein freies Fermigas und somit ein (ideales) Metall.

2. **Atomarer Limes:**
   Eine Bewegung der Gitterelektronen ist im atomaren Limes ($t = 0$) nicht möglich. Bei halber Bandfüllung wird im Grundzustand jeder Gitterplatz genau einfach besetzt. Der Spin jedes Elektrons ist jedoch beliebig, wodurch der Grundzustand 2^L-fach entartet ist. Da keine Elektronenbewegung stattfindet, existieren keine stromtragenden Zustände. Das Modell beschreibt somit einen Isolator mit einer Anregungslücke $\Delta = U$.

3. **Limes starker Wechselwirkung:**
   Im Limes starker Wechselwirkung ($U \gg t$) und bei halber Bandfüllung wird das Einband-Hubbard-Modell äquivalent zum Heisenberg-Modell [4], das durch den Hamilton-Operator
   $$\hat{H}_{\mathrm{Heis}} = \sum_{\langle i,j \rangle} J\left(\hat{\mathbf{S}}_i \hat{\mathbf{S}}_j + \frac{1}{4}\right) \tag{1.19}$$
   mit der Kopplungsstärke
   $$J = \frac{4t^2}{U} > 0 \tag{1.20}$$
   beschrieben wird. Somit beschreibt das Einband-Hubbard-Modell bei halber Bandfüllung und im Limes starker Wechselwirkung einen antiferromagnetischen Isolator.

Die Untersuchung der leicht lösbaren Grenzfälle ergibt, dass das Einband-Hubbard-Modell bei halber Bandfüllung für $U = 0$ ein Metall und für $U \gg t$ einen antiferromagnetischen Isolator beschreibt. Grundsätzlich beschreibt das Einband-Hubbard-Modell mit Nächstnachbarn-Hüpfeprozessen auf einem paaren Gitter bei halber Bandfüllung unterhalb der Néel-Temperatur bereits bei einem endlichen Wert für U/t einen antiferromagnetischen Isolator. Um mittels dieses Modells einen Mott-Hubbard Metall-Isolator-Übergang bei $T = 0$ untersuchen zu können, muss die antiferromagnetische Ordnung unterdrückt werden. Man erwartet dann, dass dieser Übergang an einer endlichen kritischen Wechselwirkungsstärke U_{c} (t sei hier fest) stattfindet.

1.1.3 Mott-Hubbard Metall-Isolator-Übergang

Das Phasendiagramm des Einband-Hubbard-Modells als Funktion der Temperatur T und der Wechselwirkungsstärke U (t sei hier fest) besitzt bei halber Bandfüllung und Abwesenheit magnetischer Frustrationen drei unterschiedliche Phasen: die paramagnetische metallische-, die paramagnetische isolierende- und die antiferromagnetische isolierende Phase [12].

Diese Arbeit widmet sich der Untersuchung des Metall-Isolator-Übergangs zwischen der paramagnetischen metallischen- und der paramagnetischen isolierenden Phase bei $T = 0$ im Rahmen der dynamischen Molekularfeldtheorie. Es handelt sich hierbei um einen sog. *Mott-Hubbard-Übergang* [4, 5], d. h. um einen Übergang, der durch die Änderung der Wechselwirkungsstärke zwischen den Elektronen in einem homogenen System induziert wird. Die antiferromagnetische Phase, in der sich das zu betrachtende Einband-Hubbard-Modell auf dem Bethe-Gitter bei halber Bandfüllung und $T = 0$ eigentlich befindet, wird durch die Beschränkung auf die spin-symmetrischen Lösungen innerhalb der dynamischen Molekularfeldtheorie unterdrückt [4].

Der Mott-Hubbard-Übergang wurde seit seiner Entdeckung Gegenstand zahlreicher experimenteller und theoretischer Untersuchungen. Zwei in ihren Ausgangspunkten grundsätzlich unterschiedliche Betrachtungsweisen für seine Erklärung, die im Rahmen der dynamischen Molekularfeldtheorie vereinheitlicht ihre Legitimität finden, werden im Folgenden kurz dargestellt.

Hubbards Beschreibung des Mott-Hubbard-Übergangs

Hubbard [25] verwendete den Grenzfall hoher Wechselwirkungsstärken als Ausgangspunkt für die Beschreibung des Mott-Hubbard-Übergangs. In dieser spaltet sich die ursprüngliche Zustandsdichte (der halben Bandbreite D) für hinreichend große Wechselwirkungsstärken U (t sei hier fest) auf in ein *unteres Hubbard-Band*, das den Löchern bzw. leeren Gitterplätzen entspricht, und ein *oberes Hubbard-Band*, das den doppelt besetzten Gitterplätzen entspricht. Für große U-Werte sind die beiden Bänder durch eine Energielücke Δ von der Größenordnung $U - 2D$ getrennt. Im Falle $\Delta > 0$ liegt ein Isolator vor.

Die Energielücke nimmt mit Verringerung der Wechselwirkungsstärke ab, bis schließlich unterhalb eines kritischen Wertes $U_{\mathrm{c1}}^{\mathrm{H}}$ mit dem Überlapp der beiden Bänder ein Übergang vom Isolator zum Metall stattfindet. Der Mott-Übergang in Hubbards Beschreibung wird somit durch das Verschwinden der Energielücke an einer kritischen Wechselwirkungsstärke charakterisiert, $\Delta(U_{\mathrm{c1}}^{\mathrm{H}}) = 0$. Die Erfassung der Fermiflüssigkeit-Eigenschaften eines Metalls ist jedoch in dieser effektiven Bandbeschreibung nicht möglich.

Brinkman und Rice Beschreibung des Mott-Hubbard-Übergangs

Anders als Hubbard verwendeten Brinkman und Rice [32] die metallische Phase als Ausgangspunkt für die Beschreibung des Mott-Hubbard-Übergangs. Sie beschrieben die metallische Phase als eine stark renormierte Fermiflüssigkeit mit einer reduzierten Niederenergieskala bzw. einer reduzierten effektiven Fermienergie $\epsilon_{\mathrm{F}}^* = \mathcal{Z}\epsilon_{\mathrm{F}}$. Die Größe dieser Energieskala ist von der Ordnung $\mathcal{Z}D$, wobei der Renormierungsfaktor $\mathcal{Z}$ das sog. *Quasiteilchengewicht* bezeichnet, das mit der Masse des Fermiflüssigkeit-Quasiteilchens m^* wie folgt zusammenhängt

$$\frac{1}{\mathcal{Z}} = \frac{m^*}{m} \,. \tag{1.21}$$

Mit zunehmender Wechselwirkungsstärke nimmt die Größe dieser Energieskala ab, bis sie bei einer kritischen Wechselwirkungsstärke $U_{\mathrm{c2}}^{\mathrm{BR}}$ vollständig gemäß $\mathcal{Z} \propto (U_{\mathrm{c2}}^{\mathrm{BR}} - U)$ verschwindet. Der Mott-Hubbard-Übergang in dieser Beschreibung wird somit durch die Lokalisierung der Fermiflüssigkeit-Quasiteilchen,

$$\frac{m^*}{m} \propto \frac{1}{U_{\mathrm{c2}}^{\mathrm{BR}} - U} \to \infty \quad (\text{bzw. } \mathcal{Z} \to 0) \tag{1.22}$$

induziert. Das Verschwinden dieser Quasiteilchen kennzeichnet die isolierende Phase.

Die Beschreibung von Brinkman und Rice erfasst zwar die niederenergetischen Eigenschaften stark korrelierter Metalle, sie berücksichtigt jedoch keine hochenergetischen Eigenschaften wie beispielsweise die Bildung der Hubbard-Bänder, die bereits in der metallischen Phase vorhanden sein müssten. Des Weiteren scheitert dieser Ansatz an der Beschreibung der isolierenden Phase oberhalb von $U_{\mathrm{c2}}^{\mathrm{BR}}$.

1.2 Das Einstörstellen-Anderson-Modell

Das Einstörstellen-Anderson-Modell wurde 1961 von P. W. Anderson [13] eingeführt. Es spielte lange Zeit eine Schlüsselrolle bei der Untersuchung von Effekten, die durch die Anwesenheit magnetischer Störstellen in Metallen verursacht werden [33]. Innerhalb der letzten 40 Jahre wurden zahlreiche numerische sowie analytische Verfahren entwickelt, die eine ausführliche Untersuchung dieses Modells sowie der in ihm formalisierten Eigenschaften ermöglichen. Das Interesse am Einstörstellen-Anderson-Modell stieg durch die Einführung der dynamischen Molekularfeldtheorie [12]. Im Rahmen dieser Theorie können stark korrelierte Elektronensysteme im Grenzwert unendlicher Koordinationszahl auf ein Modell einer einzelnen Störstelle, eingebettet in einem effektiven, selbstkonsistent zu bestimmenden Elektronenbad, abgebildet werden. Die in den 40 Jahren gesammelten Erfahrungen im Umgang mit Störstellenmodellen kommen somit der Untersuchung von stark korrelierten Elektronensytemen zugute.

1.2.1 Beschreibung einer Störstelle in einem Wirtsmetall

Eine Störstelle in einem Wirtsmetall lässt sich durch einen allgemeinen Hamilton-Operator beschreiben, der alle Elektronen samt ihrer Wechselwirkungen miteinbezieht [33]. Für ein System mit N_0 Elektronen besitzt dieser die folgende Gestalt

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N_0} \Big(\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + U(\mathbf{r}_i) + V_{\mathrm{imp}}(\mathbf{r}_i) \Big) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^{N_0} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_{i=1}^{N_0} \lambda(\mathbf{r}_i) \hat{\mathbf{l}}_i \cdot \hat{\sigma}_i \; . \tag{1.23}$$

Der erste Term in (1.23) beschreibt die kinetische Energie der Elektronen, der zweite Term das periodische Potential der Wirtsmetallatomkerne, der dritte Term entspricht einem zusätzlichen Potential, das aus der Ersetzung von Wirtsmetallatomkernen durch die Atomkerne der Störstellen resultiert. Der vierte Term beschreibt die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen. Der letzte Term stellt die Spin-Bahn-Wechselwirkung dar, die eine relativistische Korrektur ist.

Eine störungstheoretische Behandlung von (1.23) ist aufgrund der hier auftretenden starken Korrelationen zwischen den Elektronen nicht möglich. Möglich ist eine Behandlung im Rahmen der Dichtefunktional-Theorie (DFT), die eine genaue Berechnung der Grunzustandseigenschaften erlaubt, sofern die Korrelationen zwischen den Elektronen nicht zu stark sind. Für die Bestimmung der Grundzustandseigenschaften, Anregungen sowie dynamischen Größen stark korellierter Systeme erweist sich diese Behandlung als zu ungenau.

Anstatt den vollen Hamilton-Operator (1.23) zu untersuchen, können vereinfachte Modell-Hamilton-Operatoren konstruiert werden, die die niederenergetischen Anregungen in Verbindung mit der Störstelle beschreiben und alle zur Untersuchung der Störstelleneffekte irrelevanten Eigenschaften vernachlässigen. Üblicherweise werden in solchen Modellen ausschließlich einfache Metalle mit breiten Leitungsbändern, die aus den s- und p-Zuständen gebildet werden, betrachtet. Aufgrund dieser Einschränkung können die Leitungselektronen als nahezu freie Teilchen, die sich in einem periodischen Potential bewegen betrachtet werden. Die langreichweitige Coulomb-Wechselwirkung zwischen ihnen ist abgeschirmt, so dass sie im Wesentlichen als Quasiteilchen behandelt werden können, deren kurzreichweitige Wechselwirkungen aufgrund der hohen Delokalisierung in breiten Leitungsbändern vernachlässigt werden können. Die Leitungselektronen des Wirtsmetalls können folglich mittels eines Einelektron-Hamilton-Operators in zweiter Quantisierung beschrieben werden

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \ , \tag{1.24}$$

wobei $\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}$ und $\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}$ in (1.24) die Erzeuger- und Vernichteroperatoren der Blochzustände $\phi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r})$ zum Wellenvektor $\mathbf{k}$, dem Energieeigenwert $\epsilon_{\mathbf{k}}$ und der Spinkomponente σ sind. Sie genügen den üblichen fermionischen Antivertauschungsrelationen

$$[\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}'\sigma'}]_{+} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\sigma\sigma'} \ , \quad [\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{c}_{\mathbf{k}'\sigma'}]_{+} = 0 \ . \tag{1.25}$$

Die Leitungszustände werden durch die Zustandsdichte

$$\rho_0(\epsilon) = \sum_{\mathbf{k}} \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}}) \tag{1.26}$$

charakterisiert, wobei $\delta(x)$ die Diracsche-Deltafunktion ist.

In der Beschreibung der Leitungselektronen als freie Teilchen können die Störstelleneffekte durch die Einbeziehung eines effektiven Störstellenpotentials $V^{\text{eff}}_{\text{imp}}$ berücksichtigt werden. Dieser Ansatz erweist sich zwar für die Beschreibung der meisten Störstellen der seltenen Erden und der Übergangsmetalle als unzureichend [33], er ist jedoch für die Formulierung eines erweiterten Störstellenmodells hilfreich. Das Störstellenpotential wird mittels der Blochzustände der Leitungselektronen im Wirtsmetall dargestellt. Der um den Einstörstellenbeitrag erweiterte Hamilton-Operator besitzt dann die folgende Gestalt

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\sigma} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \ , \tag{1.27}$$

mit den Matrixelementen $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \langle \mathbf{k} | V^{\text{eff}}_{\text{imp}} | \mathbf{k}' \rangle$.

1.2.2 Das Einstörstellen-Anderson-Modell

Ein hinreichend starkes attraktives lokales Störstellenpotential ist in der Lage, einen Bindungszustand unterhalb des Leitungsbandes des Wirtsmetalls zu erzeugen. Bei nicht hinreichender Stärke kann es zumindest vorübergehend Leitungselektronen in seiner Umgebung lokalisieren. Dies geschieht mittels der resonanten Streuung an der Störstelle, die als *Resonanz virtueller Bindungszustände* bezeichnet wird und sich in einem schmalen Peak (Kondo-Peak oder Abrikosov-Suhl-Resonanz) in der Zustandsdichte der Leitungselektronen äußert. In einem solchen Zustand verbleiben die Elektronen zwar für eine relativ lange Zeit in der Umgebung der Störstelle, dieser

Zustand ist jedoch kein Bindungszustand im herkömlichen Sinne, da die Wellenfunktionen weit entfernt von der Störstelle zu Blochfunktionen werden.

Die Resonanz der virtuellen Bindungszustände tritt bei Störstellen aus Übergangsmetallen bzw. seltenen Erden auf, falls die d- bzw. f-Niveaus in dem Leitungsband des Wirtsmetalls liegen. In dem Radialanteil der Schrödingergleichung existiert ein effektives, von der Bahndrehimpulsquantenzahl abhängiges Potential $l(l+1)/r^2$. Dieses neigt zu einer Lokalisierung von Zuständen mit hohen Bahndrehimpulsquantenzahlen ($l = 2, 3$) innerhalb der Potentialbarriere, so dass Zustände eines Störstellenions den atomaren d- bzw. f-Zuständen ähneln. Diese Zustände sind virtuelle Zustände, da die Elektronen mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit durch die Potentialbarriere hindurchtunneln können.

Anderson [13] gelang die Berechnung dieser Resonanz durch Modifikation der atomaren d-Wellenfunktionen einer isolierten Störstelle unter Berücksichtigung der Anwesenheit benachbarter Metallionen des Wirtsmetalls. Die daraus resultierende Hybridisierung mit den Blochzuständen der Leitungselektronen wird durch das Matrixelement $V_{\mathbf{k}}$ beschrieben

$$V_{\mathbf{k}} = \sum_{\delta} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\mathbf{d}_\delta} \langle \phi_{\mathrm{d}} | \hat{H} | \psi_{\mathbf{d}_\delta} \rangle \ . \tag{1.28}$$

Hierbei ist ϕ_{d} die atomare d-Wellenfunktion der isolierten Störstelle, $\psi_{\mathbf{d}_\delta}$ die Wannier-Wellenfunktion der Leitungselektronen an der Stelle $\mathbf{d}_\delta$ und $\hat{H}$ der Hamilton-Operator aus (1.23). In dieser gemischten Darstellung besitzt der Hamilton-Operator die folgende Gestalt

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \epsilon_{\mathrm{d}} \hat{c}^\dagger_{\mathrm{d}\sigma} \hat{c}_{\mathrm{d}\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} (V_{\mathbf{k}} \hat{c}^\dagger_{\mathrm{d}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + V^*_{\mathbf{k}} \hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathrm{d}\sigma}) \ , \tag{1.29}$$

wobei ϵ_{d} das d-Niveau des Störstellenions und $\hat{c}^\dagger_{\mathrm{d}\sigma}$ bzw. $\hat{c}_{\mathrm{d}\sigma}$ die Erzeuger- bzw. Vernichteroperatoren für Elektronen in diesen Zuständen sind. Dieser Hamilton-Operator formalisiert das *nichtwechselwirkende* Einstörstellen-Anderson-Modell.

Für die Beschreibung eines lokalen magnetischen Moments im Rahmen dieses Modells wird eine repulsive Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen in d-Zuständen des Störstellenions eingeführt

$$U = \int \phi^*_{\mathrm{d}}(\mathbf{r}) \phi^*_{\mathrm{d}}(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \phi_{\mathrm{d}}(\mathbf{r}) \phi_{\mathrm{d}}(\mathbf{r}') \, \mathrm{d}\mathbf{r} \, \mathrm{d}\mathbf{r}' \ . \tag{1.30}$$

Des Weiteren wird angenommen, dass die d-Zustände des Störstellenions nicht entartet sind, wodurch das d-Niveau mit maximal zwei Elektronen besetzt werden kann. Ein leeres d-Niveau liefert keinen zusätzlichen Beitrag zur Gesamtenergie, ein einfachbesetztes d-Niveau hingegen einen Beitrag ϵ_{d}, resultierend aus der Bindungsenergie des Elektrons. Im Falle einer Doppelbesetzung des d-Niveaus erhält man einen zusätzlichen Beitrag $2\epsilon_{\mathrm{d}} + U$, resultierend aus den Bindungsenergien beider Elektronen und einem zusätzlichen Beitrag infolge der repulsiven Coulomb-Wechselwirkung zwischen ihnen.

Erweitert man den Hamilton-Operator (1.29) um diese Wechselwirkung, so erhält man den Hamilton-Operator für das *wechselwirkende* Einstörstellen-Anderson-Modell

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \epsilon_{\mathrm{d}} \hat{n}_{\mathrm{d}\sigma} + U \hat{n}_{\mathrm{d}\uparrow} \hat{n}_{\mathrm{d}\downarrow} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} (V_{\mathbf{k}} \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{d}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + V^{*}_{\mathbf{k}} \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathrm{d}\sigma}) \; , \qquad (1.31)$$

mit dem Besetzungszahloperator $\hat{n}_{\mathrm{d}\sigma} = \hat{c}^{\dagger}_{\mathrm{d}\sigma} \hat{c}_{\mathrm{d}\sigma}$.

1.2.3 Abbildung auf eine lineare Kette

Für eine numerische Untersuchung des Einstörstellen-Anderson-Modells mittels eines für Ketten konzipierten Verfahren ist es zweckmäßig, den Hamilton-Operator (1.31) so zu transformieren, dass dieser eine lineare halb-unendliche Kette mit einer Störstelle an ihrem Anfang darstellt. Dazu werden zuerst alle mit der Störstelle hybridisierten Leitungselektronen auf den ersten Platz der halb-unendlichen Kette abgebildet

$$\hat{c}^{\dagger}_{0\sigma} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}} \; , \qquad V = \Big(\sum_{\mathbf{k}} |V_{\mathbf{k}}|^2 / N_s \Big)^{1/2} \; . \qquad (1.32)$$

Der Beitrag der freien Leitungselektronen (c: conduction)

$$\hat{H}_{\mathrm{c}} \equiv \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \qquad (1.33)$$

wird anschließend einer aus dem Lanczos-Algorithmus bekannten Transformation unterzogen. Er wird bezüglich einer neuen Basis $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, \ldots\}$ dargestellt, deren Zustände angefangen mit dem lokalisierten Einelekron-Zustand $|0\rangle$ aus der Sequenz

$$|0\rangle, \hat{H}_{\mathrm{c}}|0\rangle, \hat{H}^2_{\mathrm{c}}|0\rangle, \hat{H}^3_{\mathrm{c}}|0\rangle, \ldots \qquad (1.34)$$

mittels Schmidtscher Orthogonalisierung gebildet werden. Unter Ausnutzung der Hermitizität von $\hat{H}_{\mathrm{c}}$ lassen sich diese rekursiv wie folgt bestimmen

$$|n+1\rangle = \frac{1}{\gamma_n} (\hat{H}_{\mathrm{c}}|n\rangle - |n\rangle\langle n|\hat{H}_{\mathrm{c}}|1\rangle - |n-1\rangle\langle n-1|\hat{H}_{\mathrm{c}}|n\rangle) \; , \qquad (1.35)$$

wobei γ_n eine entsprechende Normierungskonstante ist. Bezüglich dieser Basis besitzt $\hat{H}_{\mathrm{c}}$ tridiagonale Gestalt mit den Matrixelementen

$$\langle m|\hat{H}_{\mathrm{c}}|n\rangle = \begin{cases} \epsilon_n \, , & \text{falls } m = n \\ \gamma_n \, , & \text{falls } m = n+1 \\ \gamma^{*}_{n-1} \, , & \text{falls } m = n-1 \\ 0 \, , & \text{sonst .} \end{cases} \qquad (1.36)$$

Die Koeffizienten ϵ_n werden hierbei über die Diagonalelemente von $[\hat{H}_{\mathrm{c}}]$ definiert. Die Wirkung von $\hat{H}_{\mathrm{c}}$ auf einen Zustand $|n\rangle$ ist durch

$$\hat{H}_{\mathrm{c}}|n\rangle = \gamma_n |n+1\rangle + \epsilon_n |n\rangle + \gamma^{*}_{n-1} |n-1\rangle \qquad (1.37)$$

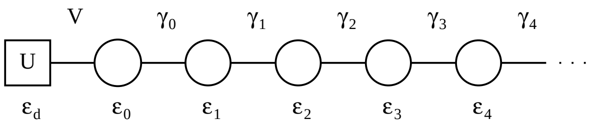

Abbildung 1.1: Halb-unendliche Kette mit einer Störstelle an ihrem Anfang.

gegeben. Somit lässt sich $\hat{H}_{\mathrm{c}}$ mittels Erzeuger- und Vernichteroperatoren in der folgenden Weise darstellen

$$\hat{H}_{\mathrm{c}} = \sum_{n,\sigma} \epsilon_n \hat{c}_{n\sigma} \hat{c}^\dagger_{n\sigma} + \sum_{n,\sigma} \left(\gamma_n \hat{c}^\dagger_{n\sigma} \hat{c}_{n+1,\sigma} + \gamma^*_n \hat{c}^\dagger_{n+1,\sigma} \hat{c}_{n\sigma} \right) \ . \tag{1.38}$$

Unter Verwendung von (1.32) und (1.38) nimmt der Hamilton-Operator (1.31) die folgende Gestalt an

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\sigma} \epsilon_d \hat{n}_{d\sigma} + U \hat{n}_{d\uparrow} \hat{n}_{d\downarrow} + \sum_{\sigma} \left(V \hat{c}^\dagger_{d\sigma} \hat{c}_{0\sigma} + V^* \hat{c}^\dagger_{0\sigma} \hat{c}_{d\sigma} \right) \\ & + \sum_{n,\sigma} \epsilon_n \hat{c}_{n\sigma} \hat{c}^\dagger_{n\sigma} + \sum_{n,\sigma} \left(\gamma_n \hat{c}^\dagger_{n\sigma} \hat{c}_{n+1,\sigma} + \gamma^*_n \hat{c}^\dagger_{n+1,\sigma} \hat{c}_{n\sigma} \right) \ . \end{aligned} \tag{1.39}$$

Er beschreibt das Einstörstellen-Anderson-Modell als eine halb-unendliche Kette mit einer Störstelle an ihrem Anfang (Abbildung 1.1).

In dieser Darstellung sind die Koeffizienten ϵ_n und γ_n gleichzeitig die Kettenbruchkoeffizienten der Hybridisierungsfunktion ($z \equiv \omega + \mathrm{i}0^+$)

$$\Gamma(z) = |V|^2 \Delta(z) \tag{1.40}$$

mit

$$\Delta(z) = \langle 0 | \frac{1}{z - \hat{H}_{\mathrm{c}}} | 0 \rangle \ . \tag{1.41}$$

Dieser Zusammenhang lässt sich aus der Erkenntnis heraus gewinnen, dass $\Delta(z)$ dem 00-Matrixelement der Inversen zu der tridiagonalen Matrix

$$[z - \hat{H}_{\mathrm{c}}] = \begin{pmatrix} (z-\epsilon_0) & -\gamma_0 & & & \\ -\gamma^*_0 & (z-\epsilon_1) & -\gamma_1 & & \\ & -\gamma^*_1 & (z-\epsilon_2) & -\gamma_2 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \tag{1.42}$$

entspricht [34]. Aufgrund der tridiagonalen Gestalt von $[z - \hat{H}_{\mathrm{c}}]$ kann das 00-Matrixelement der Inversen als ein Quotient zweier Determinanten wie folgt dargestellt werden ($\langle 0|0 \rangle \equiv 1$)

$$\Delta(z) = \frac{D_1(z)}{D_0(z)} \ . \tag{1.43}$$

Hierbei bezeichnet $D_0(z)$ die Determinante der vollen Matrix $[z - \hat{H}_c]$ und $D_k(z)$ die Determinante einer Matrix, die aus der vollen Matrix durch das Weglassen der ersten k Zeilen und Spalten entsteht. Die Laplace-Entwicklung der Determinante $D_0(z)$ nach der ersten Spalte ergibt

$$D_0(z) = (z - \epsilon_0) D_1(z) - |\gamma_0|^2 D_2(z) \ . \tag{1.44}$$

Entsprechend lässt sich für die Determinante $D_k(z)$ eine allgemeine Rekursionsbeziehung gewinnen

$$D_k(z) = (z - \epsilon_k) D_{k+1}(z) - |\gamma_k|^2 D_{k+2}(z) \quad k = 0, 1, 2, \dots \ . \tag{1.45}$$

Durch rekursives Einsetzen von (1.45) in (1.43) erhält man schließlich

$$\begin{aligned}
\Delta(z) = \frac{D_1(z)}{D_0(z)} &= \cfrac{1}{z - \epsilon_0 - |\gamma_0|^2 \cfrac{D_2(z)}{D_1(z)}} \\
&= \cfrac{1}{z - \epsilon_0 - \cfrac{|\gamma_0|^2}{z - \epsilon_1 - |\gamma_1|^2 \cfrac{D_3(z)}{D_2(z)}}} \\
&= \dots
\end{aligned}$$

und somit eine Kettenbruchentwicklung für die Hybridisierungsfunktion

$$\Gamma(z) = \cfrac{|V|^2}{z - \epsilon_0 - \cfrac{|\gamma_0|^2}{z - \epsilon_1 - \cfrac{|\gamma_1|^2}{z - \dots}}} \ . \tag{1.46}$$

1.3 Dynamische Molekularfeldtheorie

Der Umgang selbst mit einfachsten Modellen stark korrelierter Elektronensysteme erweist sich als äußerst schwierig, da sich diese Modelle einer störungstheoretischen Behandlung meist entziehen. Ein in den letzen Jahren entwickeltes Näherungsverfahren, das einen wesentlichen Beitrag zum Verständnis solcher Systeme liefert, ist die *dynamische Molekularfeldtheorie* [6–12].

Die dynamische Molekularfeldtheorie (DMFT) ist eine nichstörungstheoretische Näherung für stark korrelierte Elektronensysteme (hauptsächlich formalisiert in Varianten des Hubbard-Modells), die im Grenzfall unendlicher Koordinationszahl Z bzw. äquivalent dazu im Grenzfall unendlicher Dimension exakt wird. Das Inverse der Koordinationszahl stellt hierbei den Kontrollparameter dieser Näherung dar.

Aufgrund ihres nichtstörungstheoretischen Charakters ist die dynamische Molekularfeldtheorie bei der Untersuchung von Eigenschaften stark korrelierter Elektronensysteme anhand des Einband-Hubbard-Modells nicht auf kleine bzw. große Werte für die Wechselwirkungsstärke U beschränkt. Die wesentliche Idee, die dieser Näherung zugrunde liegt, besteht darin, die Untersuchung eines Gitterproblems mit dessen zahlreichen Freiheitsgraden auf die Untersuchung einer einzelnen Störstelle, eingebettet in einem effektiven, selbstkonsistent zu bestimmenden Medium, und somit auf ein Problem mit deutlich geringerer Komplexität zu reduzieren. Die Dynamik an einem bestimmten Gitterplatz kann als eine Art Wechselwirkung zwischen dessen lokalen Freiheitsgraden mit einem externen, durch die übrigen Freiheitsgrade gebildeten, Bad betrachtet werden. In diesem Sinne liefert das Störstellenproblem einen Einblick in die lokale Dynamik eines Quantenvielteilchensystems.

Anders als in der klassischen Molekularfeldtheorie werden zu diesem Zweck nicht sämtliche, sondern ausschließlich die räumlichen Fluktuationen vernachlässigt. Lokale Quantenfluktuationen, beispielsweise Fluktuationen zwischen möglichen Quantenzuständen an einem bestimmten Gitterplatz, werden in der dynamischen Molekularfeldtheorie vollständig einbezogen. Das lokale Quantenproblem bleibt im Gegensatz zur klassischen Molekularfeldtheorie ein Vielteilchenproblem.

1.3.1 Skalierung von Modellparametern

Um einen sinnvollen Grenzwert $Z \to \infty$ für das Einband-Hubbard-Modell zu definieren, muss die Hüpfamplitude t in (1.9) entsprechend reskaliert werden, damit die mittlere kinetische Energie endlich bleibt. Die Stärke der Coulomb-Wechselwirkung U bleibt für $Z \to \infty$ wohldefiniert, da diese eine lokale Wechselwirkung parametrisiert und somit unabhängig von der Dimension bzw. Koordinationszahl ist. Für isotrope Nächstenachbarn-Hüpfprozesse wird die Hüpfamplitude des Einband-Hubbard-Modells wie folgt skaliert [6]

$$t = \frac{t^*}{\sqrt{Z}} , \tag{1.47}$$

wobei t^* einen von der Koordinationszahl unabhängigen Parameter darstellt. Einige Gittertypen weisen einen linearen Zusammenhang zwischen der Koordinationszahl und der Dimension des Gitters d auf. Der Grenzfall $Z \to \infty$ kann somit gleichermaßen als ein Grenzfall $d \to \infty$ aufgefasst werden.

Im Falle eines d-dimensionalen einfach kubischen Gitters ($Z = 2d$) mit Nächstnachbarnhüpfen und der Gitterkonstante $a \equiv 1$ nimmt die Dispersionsrelation

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{i=1}^{d} \cos(k_i), \quad \mathbf{k} = (k_1, \ldots, k_d) \tag{1.48}$$

nach der Reskalierung (1.47) die folgende Form an

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2\frac{t^*}{\sqrt{2d}} \sum_{i=1}^{d} \cos(k_i) . \tag{1.49}$$

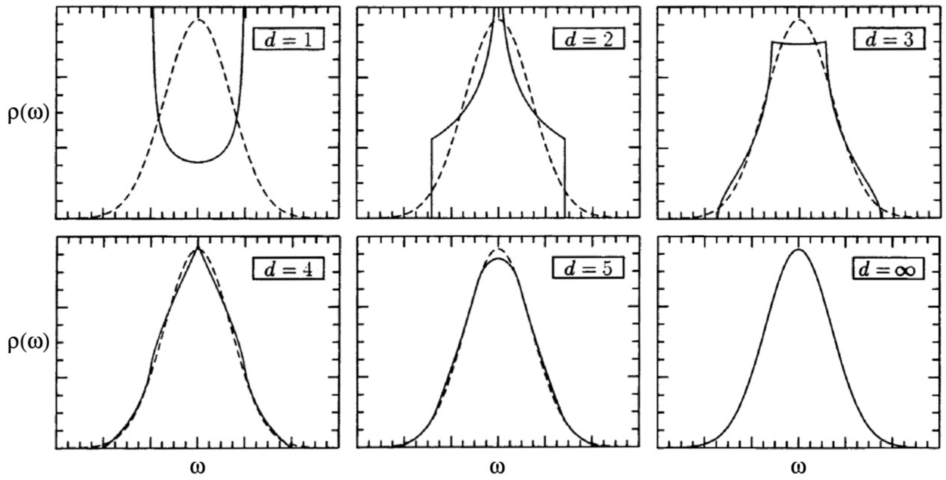

Abbildung 1.2: Zustandsdichte freier Elektronen mit Nächstnachbarnhüpfen auf einem einfach kubischen Gitter verschiedener Dimension [35]. Die gestrichelte Linie stellt die freie Zustandsdichte für ein unendlichdimensionales einfach kubisches Gitter dar.

Sie wird im Limes $d \to \infty$ zu einer unendlichen Summe über statistisch unabhängige Beiträge mit Werten zwischen $-2t^*/\sqrt{2d}$ und $+2t^*/\sqrt{2d}$, und stellt somit eine Zufallsvariable mit Erwartungswert $\langle \epsilon_{\mathbf{k}} \rangle = 0$ und der Standardabweichung t^* dar. Nach dem Zentralen Grenzwertsatz nimmt die freie Zustandsdichte für ein d-dimensionales einfach kubisches Gitter die Form einer Gaußfunktion an

$$\rho^0_\sigma(\epsilon) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}t^*} \exp\Big(-\frac{\epsilon^2}{2t^{*2}}\Big) \ . \tag{1.50}$$

Die Modellierung eines unendlichdimensionalen Systems scheint auf den ersten Blick realitätsfern zu sein. Die Legitimität dieser Vorgehensweise ergibt sich daraus, dass die freie Zustandsdichte des unendlichdimensionalen einfach kubischen Gitters mit der eines endlichdimensionalen ($d \geq 2$) Gitters qualitativ übereinstimmt (vgl. Abbildung 1.2). Zustandsdichten in endlichen Dimensionen weisen jedoch zwei signifikante Unterschiede auf:
Im Gegensatz zu der exponentiell abfallenden Gaußschen-Zustandsdichte besitzen die Zustandsdichten in endlichen Dimensionen scharfe Bandkanten. Des Weiteren weisen die Zustandsdichten in endlichen Dimensionen van Hove-Singularitäten auf.

Um pathologische Effekte zu vermeiden, erweist es sich daher als sinnvoll, für die Untersuchung im Grenzfall $Z \to \infty$ eine freie Zustandsdichte mit scharfen Bandkanten heranzuziehen. Meistens wird die semielliptische Zustandsdichte

$$\rho^0_\sigma(\epsilon) = \frac{1}{2\pi t^{*2}} \sqrt{4t^{*2} - \epsilon^2}, \quad |\epsilon| < 2t^* \tag{1.51}$$

mit der Bandbreite $W = 4t^*$ verwendet, die für freie Elektronen auf einem Bethe-Gitter mit unendlicher Koordinationszahl realisiert ist. Das Bethe-Gitter wird durch

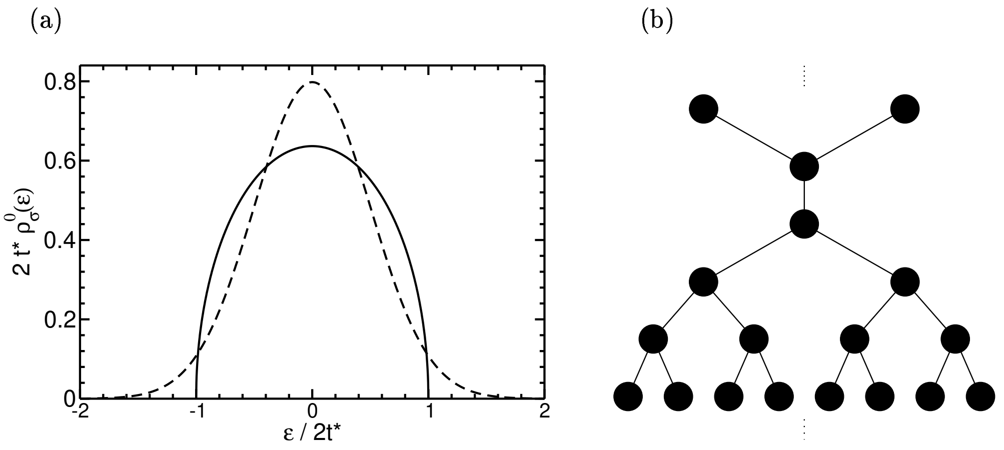

Abbildung 1.3: (a) Semielliptische Zustandsdichte freier Elektronen auf einem Bethe-Gitter unendlicher Koordinationszahl mit Nächstnachbarnhüpfen (durchgezogene Linie) im Vergleich zu der Zustandsdichte freier Elektronen auf einem unendlichdimensionalen einfach kubischen Gitter mit Nächstnachbarnhüpfen (gestrichelte Linie). **(b)** Ausschnitt des Bethe-Gitters mit $Z = 3$ nächsten Nachbarn.

die Koordinationszahl Z vollständig charakterisiert. Es besitzt eine baumähnliche Struktur (*Cayley-Baum*), die entsteht, indem man, ausgehend von einem beliebigen Gitterplatz, Z benachbarte Gitterplätze verbindet, die wiederum mit $(Z-1)$ weiteren Gitterplätzen verbunden werden (vgl. Abbildung 1.2(b)). Es ist ein paares Gitter und zwar unabhängig von der Wahl für Z. Des Weiteren sind auf einem Bethe-Gitter keine geschlossenen Wege möglich, d. h. ein Teilchen muss stets den gleichen Weg einnehmen, um an einen bestimmten Gitterplatz zurückzukehren. Die Bewegung der Teilchen ist hierbei ausschließlich auf Nächstnachbarn-Hüpfprozesse beschränkt.

1.3.2 Kollaps der Diagramme

Eine Untersuchung des Einband-Hubbard-Modells im Grenzfall $Z \to \infty$ zieht einige signifikante Vereinfachungen nach sich. In ihren Pionierarbeiten stellten Metzner und Vollhardt [6] und Müller-Hartmann [7] fest, dass die diagrammatische Störungstheorie im Grenzfall unendlicher Koordinationszahl einen lokalen Charakter aufweist. Sie zeigten, dass die Diagramme einer diagrammatischen Entwicklung im Ortsraum im Grenzfall $Z \to \infty$ kollabieren, und zwar immer dann, wenn zwei innere Vertizes an den Gitterplätzen i und j durch mindestens drei unabhängige Pfade verbunden sind. Unter diesen Voraussetzungen können die Gitterplätze i und j miteinander identifiziert werden ($i = j$). Als Pfad wird eine Folge von Greenfunktionslinien in einem Diagramm bezeichnet. Jede Greenfunktionslinie stellt hierbei einen freien Fermionenpropagator $G^0_{ij,\sigma}(z)$ zwischen den Gitterplätzen i und j dar. Zwei Pfade werden unabhängig genannt, falls sie keine Greenfunktionslinie teilen.

Die Ursache für den Kollaps der Diagramme liegt in der Skalierung der Hüpfampli-

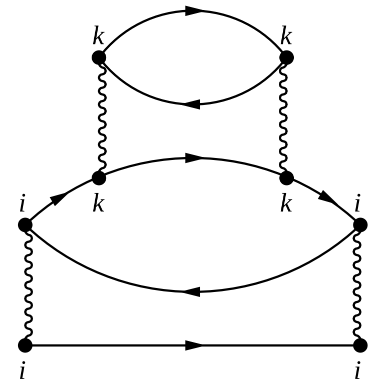

Abbildung 1.4: Diagramm der vierten Ordnung mit Selbstenergieeinschub ($i \neq k$).

tuden mit $1/\sqrt{Z}$. Diese Skalierung impliziert, dass jeder Pfad von einem Gitterplatz i zu einem Gitterplatz j einen Faktor von der Ordnung $(1/\sqrt{Z})^{||i-j||}$ beiträgt, wobei $||i-j||$ die Anzahl der Hüpfprozesse angibt, die ein Teilchen benötigt, um vom Gitterplatz i zum Gitterplatz j zu gelangen. Des Weiteren liefert bei festgehaltenem i eine eventuelle Summation über die inneren Vertizes am Gitterplatz j einen zusätzlichen Faktor von der Ordnung $Z^{||i-j||}$. Insgesamt erhält man einen Skalierungsfaktor

$$\mathcal{O}\left(1/\sqrt{Z}^{(P_{\alpha\beta}-2)||i-j||}\right) , \tag{1.52}$$

wobei $P_{\alpha\beta}$ die Anzahl der unabhängigen Pfade angibt, die die Gitterplätze i und j im Diagramm verbinden. Somit überstehen für $P_{\alpha\beta} > 2$ nur diejenigen Beiträge der Störungsreihe den Grenzfall $Z \to \infty$, für die $||i-j|| = 0$, d. h. $i = j$ gilt.

Die Diagramme der („eigentlichen“) Selbstenergie $\Sigma_{ij,\sigma}(z)$ sind per Definition einteilchenirreduzibel [36]. Folglich sind die beiden äußeren Vertizes stets durch drei unabhängige Pfade verbunden. Die Selbstenergie wird somit im Grenzfall $Z \to \infty$ lokal und daher diagonal im Ortsraum [6, 7]

$$\Sigma_{ij,\sigma}(z) = \Sigma_{ij,\sigma}(z)\delta_{ij} \quad \text{für} \quad Z \to \infty \; . \tag{1.53}$$

Dies impliziert jedoch nicht, dass alle inneren Vertizes im Diagramm der Selbstenergie identisch sind. Ein Beispiel für ein nicht vollständig kollabiertes Diagramm ist in Abbildung 1.4 dargestellt. Die Abbildung zeigt ein Diagramm vierter Ordnung, bei dem ein Diagramm zweiter Ordnung der Selbstenergie in die obere Greenfunktionslinie eingeschoben wurde. Die Vertizes i und k sind durch weniger als drei Pfade verbunden und können dadurch nicht miteinander identifiziert werden ($i \neq k$). Ein vollständiger Kollaps des Diagramms wird somit durch den Selbstenergieeinschub verhindert.

Anstelle einer direkten diagrammatischen Entwicklung der Selbstenergie wird eine sog. *Skelettdiagrammentwicklung* dieser Größe durchgeführt. Hierbei werden alle nichtlokalen Selbstenergieeinschübe zu einem *vollen* wechselwirkenden Fermionenpropagator $G_{ij,\sigma}(z)$, dargestellt durch eine *volle* Greenfunktionslinie, zusammengefasst. Dieser hängt mit der eigentlichen Selbstenergie aller übrigen Gitterplätze über die sog. *Dyson-Gleichung*

$$G_{ij,\sigma}(z) = G^0_{ij,\sigma}(z) + \sum_{k,l} G^0_{ik,\sigma}(z)\Sigma_{kl,\sigma}(z)G_{lj,\sigma}(z) \tag{1.54}$$

zusammen. Auf diese Weise kann die Selbstenergie als ein Funktional einer wechselwirkenden Greenfunktion

$$\Sigma_{ij,\sigma}(z) = \Sigma^{\text{Skel}}_{ij,\sigma}\left[\left\{G_{ij,\sigma}(z)\right\}\right] \tag{1.55}$$

aufgefasst werden. Da in einem Skelettdiagramm alle Selbstenergieeinschübe nach Konstruktion in einen wechselwirkenden Fermionenpropagator einbezogen und somit aus dem Diagramm entfernt werden, sind zwei innere Vertizes stets durch mindestens drei unabhängige (volle) Pfade verbunden. Für ausschließlich lokale Wechselwirkungen, wie beispielsweise die Hubbard-Wechselwirkung $U\hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow}$, können somit die Skelettdiagramme im Grenzfall $Z \to \infty$ vollständig auf einen einzigen Gitterplatz kollabieren.

Der Kollaps der Diagramme im Ortsraum kann für translationsinvariante Systeme im Impulsraum als eine „Irrelevanz der Impulserhaltung“ [4] an (einigen) inneren Vertizes interpretiert werden. Dies bedeutet, dass an Vertizes, die durch mindestens drei unabhängige Pfade verbunden sind, die Impulserhaltung nicht in Betracht gezogen zu werden braucht. Die freie Greenfunktion im Impuls-Frequenzraum besitzt für translationsinvariante Systeme die folgende Form

$$G^0_\sigma(\mathbf{k}, z) = \frac{1}{z - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu}\ . \tag{1.56}$$

Die eigentliche Selbstenergie ist nach Fourier-Transformation von (1.53) im Grenzfall $Z \to \infty$ impulsunabhängig

$$\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, z) = \Sigma_\sigma(z)\ . \tag{1.57}$$

Nach Fourier-Transformation der Dyson-Gleichung (1.54) erhält man hieraus für die volle Greenfunktion

$$\begin{aligned} G_\sigma(\mathbf{k}, z) &= \frac{1}{\left[G^0_\sigma(\mathbf{k}, z)\right]^{-1} - \Sigma_\sigma(z)} \\ &= \frac{1}{z - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu - \Sigma_\sigma(z)} \\ &= G^0_\sigma\left(\mathbf{k}, z - \Sigma_\sigma(z)\right)\ . \end{aligned} \tag{1.58}$$

Im Grenzfall $Z \to \infty$ steckt somit die Impulsabhängigkeit der vollen Greenfunktion ausschließlich in der Dispersionsrelation $\epsilon_{\mathbf{k}}$. Des Weiteren lässt sich die volle *lokale*

Greenfunktion, welche die Dynamik des einzelnen Gitterplatzes beschreibt, allein als Funktion der freien Zustandsdichte und der Selbstenergie darstellen

$$G_\sigma(z) \equiv G_{ii,\sigma}\ (z) = \frac{1}{L}\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{z - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu - \Sigma_\sigma(z)} \tag{1.59}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\epsilon\, \rho_\sigma^0(\epsilon) \frac{1}{z - \epsilon + \mu - \Sigma_\sigma(z)} \tag{1.60}$$

$$= G_\sigma^0\left(z - \Sigma_\sigma(z)\right)\ . \tag{1.61}$$

1.3.3 Abbildung auf effektive Einplatz-Modelle

Modelle, bei denen die Elektron-Elektron-Wechselwirkung nur auf einen einzigen Gitterplatz beschränkt ist, weisen im Grenzfall $Z \to \infty$ eine lokale Selbstenergie auf, die ausschließlich von diesem einzigen Gitterplatz abhängt. Aus diesem Grund lässt sich ein effektives Einplatz-Modell konstruieren, auf das sich das unendlichdimensionale Einband-Hubbard-Modell abbilden lässt, so dass die vollen Greenfunktionen und Selbstenergien beider Modelle übereinstimmen. Dies ist die Grundidee der dynamischen Molekularfeldtheorie.

Ein ausgiebig untersuchtes und daher zu diesem Zweck häufig verwendetes Einplatz-Modell ist das im Abschnitt 1.2.2 vorgestellte Einstörstellen-Anderson-Modell, dargestellt als eine halb-unendliche Kette

$$\begin{aligned}\hat{H} = &\sum_\sigma \epsilon_{\mathrm{d}} \hat{n}_{\mathrm{d}\sigma} + U \hat{n}_{\mathrm{d}\uparrow}\hat{n}_{\mathrm{d}\downarrow} + \sum_\sigma \left(V \hat{c}^\dagger_{\mathrm{d}\sigma}\hat{c}_{0\sigma} + V^* \hat{c}^\dagger_{0\sigma}\hat{c}_{\mathrm{d}\sigma}\right) \\ &+ \sum_{n,\sigma} \epsilon_n \hat{c}_{n\sigma}\hat{c}^\dagger_{n\sigma} + \sum_{n,\sigma} \left(\gamma_n \hat{c}^\dagger_{n\sigma}\hat{c}_{n+1,\sigma} + \gamma_n^* \hat{c}^\dagger_{n+1,\sigma}\hat{c}_{n\sigma}\right)\ .\end{aligned} \tag{1.62}$$

Diese Darstellung erweist sich im Hinblick auf eine numerische Auswertung mittels der für Ketten konzipierten dynamischen Dichtematrix-Renormierung [22, 37] als besonders geeignet.

Die Elektron-Elektron-Wechselwirkung in diesem Modell ist allein auf den Störstellen-Gitterplatz mit dem Index d beschränkt. Das Einstörstellen-Anderson-Modell weist somit im Grenzfall $Z \to \infty$ eine identische Skelettdiagrammentwicklung wie das Einband-Hubbard-Modell an einem beliebigen Gitterplatz i auf, d. h.

$$\Sigma^{\mathrm{Skel,And}}_{\mathrm{dd},\sigma}[\{G^{\mathrm{And}}_{\mathrm{dd},\sigma}(z)\}] = \Sigma^{\mathrm{Skel,Hub}}_{ii,\sigma}[\{G^{\mathrm{Hub}}_{ii,\sigma}(z)\}]\ . \tag{1.63}$$

Um äquivalente Selbstenergien beider Modelle zu erhalten, müssen die jeweiligen Einschübe in den Selbstenergien identisch sein

$$G^{\mathrm{And}}_{\mathrm{dd},\sigma}(z) = G^{\mathrm{Hub}}_{ii,\sigma}(z)\ . \tag{1.64}$$

Man erhält somit zwei Selbstkonsistenzbedingungen, unter denen das Einband-Hubbard-Modell im Grenzfall $Z \to \infty$ exakt auf das Einstörstellen-Anderson-Modell abgebildet werden kann:

1. Die vollen lokalen Greenfunktionen beider Modelle müssen übereinstimmen
$$G^{\mathrm{And}}_{\mathrm{dd},\sigma}(z) = G^{\mathrm{Hub}}_{ii,\sigma}(z) \ . \tag{1.65}$$
2. Die vollständigen Selbstenergien beider Modelle müssen ebenfalls übereinstimmen
$$\Sigma^{\mathrm{And}}_{\mathrm{dd},\sigma}(z) = \Sigma^{\mathrm{Hub}}_{ii,\sigma}(z) \ . \tag{1.66}$$

Für die folgende Diskussion wird der Einfachheit halber stets ein translationsinvariantes System betrachtet. Die Gitterplatzindizes der hier auftretenden lokalen Propagatoren und Selbstenergien werden, sofern nicht anders vermerkt, weggelassen ($G^{\mathrm{And}}_{\sigma}(z) \equiv G^{\mathrm{And}}_{\mathrm{dd},\sigma}(z)$, $G^{\mathrm{Hub}}_{\sigma}(z) \equiv G^{\mathrm{Hub}}_{ii,\sigma}(z)$, $\ldots$).

Die Modellparameter $(V, \epsilon_n, \gamma_n)$ in (1.62) werden durch die Kettenbruchkoeffizienten der Hybridisierungsfunktion bestimmt (vgl. Abschnitt 1.2.3)
$$\Gamma(z) = \cfrac{|V|^2}{z - \epsilon_0 - \cfrac{|\gamma_0|^2}{z - \epsilon_1 - \cfrac{|\gamma_1|^2}{z - \ldots}}} \ . \tag{1.67}$$
Diese hängt mit der freien Bad-Greenfunktion ($U = 0$) mittels
$$G^{\mathrm{And},0}_{\sigma}(z) = \frac{1}{z + \mu - \Gamma(z)} \tag{1.68}$$
zusammen. Die freie Bad-Greenfunktion legt somit die Modellparameter $(V, \epsilon_n, \gamma_n)$ des effektiven Einstörstellen-Anderson-Modells fest. Sie beschreibt ein Bad aus freien Elektronen, an das die Störstelle über die Hybridisierung V gekoppelt ist. Das Ziel der dynamischen Molekularfeldtheorie besteht nun darin, eine geeignete, effektive freie Bad-Greenfunktion bzw. Hybridisierungsfunktion zu bestimmen, so dass die aus dem effektiven Einstörstellen-Anderson-Modell (numerisch) bestimmte Greenfunktion $G^{\mathrm{And}}_{\sigma}(z)$ und die Selbstenergie $\Sigma^{\mathrm{And}}_{\sigma}(z)$ die Selbstkonsistenzbedingungen (1.65) und (1.66) erfüllen. Diese legen die freie Bad-Greenfunktion fest
$$G^{\mathrm{And},0}_{\sigma}(z) = \left(\left[G^{\mathrm{And}}_{\sigma}(z)\right]^{-1} + \Sigma^{\mathrm{And}}_{\sigma}(z)\right)^{-1} \ . \tag{1.69}$$

In der Praxis wird eine geeignete freie Bad-Greenfunktion meist iterativ bestimmt. Eine mögliche Realisierung eines *iterativen Selbstkonsistenzzyklus* wird im Folgenden schematisch dargestellt und in der Abbildung 1.5 illustriert.

Der Selbstkonsistenzzyklus beginnt mit der Wahl einer Initialisierungs-Hybridisierungsfunktion $\Gamma_{\mathrm{S}}(z)$ bzw. einer freien Initialisierungs-Bad-Greenfunktion $G^{\mathrm{And},0}_{\sigma,\mathrm{S}}(z)$ (S=Start), die die Parameter $(V, \epsilon_n, \gamma_n)$ des effektiven Einstörstellen-Anderson-Modells festlegt. Anschließend wird das Störstellenmodell zu einer vorgegebenen Wechselwirkungsstärke U mittels eines geeigneten Störstellenlösers (*impurity solver*) numerisch gelöst und dadurch die volle Greenfunktion des Störstellenmodells $G^{\mathrm{And}}_{\sigma,\mathrm{S}}(z)$

$$\begin{tikzcd}
\Gamma_{\mathrm{S}}(z),\, G^{\mathrm{And},0}_{\sigma,\mathrm{S}}(z) \arrow[r] & \boxed{\text{Störstellenlöser}} \arrow[r] & G^{\mathrm{And}}_{\sigma,\mathrm{S}}(z) \arrow[r, "(1.70)"] & \Sigma^{\mathrm{And}}_{\sigma,\mathrm{S}}(z) \arrow[d, "(1.71)"] \\
\Gamma_{\mathrm{E}}(z),\, G^{\mathrm{And},0}_{\sigma,\mathrm{E}}(z) \arrow[u, "\text{Selbstkonsistenz ?}"'] & G^{\mathrm{And}}_{\sigma,\mathrm{E}}(z) \arrow[l, "(1.70)"'] & G^{\mathrm{Hub}}_{\sigma}(z) \arrow[l, "(1.73)"'] & \Sigma^{\mathrm{Hub}}_{\sigma}(z) \arrow[l, "(1.72)"']
\end{tikzcd}$$

Abbildung 1.5: Schematische Darstellung des iterativen Selbstkonsistenzzyklus für ein beliebiges Gitter.

bestimmt. Im nächsten Schritt wird die Selbstenergie des Störstellenmodells aus der Dyson-Gleichung bestimmt

$$\Sigma^{\mathrm{And}}_{\sigma,\mathrm{S}}(z) = \left[G^{\mathrm{And},0}_{\sigma,\mathrm{S}}(z)\right]^{-1} - \left[G^{\mathrm{And}}_{\sigma,\mathrm{S}}(z)\right]^{-1} . \tag{1.70}$$

Die Selbstkonsistenzbedingung (1.66) verlangt, dass die Selbstenergie des Störstellenmodells mit der Selbstenergie des Hubbard-Modells identisch ist

$$\Sigma^{\mathrm{Hub}}_{\sigma}(z) = \Sigma^{\mathrm{And}}_{\sigma,\mathrm{S}}(z) . \tag{1.71}$$

Mittels der Dyson-Gleichung für das Hubbard-Modell lässt sich hieraus die volle Greenfunktion bestimmen

$$G^{\mathrm{Hub}}_{\sigma}(z) = G^{\mathrm{Hub},0}_{\sigma}\left(z - \Sigma^{\mathrm{Hub}}_{\sigma}(z)\right) . \tag{1.72}$$

Des Weiteren verlangt die Selbstkonsistenzbedingung (1.65) die Gleichheit der vollen Greenfunktionen beider Modelle

$$G^{\mathrm{And}}_{\sigma,\mathrm{E}}(z) = G^{\mathrm{Hub}}_{\sigma}(z) \quad (\mathrm{E{=}Ende}) , \tag{1.73}$$

mit Hilfe derer sich unter Verwendung der Dyson-Gleichung für das Störstellenmodell wiederum die Bad-Greenfunktion

$$G^{\mathrm{And},0}_{\sigma,\mathrm{E}}(z) = \left(\left[G^{\mathrm{And}}_{\sigma,\mathrm{E}}(z)\right]^{-1} + \Sigma^{\mathrm{And}}_{\sigma,\mathrm{S}}(z)\right)^{-1} \tag{1.74}$$

bestimmen lässt. Stimmen nun $G^{\mathrm{And},0}_{\sigma,\mathrm{S}}(z)$ und $G^{\mathrm{And},0}_{\sigma,\mathrm{E}}(z)$ überein, so ist die Selbstkonsistenz erreicht, ansonsten wird eine weitere Iteration des Selbstkonsistenzzyklus mit $G^{\mathrm{And},0}_{\sigma,\mathrm{E}}(z)$ als einer neuen Anfangs-Bad-Greenfunktion durchgeführt. Im Falle der Selbstkonsistenz beschreibt die mit Hilfe des Störstellenlösers bestimmte volle Greenfunktion im Grenzfall unendlicher Koordinationszahl die lokale Dynamik des Einband-Hubbard-Modells. An dieser Stelle sei angemerkt, dass es keinen analytischen Beweis für die Konvergenz eines solchen iterativen Selbstkonsistenzzyklus gibt. Die Erfahrung hat jedoch gezeigt, dass man bereits nach relativ wenigen Iterationen zu einer stabilen selbstkonsistenten Lösung gelangt [12].

$$
\begin{tikzcd}
\Gamma_{\mathrm{S}}(z),\, G^{\mathrm{And},0}_{\sigma,\mathrm{S}}(z) \arrow[r] & \boxed{\text{Störstellenlöser}} \arrow[d] \\
\Gamma_{\mathrm{E}}(z),\, G^{\mathrm{And},0}_{\sigma,\mathrm{E}}(z) \arrow[u, "\text{Selbstkonsistenz ?}"'] & G^{\mathrm{Hub}}_{\sigma}(z) = G^{\mathrm{And}}_{\sigma,\mathrm{S}}(z) \arrow[l, "(1.78)"']
\end{tikzcd}
$$

Abbildung 1.6: Schematische Darstellung des iterativen Selbstkonsistenzzyklus für das Bethe-Gitter mit Nächstnachbarn-Hüpfprozessen.

Einen besonders einfachen Fall stellt das Bethe-Gitter mit Nächstnachbarn-Hüpfprozessen dar (vgl. Abbildung 1.6). Hierfür ist ein expliziter Ausdruck für die lokale freie Greenfunktion im Grenzfall $Z \to \infty$ bekannt [38]

$$G^{\mathrm{Hub},0}_{\sigma}(z) = \frac{1}{2t^{*2}} \left(z - \sqrt{z^2 - 4t^{*2}} \right) \ . \tag{1.75}$$

Mittels der Dyson-Gleichung (1.72) lässt sich hieraus die folgende Beziehung zwischen der vollen Greenfunktion und der Selbstenergie gewinnen

$$z - \Sigma^{\mathrm{Hub}}_{\sigma}(z) = t^{*2} G^{\mathrm{Hub}}_{\sigma}(z) + \left[G^{\mathrm{Hub}}_{\sigma}(z) \right]^{-1} \ . \tag{1.76}$$

Des Weiteren erhält man mittels (1.68) und (1.69) die Beziehung

$$z - \Sigma^{\mathrm{And}}_{\sigma}(z) = \Gamma(z) + \left[G^{\mathrm{And}}_{\sigma}(z) \right]^{-1} , \tag{1.77}$$

woraus sich mit (1.76) und unter Berücksichtigung der Selbstkonsistenzbedingungen (1.65) und (1.66) ein einfacher Zusammenhang zwischen der Hybridisierungsfunktion und der lokalen vollen Greenfunktion ergibt

$$\Gamma_{\mathrm{E}}(z) = t^{*2} G^{\mathrm{Hub}}_{\sigma}(z) \ . \tag{1.78}$$

Die Bestimmung der vollen lokalen Greenfunktion des effektiven Einstörstellen-Anderson-Modells zu einer vorgegebenen Bad-Greenfunktion bildet die Hauptschwierigkeit innerhalb des iterativen Lösungsansatzes der DMFT-Gleichungen. In den letzten Jahren wurden zahlreiche Störstellenlöser basierend auf unterschiedlichen numerischen und analytischen Verfahren zur Lösung des effektiven Einstörstellen-Anderson-Modells in der dynamischen Molekularfeldtheorie erfolgreich eingesetzt, darunter Störstellenlöser basierend auf der exakten Diagonalisierung (ED) [14], der numerischen Renormierungsgruppe (NRG) [15, 16], den Quanten-Monte-Carlo-Algorithmen (QMC) [19, 20] sowie der iterativen Störungstheorie (IPT) [17, 18]. In dieser Arbeit wird ein Störstellenlöser basierend auf der dynamischen Dichtematrix-Renormierung (dDMRG) eingesetzt.

1.4 Die Dichtematrix-Renormierung (DMRG)

Die Dichtematrix-Renormierung (DMRG) ist ein von White [39, 40] entwickeltes numerisches Verfahren zur präzisen Bestimmung des Grundzustandes sowie der niedrigen Anregungen eines stark korrelierten Quanten-Gittersystems. Sie hat eine gewisse Verwandtschaft zu der von Wilson zur Untersuchung des Kondo-Problems entwickelten numerischen (Ortsraum-)Renormierungsgruppe (NRG) [41]. Die DMRG zeichnet sich durch eine außergewöhnliche Präzision aus, die derzeit jedoch nur für eindimensionale Systeme erreicht werden kann. Aus diesem Grund sind die meisten mit dieser Methode untersuchten Systeme eindimensional. Der rechnerische Aufwand zum Erreichen einer vorgegebenen Genauigkeit wächst dabei mit der Systemgröße [42].

1.4.1 Exakte Diagonalisierung

Die einfachste Methode ein Quanten-Gittersystem numerisch auszuwerten, besteht in der Diagonalisierung des Hamilton-Operators für ein Gitter endlicher Größe. Eine übliche Basis des Hilbertraums eines solchen Systems besitzt dann Zustände der Form

$$|1\rangle \otimes |2\rangle \otimes \cdots \otimes |n\rangle \ , \tag{1.79}$$

wobei $|i\rangle$ einen Zustand an einem einzelnen Platz und $\otimes$ das direkte Produkt darstellt. Die Größe des Hilbertraums wächst dabei exponentiell mit der Anzahl der Gitterplätze n. Falls nun $\hat{A}$ ein zu einem einzelnen Gitterplatz i gehörender Einplatz-Operator ist, so besitzen dessen Matrixelemente die einfache Gestalt

$$\langle 1| \cdots \langle 1|\hat{A}|1'\rangle \cdots |n'\rangle = \delta_{1,1'} \cdots \delta_{i-1,i-1'}\delta_{i+1,i+1'} \cdots \delta_{n,n'} A_{i,i'} \ . \tag{1.80}$$

Ähnliche Ausdrücke enthalten auch Produkte von Einplatz-Operatoren, wie beispielsweise Hamilton-Operatoren, die ein System mit mehreren Gitterplätzen beschreiben.

Aufgrund der δ-Funktionen ist die Matrix eines solchen Hamilton-Operators im Hilbertraum des Gittersystems spärlich besetzt. Deshalb erweist sich die Auswertung solcher Systeme mit den üblichen zur Diagonalisierung von dichten Matrizen verwendeten Verfahren, wie die Jacobi-Methode oder die Housholder-Transformation mit anschließender Diagonalisierung der resultierenden tridiagonalen Matrix, als wenig effizient.

In den meisten Fällen interessiert man sich in erster Linie für den Grundzustand und womöglich für einige wenige niedrige Anregungen. Zur Berechnung von einigen wenigen Eigenzuständen großer spärlicher Matrizen werden zwei weitverbreitete und effiziente Methoden eingesetzt, die *Lanczos-* und die *Davidson-Methode.* Beide Methoden bilden zu der spärlichen Matrix eines Hamilton-Operators einen kleinen Satz von Basisvektoren und minimieren die Energie innerhalb dieser Basis. Der reduzierte Satz aus Basisvektoren wird systematisch erweitert bis Konvergenz erreicht wird. Die Davidson-Methode nutzt darüber hinaus die Diagonalelemente solcher Matrizen, um eine verbesserte reduzierte Basis zu erstellen. Sie konvergiert meistens schneller als die Lanczos-Methode, falls der Hamilton-Operator durch seine Diagonalelemente dominiert wird.

Obwohl sich beide Methoden hervorragend zur Berechnung der niedrigsten Eigenwerte und der zugehörigen Eigenvektoren großer spärlicher Matrizen der Quanten-Gittersysteme eignen, ist die größtmögliche auswertbare Systemgröße durch das exponentielle Anwachsen des Hilbertraums eingeschränkt. Die wesenliche Einschränkung besteht in der benötigten Speichergröße für Operationen mit den Hilbertraum-Vektoren, die für zu große Systeme die Kapazitäten und den rechnerischen Aufwand heutiger Computer überschreiten. Es erweist sich deshalb als vorteilhaft, ein verändertes Diagonalisierungsschema zu formulieren, das den zur Darstellung des Hamilton-Operators verwendeten Hilbertraum in einer kontrollierten Weise klein hält. Dies kann unter anderem mittels der numerischen Renormierungsgruppe erreicht werden.

1.4.2 Wilsons numerische Renormierungsgruppe

Die Idee, die der von Wilson zur Untersuchung des Kondo-Problems eingeführten numerischen Renormierungsgruppe (NRG) [41] zugrunde liegt, besteht darin, mittels aufeinander folgenden Renormierungsgruppen-Transformationen die unwichtigen Freiheitsgrade eines Quanten-Gittersystems schrittweise herauszuintegrieren. Das Verfahren beginnt mit einer numerischen Darstellung des Hamilton-Operators in einer gewählten Basis. Anschließend werden Freiheitsgrade unter Ausführung von Renormierungsgruppen-Transformationen hinzugefügt, indem man beispielsweise die Systemgröße eines endlichen Systems sukzessiv erhöht und gleichzeitig die numerische Darstellung des erweiterten Hamilton-Operators in eine reduzierte Basis transformiert. Die genaue Arbeitsweise der von Wilson entwickelten NRG wird im Folgenden an einem einfachen Beispiel eines eindimensionalen Gittermodells schrittweise dargestellt und in der Abbildung 1.7 schematisch illustriert:

1. Greife ein Teil des Systems mit L Gitterplätzen heraus, wobei L hinreichend klein gewählt wird, damit die Matrix H_L zu dem Hamilton-Operator $\hat{H}_L$ noch exakt diagonalisiert werden kann.

2. Diagonalisiere H_L numerisch, um die m Eigenvektoren zu den niedrigsten Eigenwerten zu erhalten.

3. Transformiere H_L sowie Matrizen zu anderen Operatoren im „Block" der Länge L in eine neue *trunkierte* Basis, bestehend aus den Eigenvektoren zu den m tiefsten Eigenwerten von H_L, d. h. bilde $\bar{H}_L = O_L^\dagger H_L O_L$, $\bar{A}_L = O_L^\dagger A_L O_L$, usw., wobei die Spalten von O_L die m Eigenvektoren zu den niedrigsten Eigenwerten von H_L enthalten und A_L eine Matrix zu einem beliebigen Operator $\hat{A}_L$ des Blocks ist.

4. Nehme einen weiteren Gitterplatz zu $\bar{H}_L$ hinzu und bilde H_{L+1}. Dazu muss die Wechselwirkung zwischen dem Block der Länge L und dem zusätzlich hinzugefügten Gitterplatz rekonstruiert werden.

5. Fahre fort mit Schritt 2, wobei H_{L+1} anstelle von H_L tritt.

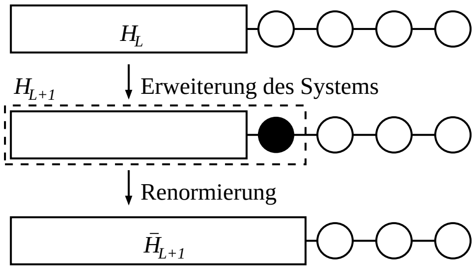

Abbildung 1.7: Schematische Darstellung des NRG-Algorithmus.

Kennzeichnend für dieses Verfahren ist, dass die Anzahl m der gespeicherten Zustände in jedem Schritt konstant gehalten wird, so dass der Zeitaufwand und der benötigte Speicherplatz für jede Diagonalisierung stets derselbe bleibt und somit die benötigte Rechenzeit linear mit L ansteigt.

Die grundlegende Idee in dem obigen Schema besteht darin, dass nur die niederenergetischen Zustände eines Systems der Größe L zur Bildung von niederenergetischen Zuständen des um einen Gitterplatz erweiterten $L+1$-großen Systems relevant sind. Durch das Herausgreifen eines Blocks der Länge L muss jedoch entschieden werden, wie man mit dem Rand des Blocks umzugehen hat. Am einfachsten ist es, die Bindungen zu den berandeten Gitterplätzen zu vernachlässigen, was offenen Randbedingungen für das zu diagonalisierende System entsprechen würde. Diese Vorgehensweise hat sich zwar bei der Untersuchung des Kondo-Problems [41] und einigen verwandten Problemen bewährt, sie scheitert jedoch bei der Untersuchung von anderen korrelierten Systemen [43]. Die Ursache hierfür liegt in einer fehlenden Berücksichtigung des Zusammenspiels zwischen dem Block und seiner Umgebung durch eine unzureichende Beschreibung des Randes des herausgegriffenen Teilsystems.

Um den Rand eines herausgegriffenen Teilsystems besser beschreiben zu können, bettet man dieses in ein größeres System ein, indem man eine Umgebung hinzufügt, so dass ein vergrößertes System entsteht. Das Ziel ist es nun, mittels der sog. *Dichtematrix-Projektion* zu entscheiden, welche Zustände des herausgegriffenen Teilsystems für die Darstellung eines Zustands des vergrößerten Systems relevant sind.

1.4.3 Die Dichtematrix-Projektion

Im Folgenden soll die von White entwickelte Methode der Dichtematrix-Projektion erläutert werden. Dazu wird ein quantenmechanisches System, das hier der üblichen Nomenklatur folgend als *Superblock* bezeichnet wird, der Einfachheit halber in einem reinen Zustand betrachtet. Ein Teil des Systems, an dessen Basis man interessiert ist, wird als *Systemblock*, der restliche Teil des Systems als *Umgebungsblock* bezeichnet. Der Hilbertraum des Superblocks $\mathcal{H}$ setzt sich dann aus dem Hilbertraum des Systemblocks und dem Hilbertraum des Umgebungsblocks (e: environment) zusammen $\mathcal{H} = \mathcal{H}_\mathrm{s} \otimes \mathcal{H}_\mathrm{e}$.

Es sei $|i\rangle_\mathrm{s}$, $i = 1, \ldots, l$ eine orthonormale Basis des Systemblocks $\mathcal{H}_\mathrm{s}$ und $|j\rangle_\mathrm{e}$, $j = 1, \ldots, n$ eine orthonormale Basis des Umgebungsblocks $\mathcal{H}_\mathrm{e}$. Dann lässt sich ein beliebiger Zustand des Superblocks $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ in der folgenden Weise darstellen

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} \psi_{ij} |i\rangle_\mathrm{s} |j\rangle_\mathrm{e} \; . \tag{1.81}$$

Die *reduzierte Dichtematrix* des Systemblocks erhält man aus der partiellen Spurbildung über den Umgebungsblock

$$\hat{\rho}_\mathrm{s} = \mathrm{Sp}_\mathrm{e} \, |\psi\rangle\langle\psi| \; . \tag{1.82}$$

Ihre Matrixelemente besitzen die folgende Gestalt

$$(\rho_\mathrm{s})_{ii'} = {}_\mathrm{s}\langle i|\hat{\rho}_\mathrm{s}|i'\rangle_\mathrm{s} = \sum_j \psi_{ij}^* \psi_{i'j} \; . \tag{1.83}$$

Aufgrund der Normierung von $|\psi\rangle$ gilt $\mathrm{Sp}_\mathrm{s}\, \rho_\mathrm{s} = 1$. Ferner sind die Eigenwerte von ρ_s positiv-semidefinit. Die reduzierte Dichtematrix ist ein Operator auf dem Systemblock-Hilbertraum $\mathcal{H}_\mathrm{s}$. Sie enthält die volle Information des Zustands $|\psi\rangle$ zur Berechnung jeglicher Eigenschaften, die auf den Systemblock beschränkt sind.

Das Ziel ist es nun, einen m-dimensionalen „reduzierten“ Unterraum $\mathcal{U} \subset \mathcal{H}_\mathrm{s}$ $(m < l)$ zu finden, so dass auf $\mathcal{U} \otimes \mathcal{H}_\mathrm{e}$ ein Zustand existiert, der eine bestmögliche Approximation des Zustands $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ aus (1.81), z. B. eines Grundzustandes, liefert. Oder anders ausgedrückt, es wird ein m-dimensionaler Unterraum und ein Zustand $|\bar{\psi}_\mathrm{opt}\rangle \in \mathcal{U} \otimes \mathcal{H}_\mathrm{e}$ gesucht, der das Funktional

$$S\Big(|\bar{\psi}\rangle\Big) \equiv \Big| |\psi\rangle - |\bar{\psi}\rangle \Big|^2 \tag{1.84}$$

minimiert, d. h.

$$S\Big(|\bar{\psi}_\mathrm{opt}\rangle\Big) = \min_{\mathcal{U}, |\bar{\psi}\rangle \in \mathcal{U}\otimes\mathcal{H}_\mathrm{e}} S\Big(|\bar{\psi}\rangle\Big) \; . \tag{1.85}$$

Im Folgenden wird gezeigt, dass der gesuchte Unterraum $\mathcal{U}$ durch die m Eigenvektoren zu den größten Eigenwerten der reduzierten Dichtematrix aus (1.82) aufgespannt wird. Dazu werden die Koeffizienten ψ_{ij} von $|\psi\rangle$ aus (1.81) als eine $l \times n$-Matrix $\psi \equiv (\psi_{ij})_{ij}$ aufgefasst (o.B.d.A. $n \leq l$). Mittels (1.82) erhält man dann eine Matrixdarstellung für die reduzierte Dichtematrix

$$\rho_\mathrm{s} = \psi\psi^\dagger \; . \tag{1.86}$$

Die Wurzeln der nichtverschwindenden reellen Eigenwerte dieser positiv-semidefiniten Matrix (die sog. *Singularitäten* von ψ) werden im Folgenden mit

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \ldots \geq \sigma_r \tag{1.87}$$

bezeichnet und die zugehörigen Eigenvektoren mit $|u_i\rangle_\mathrm{s}$.

Sei $|\bar{\psi}\rangle$ eine Approximation des Zustands $|\psi\rangle$ auf dem Unterraum $\mathcal{U} \otimes \mathcal{H}_\mathrm{e} \subset \mathcal{H}$ $(\dim(\mathcal{U}) =: m < l)$, dann lässt sich diese analog zu (1.81) als

$$|\bar{\psi}\rangle = \sum_{i,j} \bar{\psi}_{ij} |i\rangle_\mathrm{s} |j\rangle_\mathrm{e} \quad \text{bzw.} \quad \bar{\psi} \equiv (\bar{\psi}_{ij})_{ij} \tag{1.88}$$

darstellen, mit $\mathrm{Rang}\,\bar{\psi} \leq m$. Setzt man nun $|\psi\rangle$ und $|\bar{\psi}\rangle$ in das Funktional (1.84) ein, so erhält man

$$S(\bar{\psi}) = \mathrm{Sp}\left((\psi - \bar{\psi})^\dagger (\psi - \bar{\psi})\right) . \tag{1.89}$$

An dieser Stelle wird das sog. *singular value decomposition* Theorem (SVD) [44] angewandt. Dieses besagt, dass unter den gegebenen Voraussetzungen eine unitäre $n \times n$-Matrix U und eine unitäre $l \times l$ Matrix V existieren, so dass

$$\psi = UDV^\dagger \quad \text{mit} \quad D = \mathrm{diag}\,(\sigma_1, \ldots, \sigma_r, 0, \ldots, 0) \tag{1.90}$$

gilt. Wegen

$$\rho_\mathrm{s} = \psi\psi^\dagger = UDD^\dagger U^\dagger = UD^2 U^\dagger \tag{1.91}$$

lässt sich nun unmittelbar erkennen, dass die Eigenwerte von D gerade die Wurzeln der Eigenwerte von ρ_s sind. Setzt man nun ψ aus (1.90) und $\bar{\psi} = U\bar{D}V^\dagger$ in (1.91) ein, so erhält man das Funktional

$$S(\bar{D}) = \mathrm{Sp}\left((D - \bar{D})^\dagger (D - \bar{D})\right) . \tag{1.92}$$

Dieses wird unter Variation von $\bar{D}$ minimal, falls $\bar{D}$ aus den m größten Singularitäten besteht (Man beachte, dass $\mathrm{Rang}\,\bar{D} \leq m$.)

$$\bar{D} = \mathrm{diag}\,(\sigma_1, \ldots, \sigma_m, 0, \ldots, 0) . \tag{1.93}$$

Somit erhält man für die optimale Approximation des Zustands $|\psi\rangle$

$$\begin{aligned} |\bar{\psi}_\mathrm{opt}\rangle &= \sum_{i,j} (U\bar{D}V^\dagger)_{ij} |i\rangle_\mathrm{s} |j\rangle_\mathrm{e} = \sum_{i,j} \bar{D}_{ij} (U|i\rangle_\mathrm{s})(V|j\rangle_\mathrm{e}) \\ &= \sum_{i=1}^{m} \sigma_i |u_i\rangle_\mathrm{s} |v_i\rangle_\mathrm{e} , \end{aligned} \tag{1.94}$$

wobei $|u_i\rangle_\mathrm{s}$ die m Eigenvektoren von ρ_s zu den größten Eigenwerten w_i $(w_i = \sigma_i^2)$ sind. Sie spannen den optimalen Unterraum $\mathcal{U} \subset \mathcal{H}_\mathrm{s}$ auf.

Man erhält somit ein Auswahlkriterium, das es erlaubt zu entscheiden, welche m Eigenzustände für die Renormierung beibehalten werden sollen, nämlich die zu den größten Eigenwerten der reduzierten Dichtematrix ρ_s.

Eine andere einfache Möglichkeit, die Gültigkeit des Auswahlkriteriums zu illustrieren besteht in der Bestimmung einer Approximation für den Erwartungswert eines ausschließlich auf den Systemblock wirkenden Operators $\hat{A}$. Der Erwartungswert von $\hat{A}$ ist gegeben durch

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \mathrm{Sp}_\mathrm{s}\,(\hat{\rho}_\mathrm{s} \hat{A}) = \sum_{i,i'} A_{ii'} (\rho_\mathrm{s})_{i'i} . \tag{1.95}$$

Angenommen, man hätte die Dichtematrix diagonalisiert, und erhielte ihre Eigenwerte w_i (mit $0 \leq w_i \leq 1$, $\sum_i w_i = 1$) samt der zugehörigen Eigenvektoren $|u_i\rangle_\mathrm{s}$. Mittels dieser ließe sich dann der Erwartungswert $\langle\hat{A}\rangle$ aus (1.95) folgendermaßen darstellen

$$\langle\hat{A}\rangle = \sum_i w_i \;{}_\mathrm{s}\langle u_i|\hat{A}|u_i\rangle_\mathrm{s} \; . \tag{1.96}$$

Anhand dieser Gleichung lässt sich nun erkennen, welche m Zustände aus dem Hilbertraum des Systemblocks beibehalten werden müssen, um den Fehler einer Approximation von $\langle\hat{A}\rangle$ klein zu halten. Es sind diejenigen zu den größten Gewichten, d. h. zu den größten Eigenwerten w_i von ρ_s.

Der sog. *Trunkierungsfehler*, der durch die Reduzierung von $\mathcal{H}_\mathrm{s}$ auf den Unterraum $\mathcal{U} \subset \mathcal{H}_\mathrm{s}$ entsteht, lässt sich anhand der Eigenwerte zu der Dichtematrix abschätzen. Die Menge an Informationen, die beim Reduzieren des Unterraums verloren geht, ist gegeben durch

$$\epsilon = 1 - P_m = 1 - \sum_{i=1}^{m} w_i \; , \quad \text{mit} \quad w_1 \geq w_2 \geq \ldots \tag{1.97}$$

Falls sich das zu untersuchende quantenmechanische System in einem gemischten Zustand befindet, lässt sich die reduzierte Dichtematrix ρ_s aus der Linearkombination der Matrizen zu verschiedenen Zuständen $|\psi_k\rangle$ konstruieren. Die Matrixelemente dieser Matrix besitzen dann die folgende Gestalt

$$(\rho_\mathrm{s})_{ii'} = \sum_k p_k \sum_j \psi^*_{k,ij}\psi_{k,i'j} \; , \tag{1.98}$$

wobei p_k die Wahrscheinlichkeit angibt, mit der sich das System im Zustand $|\psi_k\rangle$ befindet.

1.4.4 Der DMRG-Algorithmus

Die Formulierung eines effizienten DMRG Algorithmus erfordert einige systemspezifische Entscheidungen, die im Vorfeld getroffen werden mÜsssen. Zuerst muss entschieden werden, wie der Systemblock systematisch aufgebaut werden kann, bzw. wie die Freiheitsgrade eines Systems systematisch hinzugefügt werden können. Anschließend muss die Zusammensetzung des Superblocks festgelegt werden. Schließlich müssen diejenigen Eigenzustände ausgewählt werden, die zur Bildung der Dichtematrix verwendet werden sollen.

Bei stark korrelierten Systemen erweist es sich als vorteilhaft, dem Systemblock die kleinstmögliche Zahl an Freiheitsgraden auf einmal hinzuzufügen, um einerseits den größten Teil der Systemblock-Zustände beizubehalten, und andererseits die Dimension des Superblock-Hilbertraums klein zu halten [42]. Aus diesem Grund ist es üblich, ähnlich der NRG von Wilson, den Systemblock schrittweise durch Hinzufügen jeweils eines Gitterplatzes aufzubauen. Je nach Wahl des Umgebungsblocks unterteilt man die Algorithmen in zwei Klassen: die *Infinite-System-Algorithmen* und die *Finite-System-Algorithmen*. Die typischen Vertreter beider Algorithmen-Klassen werden in den folgenden Abschnitten für einen einfachen Fall, der Bestimmung des Grundzustandes eines eindimensionalen Quanten-Gittersystems (einer *Quantenkette*), vorgestellt. Dabei wird die für die DMRG übliche Nomenklatur verwendet:

Die Zustände des Superblocks zur Bildung der reduzierten Dichtematrix des Systemblocks werden von jetzt an als *Zielzustände* bezeichnet. Interessiert man sich beispielsweise ausschließlich für den Grundzustand, so bestimmt man diesen am präzisesten, wenn man ihn als Zielzustand anvisiert. Falls man sich darüber hinaus auch für Anregungszustände interessiert, so können diese als zusätzliche Zielzustände anvisiert werden. Bei vorgegebener Anzahl m der in der reduzierten Basis behaltenen Zustände sinkt die Genauigkeit, mit der ein einzelner Zustand bestimmt wird, je mehr Zielzustände anvisiert werden.

Der Infinite-System-Algorithmus

Der Infinite-System-Algorithmus ist eine direkte Erweiterung der von Wilson entwickelten NRG, bei dem das Superblock-Konzept benutzt wird. Ähnlich wie in Wilsons Verfahren wird der Systemblock durch das schrittweise Hinzufügen eines einzelnen Gitterplatzes aufgebaut. Im Folgenden wird angenommen, dass das zu untersuchende System spiegelsymmetrisch ist. Unter dieser Voraussetzung, kann der Umgebungsblock B^{e} einfach durch eine Spiegelung des Systemblocks B^{s} gebildet werden.

Die einzelnen Arbeitsschritte des Infinite-System-Algorithmus lauten dann:

1. Konstruiere einen Systemblock B_l^{s} für ein System der Größe l. Bilde zu B_l^{s} den Hamilton-Operator $\hat{H}_l^{\mathrm{s}}$ und andere benötigte Operatoren $\hat{A}_l^{\mathrm{s}}$ sowie die zugehörigen Matrizen H_l^{s} und A_l^{s}. Die Systemgröße l soll dabei hinreichend klein gewählt werden, um eine exakte Diagonalisierung von H_l^{s} zu ermöglichen.

2. Erweitere den Systemblock um einen Gitterplatz: $B_{l+1}^{\mathrm{s}} = B_l^{\mathrm{s}}\bullet$. Konstruiere dazu den Hamilton-Operator $\hat{H}_{l+1}^{\mathrm{s}}$, die Operatoren $\hat{A}_{l+1}^{\mathrm{s}}$ sowie die zugehörigen Matrizen H_{l+1}^{s} und A_{l+1}^{s}.

3. Konstruiere den Superblock S_{L} aus dem Systemblock B_{l+1}^{s} und dem Umgebungsblock $B_{l'+1}^{\mathrm{e}}$: $S_{\mathrm{L}} = B_{l+1}^{\mathrm{s}} B_{l'+1}^{\mathrm{e}}$ mit $L = l + l' + 2$. Für spiegelsymmetrische Systeme kann der Umgebungsblock aus der Spiegelung des Systemblocks gebildet werden (vgl. Abbildung 1.8). Bilde zum Superblock den Hamilton-Operator $\hat{H}_L^{\mathrm{Super}}$ $(L = l + l' + 2)$ unter Verwendung von $\hat{H}_{l+1}^{\mathrm{s}}$ und dessen Spiegelung $\hat{H}_{l'+1}^{\mathrm{e}}$ $(l' = l)$.

4. Diagonalisiere $\hat{H}_L^{\mathrm{Super}}$ mittels des Lanczos- bzw. des Davidson-Algorithmus, um den Zielzustand $|\psi\rangle$ (hier der Grunzustand) und dessen Eigenwert (die Grundzustandsenergie) zu erhalten. Dies ist der zeitintensivste Schritt des Algorithmus.

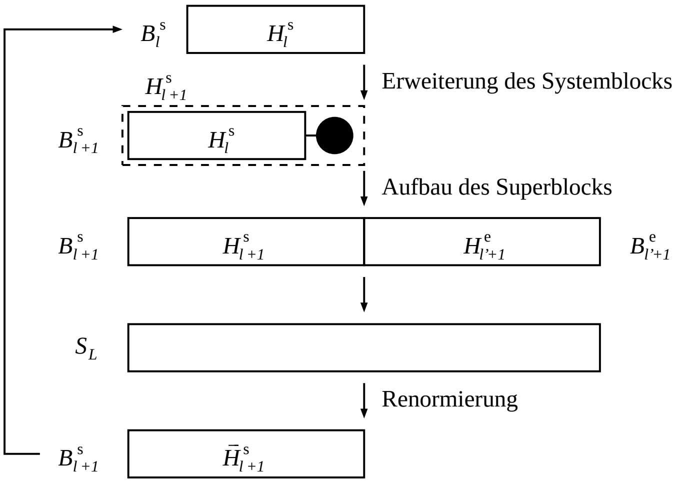

Abbildung 1.8: Schematische Darstellung des Infinite-System-Algorithmus am Beispiel eines spiegelsymmetrischen Systems.

5. Bilde zu $|\psi\rangle$ mittels (1.82) die reduzierte Dichtematrix $\hat{\rho}_{\mathrm{s}}$ des Systemblocks B^{s}_{l+1} und bestimme ihre m größten Eigenwerte und die zugehörigen Eigenvektoren. Diese bilden die trunkierte Basis der reduzierten Dichtematrix.

6. Renormiere den Systemblock. Transformiere dazu die Matrizen der Operatoren $\hat{H}^{\mathrm{s}}_{l+1}$ und $\hat{A}^{\mathrm{s}}_{l+1}$ in die trunkierte Basis der reduzierten Dichtematrix nach der folgenden Vorschrift

$$\bar{H}^{\mathrm{s}}_{l+1} = O_L^{\dagger} H^{\mathrm{s}}_{l+1} O_L \quad \text{bzw.} \quad \bar{A}^{\mathrm{s}}_{l+1} = O_L^{\dagger} A^{\mathrm{s}}_{l+1} O_L \;, \tag{1.99}$$

   wobei die Spalten von O_L durch die m Eigenvektoren der reduzierten Dichtematrix ρ_{s} zu den größten Eigenwerten gebildet werden.

7. Fahre fort mit Schritt 2, wobei B^{s}_{l+1} anstelle von B^{s}_l tritt: $\bar{H}^{\mathrm{s}}_{l+1} \to H^{\mathrm{s}}_l$, $\bar{A}^{\mathrm{s}}_{l+1} \to A^{\mathrm{s}}_l$.

Auch im Falle nicht spiegelsymmetrischer Systeme kann ein ähnlicher Algorithmus formuliert werden. Hierzu müssten lediglich die Matrizen zu den Operatoren des Umgebungsblocks analog zum Systemblock in die trunkierte Basis der reduzierten Dichtematrix $\hat{\rho}_{\mathrm{e}} = \mathrm{Sp}_{\mathrm{s}}\, |\psi\rangle\langle\psi|$ transformiert werden.

Der Finite-System-Algorithmus

Anders als im Infinite-System-Algorithmus bleibt im Finite-System-Algorithmus die Systemgröße und die damit verbundene Größe des Superblocks L fest. Diese Festlegung erfordert eine andere Konstruktion des Umgebungsblocks.

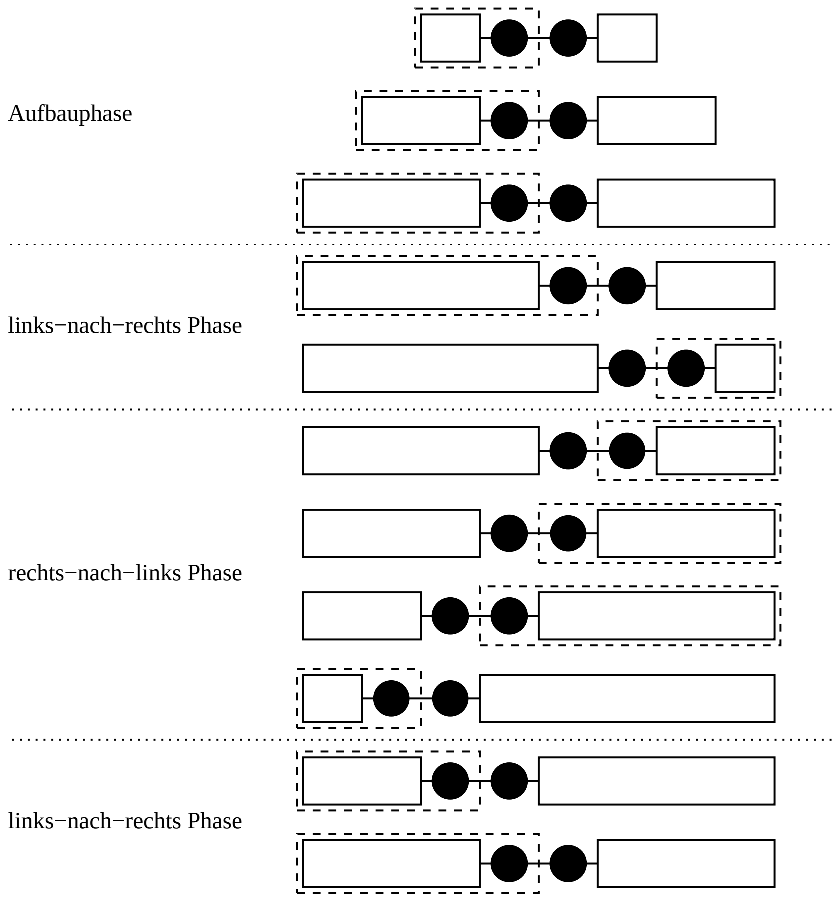

Abbildung 1.9: Schematische Darstellung des Finite-System-Algorithmus.

Zuerst wird der Infinite-System-Algorithmus bis zum Erreichen der gewünschten Systemgröße L ausgeführt. Dabei werden die Umgebungsblöcke $B^{\mathrm{e}}_{l'}$ (hier Spiegelungen der Systemblöcke B^{s}_{l}), die Matrizen ihrer Hamilton-Operatoren $H^{\mathrm{e}}_{l'}$ sowie die Matrizen aller zur Verbindung der Blöcke relevanten Operatoren für $l = 1, \dots, L/2-2$ in jedem Schritt gespeichert. Die Idee, die dem Finite-System-Algorithmus zugrunde liegt, besteht nun darin, unter Verwendung der entsprechenden zuvor gespeicherten Umgebungsblöcke $B^{\mathrm{e}}_{l'}$, den Aufbau des Systemblocks bei festgehaltener Größe des Superblocks $L = l+l'+2$ fortzuführen, bis $l' = 1$ erreicht wird. Anschließend werden die Rollen von B^{s}_{l} und $B^{\mathrm{e}}_{l'}$ vertauscht und die Aufbaurichtung geändert.

Die einzelnen Arbeitsschritte des Finite-System-Algorithmus werden im Folgenden dargestellt:

0. Führe den Infinite-System Algorithmus aus, bis der Superblock die gewünschte Größe L erreicht hat. Speichere dabei in jedem Schritt die Systemblöcke B^{s}_{l}, die Matrizen ihrer Hamilton-Operatoren H^{s}_{l} sowie die Matrizen aller zur Verbindung der Blöcke relevanten Operatoren.

1. Führe die Schritte 4-6 des Infinite-System-Algorithmus aus, um B^{s}_{l+1} zu erhalten, und speichere das Ergebnis (Man beachte: Nun ist $l \neq l'$).

2. Bilde aus B^{s}_{l+1}, zwei einzelnen Gitterplätzen und $B^{\mathrm{e}}_{l'-1}$ ($l' = L - l - 2$) einen Superblock der Größe L.

3. Wiederhole die Schritte 1-2 bis $l = L - 3$ (d. h. $l' = 1$). Die Schritte 1-3 des Algorithmus nennt man die *links-nach-rechts Phase* (vgl. Abbildung 1.9).

4. Führe die Schritte 4-6 des Infinite-System-Algorithmus aus, wobei diesmal die Rollen von B^{s}_{l} und $B^{\mathrm{e}}_{l'}$ vertauscht werden, d. h. ändere die Aufbaurichtung, um $B^{\mathrm{e}}_{l'+1}$ zu erhalten und damit den rechten Block aufzubauen. Speichere das Ergebnis.

5. Bilde aus B^{s}_{l-1}, zwei einzelnen Gitterplätzen und $B^{\mathrm{e}}_{l'+1}$ den Superblock der Größe L.

6. Wiederhole die Schritte 4-5 bis $l = 1$. Die Schritte 4-6 des Algorithmus nennt man die *rechts-nach-links Phasse.*

7. Fahre fort mit Schritt 1.

Jedesmal wenn eine Richtungsänderung im Aufbau stattfindet, wird ein neuer Satz von gespeicherten Blöcken als Umgebungsblock verwendet. Der Vorteil dieser Vorgehensweise besteht darin, dass die Darstellung der gespeicherten Blöcke mit jedem Durchgang (*sweep*) durch das Gitter iterativ bis zur Konvergenz verbessert wird. Anders als im Infinite-System-Algorithmus lässt sich somit eine höhere Genauigkeit erzielen, ohne dass die Anzahl der gespeicherten Basiszustände m vergrößert wird. Für die Untersuchung von nicht spiegelsymmetrischen Systemen muss im Finite-System-Algorithmus lediglich die Aufbauphase (Schritt 0.) modifiziert werden.

1.4.5 Dynamische DMRG mittels Korrekturvektor-Methode

Die klassische DMRG eignet sich ausschließlich zur präzisen Berechnung von statischen Eigenschaften des zu untersuchenden Systems, darunter der Grundzustand und einige niedrige Anregungen. Häufig interessiert man sich jedoch auch für die dynamischen Eigenschaften sowie die höheren Anregungszustände. Seit ihrer Einführung versuchte man deshalb die klassische DMRG zu diesem Zweck zu modifizieren. Eine der vielen Erweiterungsmöglichkeiten ist die *Lanczos-Methode* [37], die man auch häufig als *Kettenbruch-Methode* bezeichnet. Sie ermöglicht eine präzise Bestimmung der ersten Momente des dynamischen Spektrums und liefert gute Ergebnisse, sofern das zu untersuchende System ein einfaches, diskretes Spektrum aufweist. Zur Untersuchung von Systemen mit komplizierten bzw. dichten Spektren erweist sich diese Methode jedoch als ungeeignet.

Eine weitere Erweiterungsmöglichkeit ist die *Korrekturvektor-Methode* [21,22]. Anders als die Lanczos-Methode ermöglicht sie eine präzise Bestimmung sowohl von diskreten als auch von dichten Spektren und eignet sich insbesondere zur Untersuchung hochenergetischer Eigenschaften des Systems.

Die wesentliche Idee, die der von Ramasesha et al. [21] erstmals vorgestellten und von Kühner und White [22] modifizierten Korrekturvektor-Methode zugrunde liegt, besteht darin, den Real- und Imaginärteil eines komplexen frequenzabhängigen Korrekturvektors als Zielzustände zu den üblichen Zielzuständen der klassischen DMRG hinzuzufügen. Der Korrekturvektor besitzt dabei die folgende Gestalt ($z \equiv \omega + \mathrm{i}\eta$)

$$|c(z)\rangle = \frac{1}{z - (\hat{H} - E_0)} \hat{A}^\dagger |0\rangle \ , \tag{1.100}$$

wobei $|0\rangle$ der Grundzustand, E_0 die Grundzustandsenergie zu dem Hamilton-Operator $\hat{H}$ und $\hat{A}$ ein Operator der zu untersuchenden physikalischen Größe ist. Er ist aufgrund der Verbreiterung η, die für die numerischen Berechnungen notwendig ist, komplex. Um Berechnungen mit komplexen Zahlen zu umgehen, schlugen Kühner und White [22] vor, diesen in einen Real- und Imaginärteil aufzuspalten

$$|c(z)\rangle = |c^{\mathrm{Re}}(z)\rangle + \mathrm{i}|c^{\mathrm{Im}}(z)\rangle \tag{1.101}$$

und beide Teile separat als zusätzliche Zielzustände innerhalb der DMRG zu verwenden. Den Imaginärteil des Korrekturvektors erhält man durch das Lösen des Gleichungssystems

$$\left(\eta^2 + (w - \hat{H} + E_0)^2\right)|c^{\mathrm{Im}}(z)\rangle = -\eta \hat{A}^\dagger |0\rangle \tag{1.102}$$

beispielsweise mittels des sog. *Konjugierte-Gradienten-Verfahrens* [45]. Dieses Gleichungssystem wird singulär, falls die Verbreiterung η zu klein gewählt wird. Für großes η ähnelt der Hamilton-Operator nahezu einer Diagonalmatrix und das Konjugierte-Gradienten-Verfahren konvergiert schneller als für kleines η. Somit begünstigt die Wahl einer hinreichend großen Verbreiterung zwar eine kürzere Rechenzeit, sie schränkt jedoch die Auflösung des Spektrums wesentlich ein. Der Realteil des Korrekturvektors lässt sich direkt aus dem Imaginärteil mittels

$$|c^{\mathrm{Re}}(z)\rangle = \frac{1}{\eta}(\hat{H} - E_0 - \omega)|c^{\mathrm{Im}}(z)\rangle \tag{1.103}$$

konstruieren.

Mit Hilfe des Korrekturvektors lassen sich je nach Wahl von $\hat{A}$ verschiedene Korrelationsfunktionen im Frequenzraum direkt berechnen, darunter die lokale (retardierte) Greenfunktion bei $T = 0$ ($\hat{A} \equiv \hat{c}_{i\sigma}$)

$$G_\sigma(z) = \langle 0|\hat{A}|c(z)\rangle \ . \tag{1.104}$$

Sie enthält wichtige Informationen zur Dynamik relevanter Observablen des zu untersuchenden Systems.

Die dynamische DMRG ermöglicht somit durch Hinzunahme von zwei weiteren Zielzuständen, $|c^{\mathrm{Re}}(z)\rangle$ und $|c^{\mathrm{Im}}(z)\rangle$ zum Grunzustand $|0\rangle$ sowie dem Zustand $\hat{A}^{\dagger}|0\rangle$ (der häufig als *erster Lanczos-Vektor* bezeichnet wird) und Optimierung der DMRG-Basis bezüglich dieser Zustände, die Berechnung der Greenfunktion zu einem vorgegebenen ω und η. Der Korrekturvektor muss dabei zu jedem ω separat berechnet werden, was zu einem großen Rechenaufwand führt. Man kann jedoch den Rechenaufwand erheblich reduzieren, falls sich der Korrekturvektor nicht wesentlich mit ω ändert. Dann kann die DMRG-Basis, die zur Darstellung eines Korrekturvektors optimiert wurde, für die Darstellung eines Korrekturvektors benachbarter Frequenzen weiter optimiert werden.

2 Implementierung des iterativen Selbstkonsistenzzyklus

2.1 Der Störstellenlöser

In dieser Arbeit wird die lokale Dynamik des Einband-Hubbard-Modells bei $T = 0$ und halber Bandfüllung auf einem (paaren) Bethe-Gitter untersucht. Das Einband-Hubbard-Modell besitzt in diesem Fall die Teilchen-Loch-Symmetrie (vgl. Abschnitt 1.1.2). Als Konsequenz dieser Symmetrie ergeben sich einige signifikante Eigenschaften der dynamischen Größen, welche zum Teil die Implementierung der einzelnen Arbeitsschritte des im Abschnitt 1.3.3 dargestellten iterativen Selbstkonsistenzzyklus deutlich vereinfachen. Die lokale retardierte Greenfunktion und Selbstenergie beispielsweise weisen in Anwesenheit der Teilchen-Loch-Symmetrie die folgenden Symmetrien auf

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Re}\, G_\sigma(\omega + \mathrm{i}0^+) &= -\mathrm{Re}\, G_\sigma(-\omega + \mathrm{i}0^+) && (2.1)\\
\mathrm{Im}\, G_\sigma(\omega + \mathrm{i}0^+) &= \mathrm{Im}\, G_\sigma(-\omega + \mathrm{i}0^+) && (2.2)\\
\mathrm{Re}\, \Sigma_\sigma(\omega + \mathrm{i}0^+) &= -\mathrm{Re}\, \Sigma_\sigma(-\omega + \mathrm{i}0^+) && (2.3)\\
\mathrm{Im}\, \Sigma_\sigma(\omega + \mathrm{i}0^+) &= \mathrm{Im}\, \Sigma_\sigma(-\omega + \mathrm{i}0^+)\ . && (2.4)
\end{aligned}
$$

Entsprechend weist die lokale Spektraldichte Achsensymmetrie auf

$$
\begin{aligned}
\rho_\sigma(\omega) &\equiv -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\, G_\sigma(\omega + \mathrm{i}0^+) && (2.5)\\
&= \rho_\sigma(-\omega)\ . && (2.6)
\end{aligned}
$$

Für die Untersuchung des Einband-Hubbard-Modells auf einem Bethe-Gitter bei $T = 0$ und halber Bandfüllung im Rahmen der dynamischen Molekularfeldtheorie genügt es daher, die dynamischen Eigenschaften des *symmetrischen* Einstörstellen-Anderson-Modells zu betrachten, welches durch den unter der Teilchen-Loch-Transformation (1.15) invarianten Hamilton-Operator ($\gamma_n, V \in \mathbb{R}$)

$$
\hat{H} = \sum_{n,\sigma} \gamma_n \left(\hat{c}^\dagger_{n\sigma}\hat{c}_{n+1,\sigma} + \hat{c}^\dagger_{n+1,\sigma}\hat{c}_{n\sigma}\right) + V\sum_\sigma \left(\hat{c}^\dagger_{\mathrm{d}\sigma}\hat{c}_{0\sigma} + \hat{c}^\dagger_{0\sigma}\hat{c}_{\mathrm{d}\sigma}\right) + U\left(\hat{n}_{\mathrm{d}\uparrow} - \frac{1}{2}\right)\left(\hat{n}_{\mathrm{d}\downarrow} - \frac{1}{2}\right) \quad (2.7)
$$

beschrieben wird. Dieser Hamilton-Operator stellt einen Spezialfall von (1.39) dar, mit $\epsilon_\mathrm{d} = -U/2$ und $\epsilon_i = 0$ für alle $i \geq 0$.

Die Berechnung der lokalen Greenfunktion des effektiven symmetrischen Einstörstellen-Anderson-Modells zu einer vorgegebenen (symmetrischen) Hybridisierungsfunktion und der Wechselwirkungsstärke U erfolgt mittels eines von Raas und Uhrig

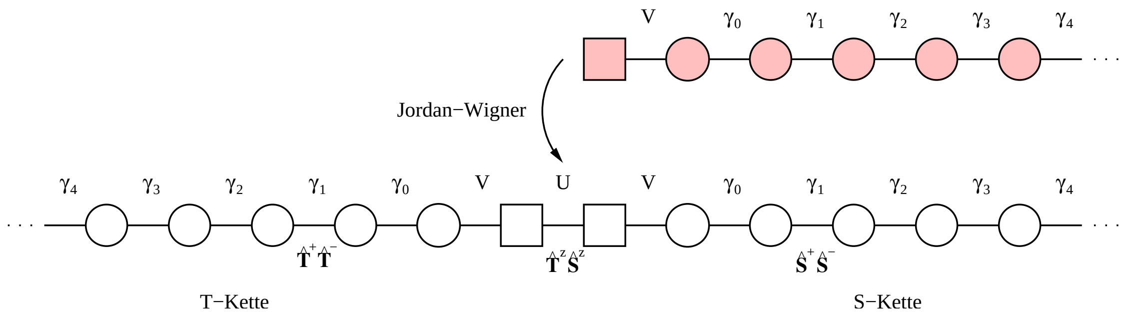

Abbildung 2.1: Abbildung des Einstörstellen-Anderson-Modells dargestellt als eine halb-unendliche Femionenkette auf ein äquivalentes Modell einer Spinkette. Die S-Spins resultieren aus den Spin-$\uparrow$-Fermionen, die T-Spins aus den Spin-$\downarrow$-Fermionen.

erstellten auf der dynamischen DMRG basierenden Störstellenlösers [24]. Dieser Störstellenlöser hat sich bereits bei der Untersuchung des Einstörstellen-Anderson-Modells bewährt [23]. Raas' Störstellenlöser verwendet zwecks einer einfacheren Implementierung eine Spinkettendarstellung des Hamilton-Operators (2.7). Diese resultiert aus der Abbildung der fermionischen Operatoren auf Spin-1/2-Operatoren mittels der *Jordan-Wigner-Transformation* [46]

$$\hat{c}_n = \exp\left[\mathrm{i}\pi\sum_{i=0}^{n-1}\hat{S}_i^+\hat{S}_i^-\right]\hat{S}_n^- \qquad \hat{c}_\mathrm{d} = \hat{S}_\mathrm{d}^- \,, \tag{2.8}$$

$$\hat{c}_n^\dagger = \hat{S}_n^+\exp\left[\mathrm{i}\pi\sum_{i=0}^{n-1}\hat{S}_i^+\hat{S}_i^-\right] \qquad \hat{c}_\mathrm{d}^\dagger = \hat{S}_\mathrm{d}^+ \,. \tag{2.9}$$

Unter Anwendung dieser Transformation auf (2.7) lässt sich die fermionische halb-unendliche Kette auf zwei halb-unendliche über die Störstelle gekoppelten Spinketten abbilden: eine S-Kette, die aus der Abbildung der Spin-$\uparrow$-Fermionen und eine T-Kette, die aus der Abbildung der Spin-$\downarrow$-Fermionen resultiert (vgl. Abbildung 2.1). Der Hamilton-Operator des symmetrischen Einstörstellen-Anderson-Modells in der Spinkettendarstellung nimmt dann die folgende Form an

$$\begin{aligned}\hat{H} = {} & V\left(\hat{S}_\mathrm{d}^+\hat{S}_0^- + \hat{S}_0^+\hat{S}_\mathrm{d}^-\right) + \sum_n \gamma_n\left(\hat{S}_n^+\hat{S}_{n+1}^- + \hat{S}_{n+1}^+\hat{S}_n^-\right) \\ & + V\left(\hat{T}_\mathrm{d}^+\hat{T}_0^- + \hat{T}_0^+\hat{T}_\mathrm{d}^-\right) + \sum_n \gamma_n\left(\hat{T}_n^+\hat{T}_{n+1}^- + \hat{T}_{n+1}^+\hat{T}_n^-\right) \\ & + U\hat{S}_\mathrm{d}^\mathrm{z}\hat{T}_\mathrm{d}^\mathrm{z} \,,\end{aligned} \tag{2.10}$$

wobei für die Transformation der Besetzungszahloperatoren die Identität

$$\hat{n}_\mathrm{d} = \hat{c}_\mathrm{d}^\dagger\hat{c}_\mathrm{d} = \hat{S}_\mathrm{d}^+\hat{S}_\mathrm{d}^- = \frac{1}{2} + \hat{S}_\mathrm{d}^\mathrm{z} \tag{2.11}$$

verwendet wurde. In dieser Spinkettendarstellung wird der Hilbertraum zum direkten Produkt der lokalen Hilberträume jedes einzelnen Gitterplatzes [23]. Es ist somit offensichtlich, dass es kein Vorzeichenproblem gibt, da das Spinproblem vollkommen unfrustriert ist.

Die Berechnung der dynamischen Eigenschaften des symmetrischen Einstörstellen-Anderson-Modells in der Spinkettendarstellung erfolgt mittels der dynamischen Dichtematrix-Renormierung basierend auf der Korrekturvektor-Methode [21, 22]. Dabei kommt der im Abschnitt 1.4.4 vorgestellte Finite-System-Algorithmus zum Einsatz. Der Finite-System-Algorithmus ist für endliche Ketten konzipiert. Dementsprechend muss die Spinkette trunkiert werden. Die Trunkierung erfolgt derart, dass in der S-Kette und in der T-Kette stets die gleiche Anzahl L von Spinplätzen vorhanden ist. Das System, das durch die trunkierte Spinkette beschrieben wird, entspricht somit dem ursprünglichen fermionischen System mit einer einzelnen Störstelle und einem trunkierten Bad, welches durch $L-1$ Fermionen-Plätze gebildet wird.

Als Zielzustände innerhalb der dynamischen DMRG werden, der Arbeit von Kühner und White [22] folgend, der Grundzustand $|0\rangle$ mit einem Gewicht von $p_0 = 0.4$, der erste Lanczos-Vektor $\hat{S}_\mathrm{d}^+|0\rangle$ mit einem Gewicht von $p_1 = 0.2$ sowie der Real- und Imaginärteil des komplexen Korrekturvektors ($\eta > 0$)

$$|c(\omega + \mathrm{i}\eta)\rangle = \frac{1}{\omega + \mathrm{i}\eta - (\hat{H} - E_0)} \hat{S}_\mathrm{d}^+ |0\rangle \tag{2.12}$$

mit jeweils einem Gewicht von $p_2 = p_3 = 0.2$ anvisiert. Mit Hilfe dieses Korrekturvektors wird die retardierte Greenfunktion

$$G_\sigma^>(\omega + \mathrm{i}\eta) = \langle 0|\hat{S}_\mathrm{d}^-|c(\omega + \mathrm{i}\eta)\rangle \tag{2.13}$$

berechnet (vgl. Abschnitt 1.4.5). Der hochgestellte Index $^>$ steht hierbei für den Beitrag für nichtnegative Frequenzen. Aufgrund der vorliegenden Teilchen-Loch-Symmetrie kann die *gesamte* retardierte Greenfunktion

$$G_\sigma(\omega + \mathrm{i}\eta) = G_\sigma^>(\omega + \mathrm{i}\eta) - G_\sigma^>(-\omega - \mathrm{i}\eta) \tag{2.14}$$

allein aus (2.13) rekonstruiert werden. Andernfalls müsste zusätzlich der Beitrag für negative Frequenzen

$$G_\sigma^<(\omega + \mathrm{i}\eta) = \langle 0|\hat{S}_\mathrm{d}^+ \frac{1}{\omega + \mathrm{i}\eta + (\hat{H} - E_0)} \hat{S}_\mathrm{d}^-|0\rangle \tag{2.15}$$

separat mittels der dynamischen DMRG bestimmt werden. Die gesamte retardierte Greenfunktion ließe sich dann wie folgt zusammensetzen

$$G_\sigma(\omega + \mathrm{i}\eta) = G_\sigma^>(\omega + \mathrm{i}\eta) + G_\sigma^<(\omega + \mathrm{i}\eta)\ . \tag{2.16}$$

An dieser Stelle sei betont, dass die Greenfunktion (2.13) ein fermionischer Propagator ist, auch wenn dieser unter Anwendung der Jordan-Wigner-Transformation mittels Spinoperatoren berechnet wird.

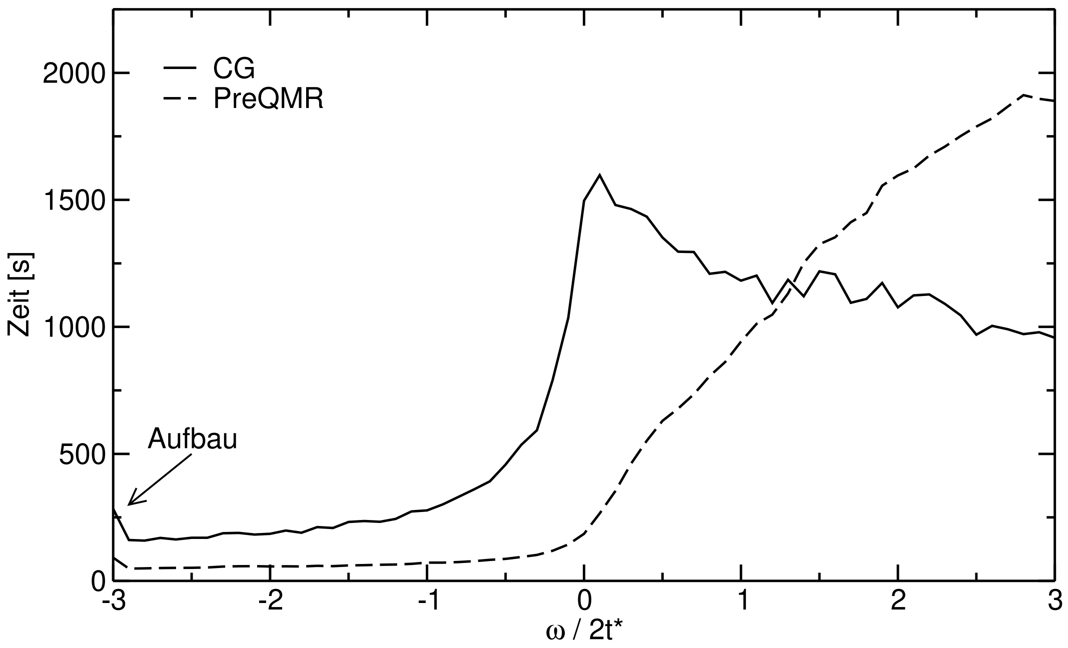

Abbildung 2.2: Gesamtrechenzeit zur Bestimmung der retardierten Greenfunktion ermittelt unter Verwendung einer semielliptischen Hybridisierungsfunktion [24]. Das Quasi-Minimum-Residuum-Verfahren mit Vorkonditionierung (PreQMR) ist für negative und hinreichend kleine positive Frequenzen deutlich schneller als das Konjugierte-Gradienten-Verfahren (CG).

Die Berechnung des Korrekturvektors (2.12) stellt den aufwändigsten und rechenintensivsten Schritt innerhalb der dynamischen DMRG dar. Zu diesem Zweck stellt Raas' Störstellenlöser eine breite Auswahl an optimierten numerischen Verfahren zur Verfügung, wobei nur zwei von ihnen hinsichtlich ihrer Geschwindigkeit und Stabilität für die Berechnung des Korrekturvektors ausgewählt werden, darunter das Konjugierte-Gradienten- (CG) [45] und das (komplex-symmetrische) Quasi-Minimum-Residuum-Verfahren (QMR) [47] mit Vorkonditionierung [24]. Im Letzteren wird aus Effizienzgründen der Korrekturvektor durch das Invertieren des linearen *komplexen* Gleichungssystems

$$A|c(\omega + \mathrm{i}\eta)\rangle = [\hat{S}_{\mathrm{d}}^{+}]|0\rangle \tag{2.17}$$

mit einer nahezu singulären *nicht-hermiteschen*, jedoch *komplex-symmetrischen* Matrix

$$A \equiv [\omega + \mathrm{i}\eta - (\hat{H} - E_0)] \tag{2.18}$$

bestimmt. Gegenüber der im Abschnitt 1.4.5 dargestellten von Kühner und White vorgeschlagenen Methode zur Umgehung von Operationen mit komplexen Zahlen wird in diesem Verfahren die komplexe Symmetrie der Matrix A gezielt für eine effiziente Invertierung genutzt. Diese Symmetrie wird in der von Kühner und White vorgeschlagenen Methode nicht beachtet.

Die beiden verwendeten numerischen Verfahren arbeiten iterativ. Die zum Erreichen einer vorgegebenen Genauigkeit benötigte Rechenzeit ist jedoch je nach Größe von ω unterschiedlich. Erfahrungsgemäß erreicht das QMR-Verfahren mit Vorkonditionierung für negative und hinreichend kleine positive Frequenzen eine vorgegebene Genauigkeit deutlich schneller als das CG-Verfahren (vgl. Abbildung 2.2). Oberhalb einer kritischen Frequenz erweist sich jedoch das QMR-Verfahren als instabil, was sich in einer schleppenden oder sogar mangelnden Konvergenz äußert. In diesem Fall und für alle Frequenzen oberhalb dieser kritischen Frequenz wird das für hohe Frequenzen meist stabilere und dort schneller konvergierende CG-Verfahren verwendet. Programmintern vollzieht sich der Wechsel zwischen den beiden numerischen Verfahren in der folgenden Weise: Da die Berechnung der verbreiterten retardierten Greenfunktion sinnvollerweise beginnend mit der kleinsten bis hin zur größten Frequenz erfolgt, wird die Berechnung des Korrekturvektors mit den QMR-Verfahren begonnen. Dieses Verfahren wird solange weiterverwendet, bis für eine bestimmte Frequenz die zuvor festgelegte Genauigkeit innerhalb einer vorgegebenen Anzahl von Iterationen nicht erreicht werden kann. Für diese Frequenz und für alle nachfolgenden Frequenzen wird der Korrekturvektor mittels des CG-Verfahrens berechnet. Dieser frequenzabhängige Einsatz beider Verfahren in einem einzelnen Lauf ermöglicht es, die für die Berechnung der retardierten Greenfunktion auf einem gerasterten Intervall I benötigte Gesamtrechenzeit deutlich zu reduzieren.

Die numerische Berechnung des Korrekturvektors zu einer vorgegebenen Frequenz ω kann ausschließlich bei einer endlichen hinreichend großen Verbreiterung ($\eta > 0$) erfolgen (vgl. Abschnitt 1.4.5). Entsprechend lässt sich die retardierte Greenfunktion (2.14) und die daraus abgeleitete (lokale) Spektraldichte

$$\rho_\sigma^{(\eta)}(\omega) = -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\, G_\sigma(\omega + \mathrm{i}\eta) \tag{2.19}$$

vorläufig nur für ein endliches η bestimmen. Die „verbreiterte“ Spektraldichte (2.19) entspricht der unverbreiterten Spektraldichte ($\eta = 0^+$), die mit der Lorenzfunktion $L_\eta(\omega) = (\eta/\pi)/(\omega^2 + \eta^2)$ der Breite η gefaltet ist

$$\rho_\sigma^{(\eta)}(\omega) = (L_\eta * \rho_\sigma)(\omega) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\zeta\, \rho_\sigma(\zeta) \frac{\eta}{\pi\left((\omega-\zeta)^2 + \eta^2\right)} \; . \tag{2.20}$$

Somit kann die unverbreiterte Spektraldichte aus der verbreiterten Spektraldichte mittels einer geeigneten Entfaltung rekonstruiert werden [23, 48, 49].

Neben der Notwendigkeit für die numerische Berechnung des Korrekturvektors wird die Verbreiterung zur Simulation des kontinuierlichen Spektrums einer unendlichen Kette benötigt, da die hier durchgeführten Berechnungen ausschließlich für endliche Kettenlängen erfolgen können. Bei der Wahl der Verbreiterung müssen diesbezüglich einige Aspekte berücksichtigt werden. Im Falle einer zu klein gewählten Verbreiterung weist die Spektraldichte Finite-Size-Effekte in Form von Peak-Strukturen auf. Auf der anderen Seite führt die Wahl einer zu großen Verbreiterung zur Ausschmierung von relevanten Strukturen innerhalb der Spektraldichte. Als optimal hat sich die Wahl

$$\eta_i \approx \Delta\omega_i \equiv |\omega_i - \omega_{i-1}| \geq \frac{2B}{L} \tag{2.21}$$

erwiesen, wobei $\Delta\omega_i$ den Abstand zwischen zwei benachbarten Stützstellen angibt, die das Intervall $I = [-B, B]$, auf dem die verbreiterte Spektraldichte berechnet werden soll, rastern und B eine sich an der Bandbreite orientierende Intervallgrenze ist ($B \approx W/2$). Dabei muss beachtet werden, dass Strukturen in der unverbreiterten Spektraldichte, deren Breiten kleiner als die Verbreiterung sind, eventuell nicht aufgelöst werden können.

2.2 Entfaltung der verbreiterten Daten

Die numerische Berechnung der retardierten Greenfunktion (2.14) und der daraus abgeleiteten Spektraldichte (2.19) mittels der dynamischen DMRG ist nur für kleine Kettenlängen und folglich wegen (2.21) nur für eine geringe Anzahl von Stützstellen ω_i ($i = 1, \ldots, n_\mathrm{s}$) innerhalb eines vernünftigen Zeitraums möglich. Entsprechend ist die verbreiterte Spektraldichte nur grob gerastert. Für die Implementierung des iterativen Selbstkonsistenzzyklus wird aus den später genannten Gründen eine weitaus feinere Rasterung der unverbreiterten Spektraldichte benötigt ($\rho_\sigma(\widetilde{\omega}_j)$ für $j = 1, \ldots, N_\mathrm{s}$ mit $N_\mathrm{s} \gg n_\mathrm{s}$). Im Gegensatz zu nichtlinearen Entfaltungsmethoden sind die linearen, auf Fourier-Transformation oder direkter Matrixinvertierung basierenden Entfaltungsmethoden nicht in der Lage, Informationen über die unverbreiterte Spektraldichte außerhalb der berechneten Stützstellen ($\omega \in I \setminus \{\omega_i\}$) in einer kontrollierten Weise zu extrapolieren. Unter Verwendung von Spline-Funktionen werden die Eigenschaften der Spektraldichte wie Normierung und Positiv-Semidefinitheit generell nicht berücksichtigt. Für die Entfaltung von (2.19) erweist es sich daher als notwendig, eine nichtlineare Enfaltungmethode zu verwenden, in der zusätzlich die Normierung und Positiv-Semidefinitheit der Spektraldichte berücksichtigt werden. Die in dieser Arbeit verwendete *Least-Bias-Entfaltung* [49] erfüllt die oben genannten Kriterien. Das Prinzip dieser Entfaltung soll im Folgenden kurz erläutert werden.

2.2.1 Least-Bias-Entfaltung

Seien W_i die mittels der dynamischen DMRG numerisch berechneten Werte der verbreiterten Spektraldichte zu einem vorgegebenen Satz von n_s Stützstellen ω_i, die ein vorgegebenes Intervall $I = [-B, B]$ rastern, dessen Breite sich an der Bandbreite W orientiert ($B \approx W/2$), η_i die zugehörigen Verbreiterungen und $\rho_\sigma(\omega)$ die auf I zu bestimmende unverbreiterte Spektraldichte, dann gilt

$$W_i = \int\limits_{-B}^{B} \mathrm{d}\omega\, \rho_\sigma(\omega) \frac{\eta_i}{\pi\left((\omega_i - \omega)^2 + \eta_i^2\right)} \quad \text{für} \quad i = 1, \ldots, n_\mathrm{s} \tag{2.22}$$

$$\text{mit} \quad 1 = \int\limits_{-B}^{B} \mathrm{d}\omega\, \rho_\sigma(\omega) \; . \tag{2.23}$$

Die Idee, die der Least-Bias-Entfaltung zugrunde liegt, besteht darin, die unverbreiterte Spektraldichte als eine Wahrscheinlichkeitsverteilung aufzufassen, deren Entropie definiert wird durch

$$S = -\int\limits_{-B}^{B} \mathrm{d}\omega\, \rho_\sigma(\omega) \ln \rho_\sigma(\omega) \; . \tag{2.24}$$

Der Wert $-S$ ist ein Maß für die Information, die in $\rho_\sigma(\omega)$ steckt. Dementsprechend erfordert die geringste Voreingenommenheit über $\rho_\sigma(\omega)$ die Minimierung von $-S$ bzw. die Maximierung von S. Die Bestimmung der unverbreiterten Spektraldichte reduziert sich somit auf das Auffinden eines Extremums unter den Nebenbedingungen (2.22) und (2.23). Dieses mathematische Problem lässt sich unter Verwendung der *Lagrange-Multiplikatoren* λ_i und $\widetilde{\mu}$ zu der folgenden Extremalbedingung umformulieren (vgl. [50])

$$0 = \frac{\partial S}{\partial \rho_\sigma(\omega)} + \sum_{i=1}^{n_\mathrm{s}} \lambda_i \frac{\partial W_i}{\partial \rho_\sigma(\omega)} + \widetilde{\mu} \frac{\partial}{\partial \rho_\sigma(\omega)} \int\limits_{-B}^{B} \mathrm{d}\omega\, \rho_\sigma(\omega) \tag{2.25}$$

$$\Leftrightarrow \quad 0 = -1 - \ln \rho_\sigma(\omega) + \sum_{i=1}^{n_\mathrm{s}} \lambda_i \frac{\eta_i}{\pi\left((\omega_i - \omega)^2 + \eta_i^2\right)} + \widetilde{\mu} \; . \tag{2.26}$$

Aus dieser lässt sich allein aus der Kenntnis der Lagrange-Multiplikatoren die gesuchte stetige positiv-semidefinite unverbreiterte Spektraldichte auf dem gesamten Intervall $I = [-B, B]$ wie folgt bestimmen ($\mu \equiv \widetilde{\mu} - 1$)

$$\rho_\sigma(\omega) = \exp\left[\mu + \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \frac{\eta_i}{\pi\left((\omega_i - \omega)^2 + \eta_i^2\right)}\right] . \tag{2.27}$$

Die Lagrange-Multiplikatoren werden aus den Nebenbedingungen (2.22) und (2.23) durch das Lösen eines nichtlinearen Gleichungssystems ermittelt. Die Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems erfolgt numerisch mittels der sog. *Newton-Raphson-Methode*. Hierzu wird die Funktion (`newt.cc`) aus den Numerical Recipes [51] verwendet, in denen diese Methode implementiert und optimiert wurde. Programmintern wird der Lagrange-Multiplikator μ nicht explizit bestimmt, sondern auf einen endlichen konstanten Wert gesetzt. Der Grund hierfür ist, dass die unverbreiterte Spektraldichte zu den mit festem μ bestimmten Lagrange-Multiplikatoren λ_i die Normierung bereits exzellent erfüllt. Durch die Festlegung von μ wird somit eine eventuelle Überkonditionierung des zu lösenden nichtlinearen Gleichungssystems verhindert.

2.2.2 Rekonstruktion der Greenfunktion

Für die Implementierung des in Abschnitt 1.3.3 dargestellten iterativen Selbstkonsistenzzyklus wird eine unverbreiterte retardierte Greenfunktion[1] $G_\sigma(\omega)$ des Störstellenmodells benötigt. Der Imaginärteil dieser Funktion lässt sich aus der zuvor entfalteten, beliebig fein gerasterten unverbreiterten Spektraldichte bestimmen

$$\operatorname{Im} G_\sigma(\omega) = -\pi \rho_\sigma(\omega) \ . \tag{2.28}$$

Aus diesem lässt sich der Realteil von $G_\sigma(\omega)$ rekonstruieren.

Die retardierte Greenfunktion ist per Definition eine analytische Funktion [36]. Folglich ist ihr Real- und Imaginärteil über die *Kramers-Kronig-Relation*

$$\operatorname{Re} G_\sigma(\omega) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\zeta \, \frac{\operatorname{Im} G_\sigma(\zeta)}{\omega - \zeta} \tag{2.29}$$

verknüpft. Hierbei bezeichnet $\mathcal{P}$ den Cauchyschen Hauptwert des Integrals.
Die Implementierung der Kramers-Kronig-Relation erfolgt aus Effizienz- und Genauigkeitsgründen unter Verwendung von sog. *Fast-Fourier-Transformationen* [52]. Es handelt sich hierbei um Algorithmen, die die Berechnung von diskreten Fourier-Transformationen stark vereinfachen, wodurch der Rechenaufwand sowie die in den Zwischenrechnungen entstehenden Rundungsfehler deutlich reduziert werden. Die Gleichung (2.29) lässt sich als ein Faltungsintegral auffassen

$$\operatorname{Re} G_\sigma(\omega) = -\frac{1}{\pi} \left[(f * \operatorname{Im} G_\sigma)(\omega) \right] \quad \text{mit} \quad f(\omega) = \mathcal{P} \frac{1}{\omega} \ . \tag{2.30}$$

Dieses Faltungsintegral wird unter Verwendung eines zur Faltung zweier Funktionen konzipierten auf Fast-Fourier-Transformationen basierenden Algorithmus aus den Numerical Recipes [51] (convlv.cc) berechnet. Die bei Verwendung von Fast-Fourier-Transformationen eventuell auftretenden Randeffekte werden durch ein geeignetes sog. „*zero-padding*“ vermieden [51].

Der auf Fast-Fourier-Transformationen basierende Faltungs-Algorithmus aus dem Numerical Recipies ist ausschließlich für die Faltung zweier Funktionen auf einem äquidistant gerasterten Intervall konzipiert. Dieser Umstand stellt dennoch keine Einschränkung für die Wahl der Stützstellen zur Berechnung der verbreiterten Spektraldichte dar. Durch die Verwendung der Least-Bias-Entfaltung ist man ohnehin

[1] Im Folgenden wird, sofern nicht anders vermerkt, die retardierte Greenfunktion stets mit $G_\sigma(\omega)$ bezeichnet: $G_\sigma(\omega) \equiv G_\sigma(\omega + \mathrm{i}0^+)$.

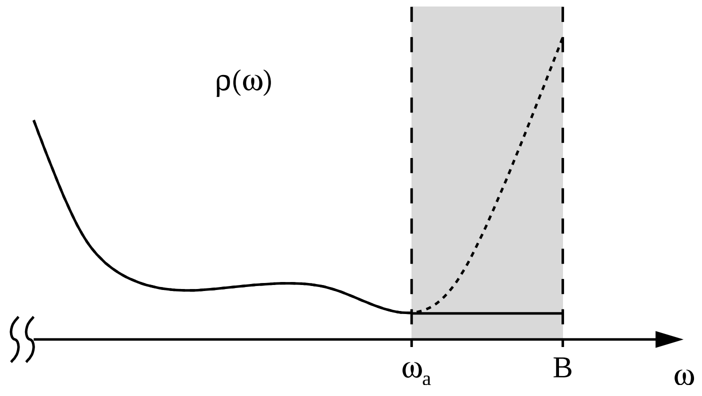

Abbildung 2.3: Beseitigung eines Entfaltungsartefakts (gepunktete Linie) der unverbreiterten Spektraldichte an der Intervallgrenze B. Die unverbreiterte Spektraldichte wird oberhalb des Minimums ω_a durch eine konstante Funktion bis zur Intervallgrenze fortgesetzt: $\rho(\omega) \equiv \rho(\omega_a)$ für $\omega \in]\omega_a, B]$.

in der Lage, die unverbreiterte Spektraldichte auf einem beliebig fein äquidistant gerasterten Intervall zu bestimmen, auch wenn die in die Entfaltung eingehende verbreiterte Spektraldichte auf einem nicht äquidistanten, verhältnismäßig grob gerasterten Intervall bestimmt wurde. Eine sinnvolle maximale Anzahl der Stützstellen ist lediglich durch die Kettenlänge und die Bandbreite beschränkt. Die Anzahl der Stützstellen darf jedoch nicht zu klein und ihre Lage nicht willkürlich gewählt werden, da sonst die eventuell auftretenden feinen Strukturen in der unverbreiterten Spektraldichte unzureichend aufgelöst werden.

2.2.3 Beseitigung von Entfaltungsartefakten

Bei der Entfaltung der Spektraldichte mittels der Least-Bias-Entfaltung entstehen in einem sehr kleinen Bereich an den Intervallgrenzen Entfaltungsartefakte in Form eines steilen, zur Intervallgrenze hin monotonen Anstiegs der unverbreiterten Spektraldichte (vgl. Abbildung 2.3). Dieser Anstieg beginnt oberhalb einer Frequenz ω_a nahe der Stützstelle am Intervallrand. Die unverbreiterte Spektraldichte ist, sofern das Intervall I hinreichend groß gewählt wurde, eine zum Intervallrand hin abfallende Funktion. Ein Anstieg oberhalb der Frequenz ω_a impliziert, dass ein lokales Minimum bei ω_a vorliegen muss: $\rho_\sigma{}'(\omega_a) = 0$. Diese Eigenschaft wird für die Beseitigung des Entfaltungsartefakts folgendermaßen ausgenutzt.

Zuerst wird die Lage des lokalen Minimums der unverbreiterten Spektraldichte in der Nähe der Intervallgrenze ermittelt. Aufgrund der Achsensymmetrie der Spektraldichte genügt es dabei, den positiven Quadranten zu betrachten ($\omega \geq 0$). Anschließend wird die unverbreiterte Spektraldichte nachträglich von ω_a aus bis zur Intervallgrenze näherungsweise durch eine konstante Funktion $\rho_\sigma(\omega) \equiv \rho_\sigma(\omega_a)$ ($\omega \in]\omega_a, B]$) fortgesetzt. Durch diese Art der Fortsetzung bleibt die Spektraldichte und damit auch der mit ihr verknüpfte Imaginärteil der retardierten Greenfunktion eine stetig differenzierbare Funktion an der Stelle ω_a. Der zugehörige, mittels Kramers-Kronig-Relation bestimmte Realteil weist somit keine Unstetigkeit an dieser Stelle auf, wodurch zumindest die Stetigkeit der retardierten Greenfunktion gewahrt bleibt. Die nachträgliche Beseitigung des Entfaltungsartefakts an der Intervallgrenze stellt einen winzigen Eingriff in die Spektraldichte dar. Dies wird deutlich wenn man die Größenordnungen der beteiligten Größen betrachtet: $\rho_\sigma(\omega_a) < 10^{-3}$ und $|B - \omega_a| < \Delta\omega$. $\Delta\omega$ bezeichnet hier den Stützstellenabstand zwischen zwei benachbarten Stützstellen, an denen die verbreiterte Spektraldichte mittels der dynamischen DMRG berechnet wird.

2.3 Die Kettenbruchentwicklung

Mit Hilfe der Least-Bias-Entfaltung und der Kramers-Kronig-Relation lässt sich aus der mittels der dynamischen DMRG berechneten verbreiterten grob gerasterten Spektraldichte eine unverbreiterte äquidistant beliebig fein gerasterte retardierte Greenfunktion auf dem gesamten Intervall I rekonstruieren. Diese allein legt im Falle des hier betrachteten Bethe-Gitters gemäß (1.78) die Hybridisierungsfunktion für die nächste Iteration innerhalb des iterativen Lösungsansatzes der DMFT-Gleichungen fest (vgl. Abschnitt 1.3.3). Die einfache Form dieser Gleichung ermöglicht somit allein aus der unverbreiterten retardierten Greenfunktion und deren Kettenbruchdarstellung

$$G_\sigma(\omega) = \cfrac{b_0^2}{\omega - \cfrac{b_1^2}{\omega - \cfrac{b_2^2}{\omega - \cdots}}} \tag{2.31}$$

die Bestimmung der Modellparameter des effektiven Einstörstellen-Anderson-Modells für die nächste Iteration des Selbstkonsistenzzyklus

$$\begin{aligned} V &= t^* b_0 \,, \\ \gamma_n &= \quad b_{n+1} \,, \quad \text{für} \quad n = 0, \ldots, L-3 \,. \end{aligned} \tag{2.32}$$

2.3.1 Rekursive Bestimmung der Kettenbruchkoeffizienten

Durch die Kenntnis der retardierten Greenfunktion ist man in der Lage, die Kettenbruchentwicklung einer beliebigen Tiefe

$$G_\sigma(\omega) = \cfrac{b_0^2}{\omega - a_0 - \cfrac{b_1^2}{\omega - a_1 - \cfrac{b_2^2}{\omega - a_2 - \cdots}}} \tag{2.33}$$

auf eine einfache Weise bestimmen zu können. Hierzu wird der Kettenbruch in (2.33) durch eine Rekursionsbeziehung

$$G_\sigma(\omega) \equiv G_0(\omega) \; , \tag{2.34}$$

$$G_n(\omega) = \frac{b_n^2}{\omega - a_n - G_{n+1}(\omega)} \tag{2.35}$$

dargestellt. Die nullten Koeffizienten b_0 und a_0 der retardierten Greenfunktion $G_\sigma(\omega)$ lassen sich aus der Spektraldichte und derem ersten Moment bestimmen [34, 53]

$$b_0^2 = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\, \rho(\omega) = -\frac{1}{\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\, \mathrm{Im}\, G_\sigma(\omega) \; , \tag{2.36}$$

$$a_0 = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\, \omega \rho(\omega) = -\frac{1}{\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\, \omega \mathrm{Im}\, G_\sigma(\omega) \; . \tag{2.37}$$

In der gleichen Weise lassen sich die Koeffizienten der Funktionen $G_n(\omega)$ bestimmen

$$b_n^2 = -\frac{1}{\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\, \mathrm{Im}\, G_n(\omega) \; , \tag{2.38}$$

$$a_n = -\frac{1}{\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\, \omega \mathrm{Im}\, G_n(\omega) \; . \tag{2.39}$$

Ausgehend von der Greenfunktion $G_\sigma(\omega) \equiv G_0(\omega)$ lässt sich somit unter Verwendung von (2.38) und (2.39) eine Kettenbruchentwicklung beliebiger Tiefe rekursiv konstruieren

$$G_{n+1}(\omega) = \omega - a_n - \frac{b_n^2}{G_n(\omega)} \; . \tag{2.40}$$

Da die retardierte Greenfunktion nur auf einem endlichen Intervall $I = [-B, B]$ bestimmt wird, muss in den auftretenden Integralen ein entsprechender Cutoff eingeführt werden ($\int_{-B}^{B} \mathrm{d}\omega \,\ldots$).

Unter Einbeziehung der Teilchen-Loch-Symmetrie weist die Spektraldichte gemäß (2.6) Achsensymmetrie auf, wodurch deren erstes Moment und somit sämtliche Koeffizienten a_n $(n = 0, 1, \ldots)$ in dem Kettenbruch (2.33) verschwinden. Die Kettenbruchentwicklung der retardierten Greenfunktion reduziert sich folglich zu (2.31). Die Koeffizienten a_n werden daher für das hier zu untersuchende System von vornherein in dem obigen Rekursionsschema gleich Null gesetzt.

Anhand der Kettenbruchentwicklung lässt sich insbesondere erkennen, warum man sich bei der Rekonstruktion der unverbreiterten Greenfunktion für die Benutzung einer nichtlinearen Entfaltungsmethode mit Berücksichtigung der Positiv-Semidefinitheit entschieden hat. Diese ist nämlich in der Lage, die Greenfunktion auf einem beliebig feinem, wegen der auf Fast-Fourier-Transformationen basierenden Implementierung der Kramers-Kronig-Relation äquidistant gerastertem Intervall bestimmen zu können ($G_\sigma(\widetilde{\omega}_j)$, $j = 1, \ldots, N_\mathrm{s}$ mit $N_\mathrm{s} \gg n_\mathrm{s}$). Der Fehler, der bei der Berechnung der Kettenbruchkoeffizienten durch die numerische Integration beispielsweise mittels der Trapez-Regel-Integration begangen wird, lässt sich somit durch die Wahl einer hinreichend großen Anzahl der Integrationsstützstellen N_s klein halten. Des Weiteren setzt die hier verwendete rekursive Bestimmung der Kettenbruchkoeffizienten eine positiv-semidefinite Spektraldichte voraus. Diese Voraussetzung liefert das ausschlaggebende Argument für die Verwendung der Least-Bias-Entfaltung zur Entfaltung der verbreiterten Spektraldichten innerhalb des iterativen Selbstkonsistenzzyklus.

Zu einer vorgegebenen Kettenlänge $2L$ genügt es, die Tiefe der Kettenbruchentwicklung auf $L-2$ festzulegen. Dadurch sind sämtliche Parameter in (2.10) zur Beschreibung des effektiven Bades und seiner Ankopplung an die Störstelle (V, γ_n) für die nächste Iteration des Selbstkonsistenzzyklus festgelegt.

2.3.2 Bestimmung der Bandkanten

Aus der Folge der Kettenbruchkoeffizienten $\{b_n\}$ lassen sich einige Informationen über die Eigenschaften der retardierten Greenfunktion und der damit verknüpften Spektraldichte, darunter die Bandstruktur, die Struktur der Singularitäten sowie das Abfallverhalten für $\omega \to \infty$ direkt ablesen [34]. Bei der Wahl der Stützstellen, die das Intervall I, auf dem die verbreiterte Spektraldichte berechnet werden soll, rastern, ist es von Vorteil, die Lage der Bandkanten der unverbreiterten Spektraldichte zu kennen. Damit können die Intervallgrenzen optimal gewählt und somit die Berechnung der Spektraldichte für überflüssige Stützstellen vermieden werden. In der Least-Bias-Entfaltung können dann stets diejenigen Stützstellen berücksichtigt werden, die die relevanten Informationen zur Bestimmung der unverbreiterten Spektraldichte enthalten.

Zur Bestimmung der Lage der Bandkanten einer begrenzten Spektraldichte[2] wird das asymptotische Verhalten ($n \to \infty$) der Kettenbruchkoeffizienten-Folge $\{b_n\}$ herangezogen. Für eine begrenzte Spektraldichte konvergiert diese gegen einen endlichen Wert b_∞, der mit der Lage der Bandkante ω_B wie folgt zusammenhängt [34]

$$b_\infty^2 = \frac{1}{4}\omega_\mathrm{B}^2 \; . \tag{2.41}$$

Die Information über die Lage der Bandkanten wird in der Implementierung des Selbstkonsistenzzyklus wie folgt verwertet.

Nachdem die verbreiterte, auf einem vorgegebenen Intervall $I = [-B, B]$ gerasterte Spektraldichte entfaltet und die retardierte Greenfunktion bestimmt wurde, wird zu der retardierten Greenfunktion die Kettenbruchentwicklung der Tiefe $L-2$ und dadurch die Folge der Kettenbruchkoeffizienten $\{b_n\}$ $(n = 0, 1, \ldots, L-2)$ ermittelt.

[2] Als eine begrenzte Spektraldichte wird in diesem Zusammenhang eine achsensymmetrische Spektraldichte bezeichnet mit den Eigenschaften: $\rho_\sigma(\omega) > 0$ für $|\omega| \le \omega_\mathrm{B} < \infty$ und $\rho_\sigma(\omega) = 0$ für $|\omega| > \omega_\mathrm{B}$.

Aus dem asymptotischen Verhalten dieser Folge wird mittels (2.41) die Lage der Bandkante[3] bestimmt. Die der Bandkante nächstliegende Stützstelle $\omega_i^{\mathrm{B}} \geq \omega_{\mathrm{B}}$ legt die Grenzen des Intervalls $J_1 \equiv [-\omega_i^{\mathrm{B}}, \omega_i^{\mathrm{B}}] \subset I$ fest. Stimmen die Intervalle I und J_1 nicht überein ($\omega_i^{\mathrm{B}} \neq B$), so wird die verbreiterte Spektraldichte erneut entfaltet, diesmal jedoch auf dem Intervall J_1. Dadurch werden bei der Entfaltung nur diejenigen Stützstellen berücksichtigt, die in dem durch die Bandkante festgelegten Intervall liegen ($\omega_i \in J_1$). Anschließend wird wieder die retardierte Greenfunktion, deren Kettenbruchentwicklung und daraus wiederum die Grenzen des Intervalls J_2 bestimmt. Diese Prozedur wird solange fortgesetzt, bis zwei nacheinander bestimmten Intervalle übereinstimmen ($J_{i-1} = J_i$), wodurch ein optimales Intervall J_{opt} ermittelt wird. Durch diese Intervalljustierung lassen sich unnötige, womöglich widersprüchliche Informationen aus der Entfaltung fernhalten. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass für die Bestimmung des asymptotischen Verhaltens in den meisten Fällen ein Kettenbruch endlicher Tiefe ausreicht, da bereits für $n \ll L-2$, sofern L hinreichend groß gewählt wurde, ein Konvergenzverhalten der Kettenbruchkoeffizienten-Folge zu beobachten ist (siehe z. B. Abbildung 3.5). Bleiben die Intervallgrenzen von J_{opt} für mehrere aufeinander folgende Iterationen des Selbstkonsistenzzyklus unverändert, so kann die verbreiterte Spektraldichte von vornherein auf dem Intervall J_{opt} berechnet werden, wodurch die unnötige zeitintensive Berechnung dieser Spektraldichte für nichtverwendete Stützstellen ($\omega_i \in I \setminus J_{\mathrm{opt}}$) vermieden wird.

2.4 Besonderheiten in der isolierenden Phase

2.4.1 Berücksichtigung einer Energielücke in der Kettenbruchentwicklung

Die Anwesenheit einer Energielücke in der unverbreiterten Spektraldichte an der Fermienergie ($\omega = 0$), wie sie beispielsweise für Spektraldichten in der isolierenden Phase zu erwarten ist, impliziert wegen (2.28) und der Punktsymmetrie des Realteils der retardierten Greenfunktion $G_\sigma(\omega)$ deren Verschwinden bei $\omega = 0$. Dies wiederum hat zur Folge, dass die Funktion $G_1(\omega)$ in der Rekursionsbeziehung (2.40) eine Polstelle bei $\omega = 0$ besitzt. Für die Berechnung des Kettenbruchkoeffizienten b_1 mittels (2.38) wird diese Polstelle unter Verwendung des Cauchyschen Hauptwerts berücksichtigt

$$b_1^2 = -\frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega \, \mathrm{Im}\, G_1(\omega) = \frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega \, \mathrm{Im}\, \frac{b_0^2}{G_0(\omega)} \; . \tag{2.42}$$

Mit Hilfe der Diracschen Identität erhält man

$$\begin{aligned} \mathcal{P}\frac{1}{G_0(0)} &= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{G_0(0) \pm \mathrm{i}\epsilon} \pm \mathrm{i}\pi\delta\left(G_0(0)\right) \\ &= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{G_0(0) \pm \mathrm{i}\epsilon} \pm \mathrm{i}\pi\frac{1}{{G_0}'(0)}\delta(0) \; . \end{aligned} \tag{2.43}$$

[3] Aufgrund der Achsensymmetrie von $\rho_\sigma(\omega)$ beschränkt sich die Diskussion auf den positiven Quadranten $\omega \geq 0$.

Somit kann der Beitrag der Polstelle zum Integral in der folgenden Weise berücksichtigt werden

$$b_1^2 = -\frac{1}{\pi} \int\limits_{\mathbb{R}\setminus\{0\}} \operatorname{Im} G_1(\omega)\,\mathrm{d}\omega + K_1 \quad \text{mit} \quad K_1 \equiv -\frac{b_0^2}{(\operatorname{Re} G_0)'(0)} \ . \tag{2.44}$$

Der Rekursionsbeziehung (2.40) zur Folge taucht in den Funktionen $G_n(\omega)$ für alle ungeraden n ebenfalls eine Polstelle bei $\omega = 0$ auf. Des Weiteren werden die Symmetrieeigenschaften der retardierten Greenfunktion $G_\sigma(\omega)$ rekursiv auf die Funktionen $G_n(\omega)$ übertragen. Die obige Vorgehensweise zur Berücksichtigung der Polstelle bei $\omega = 0$ kann daher gleichermaßen auf die Funktionen $G_n(\omega)$ übertragen werden. Analog zu (2.44) erhält man dann für alle ungeraden n

$$b_n^2 = -\frac{1}{\pi} \int\limits_{\mathbb{R}\setminus\{0\}} \operatorname{Im} G_n(\omega)\,\mathrm{d}\omega + K_n \quad \text{mit} \quad K_n = -\frac{b_{n-1}^2}{(\operatorname{Re} G_{n-1})'(0)} \ . \tag{2.45}$$

Die Bestimmung einer isolierenden Lösung innerhalb des hier realisierten Selbstkonsistenzzyklus setzt die Wahl einer Kettenlänge voraus, die eine ungerade Anzahl von Fermionen-Plätzen beschreibt. Diese Voraussetzung lässt sich anhand der Kettenbruchentwicklung der retardierten Greenfunktion und deren einfachen Zusammenhang mit der Hybridisierungsfunktion auf dem Bethe-Gitter (1.78) für die nächste Iteration des Selbstkonsistenzzyklus unmittelbar einsehen. Ein Kettenbruch der Tiefe k (mit den Kettenbruchkoeffizienten b_0, b_1, $\ldots$, b_k) stellt eine Greenfunktion mit $k+1$ Polstellen dar. Damit der Kettenbruch (2.31) eine an der Fermienergie ($\omega = 0$) verschwindende retardierte Greenfunktion darstellt, muss die Tiefe des Kettenbruchs eine ungerade Zahl sein. Andernfalls impliziert eine gerade Kettenbruchtiefe aufgrund der Symmetrie der retardierten Greenfunktion einen endlichen Imaginärteilbeitrag an der Fermienergie ($\operatorname{Im} G_\sigma(\omega = 0) \neq 0$). Eine ungerade Kettenbruchtiefe erfordert jedoch, dass $L-2$ und somit die Anzahl der Fermionen-Plätze L ungerade ist. Folglich kann die Bestimmung einer isolierenden Lösung innerhalb des hier realisierten Selbstkonsistenzzyklus nur bei einer ungeraden Anzahl der Fermionen-Plätze erfolgen, d. h. für eine Spinkette der Länge $2L$ mit $L = 3, 5, 7, \ldots$. Entsprechend lässt sich die Notwendigkeit einer geraden Anzahl von Fermionen-Plätzen zur Bestimmung der metallischen Lösung begründen.

Mit der Greenfunktion verschwindet gemäß (1.78) auch die Hybridisierungsfunktion für die nächste Iteration des Selbstkonsistenzzyklus an der Fermienergie. Eine bei $\omega = 0$ verschwindende Hybridisierungsfunktion wirkt sich insbesondere auf die niederenergetischen Eigenschaften der dynamischen Größen sowie auf die Grundzustandseigenschaften des durch das effektive symmetrische Einstörstellen-Anderson-Modell beschriebenen Systems aus. Eine an der Fermienergie nichtverschwindende Hybridisierungsfunktion ermöglicht bei $T = 0$ eine Hybridisierung der Leitungselektronen mit dem lokalen Moment der Störstelle. Es kommt zur Bildung von Quasiteilchen und damit zum Auftreten des Kondo-Effektes. Das magnetische Moment der Störstelle wird durch die Leitungselektronen abgeschirmt (Kondo-Abschirmung).

Der Grundzustand des effektiven symmetrischen Einstörstellen-Anderson-Modells ist dann ein Singulett, insbesondere ist er nicht entartet. Im Falle einer an der Fermienergie verschwindenden Hybridisierungsfunktion findet bei $T = 0$ keine Hybridisierung der Störstelle mit den Leitungselektronen und folglich kein Kondo-Effekt statt, so dass das magnetische Moment der Störstelle nicht abgeschirmt wird. Der Grundzustand des effektiven symmetrischen Einstörstellen-Anderson-Modells ist dann ein zweifach entarteter Dublett.

2.4.2 Berücksichtigung der Grundzustandsentartung

Für die Berechnung des Korrekturvektors müssen im Falle einer eventuell auftretenden zweifachen Entartung des Grundzustandes beide Eigenzustände, $|0\rangle_1$ und $|0\rangle_2$ zu der Grundzustandsenergie bestimmt werden. Diese liegen in dem Unterraum, der durch die Quantenzahl $(S_{\mathrm{z}}^{\mathrm{tot}} + T_{\mathrm{z}}^{\mathrm{tot}}) = 0$ charakterisiert wird. Aus der Linearkombination dieser Zustände wird ein Grundzustand

$$|0\rangle \equiv \alpha|0\rangle_1 + \beta|0\rangle_2 \tag{2.46}$$

gebildet, der neben dem ersten Lanczos-Vektor und dem Real- und Imaginärteil des Korrekturvektros als Zielzustand innerhalb der dynamischen DMRG anvisiert wird. Die Koeffizienten in (2.46) werden unter Berücksichtigung der folgenden Nebenbedingungen bestimmt:

1. Die halbe Bandfüllung des Systems muss bestehen bleiben

$$\langle 0|\hat{S}_{\mathrm{d}}^{-}\hat{S}_{\mathrm{d}}^{+}|0\rangle = \frac{1}{2} \Leftrightarrow \langle 0|\hat{S}_{\mathrm{d}}^{z} - \hat{T}_{\mathrm{d}}^{z}|0\rangle = 0\ . \tag{2.47}$$

2. Der Grundzustand muss normiert sein

$$\langle 0|0\rangle = 1\ . \tag{2.48}$$

Diese beiden Nebenbedingungen legen die Koeffizienten in (2.46) fest. Die Schwierigkeit, die bei der Berücksichtigung der Grundzustandsentartung auftaucht, besteht darin, dass der Lanczos-Algorithmus zu einem vorgegebenen Initialisierungzustand jeweils nur einen, und zwar den numerisch niedrigsten der beiden Eigenzustände zu der Grundzustandsenergie bestimmen kann. Der numerisch zweitniedrigste Zustand wird nicht gefunden. Diese Schwierigkeit wird durch eine gezielte Suche nach den beiden Eigenzuständen unter Modifizierung des Initialisierungszustands umgangen.

In einem ersten Schritt wird zu einem vorgegebenen Initialisierungszustand $|\mathrm{I}\rangle_1$ mit dem Lanczos-Algorithmus der numerisch niedrigste und damit einer der beiden Eigenzustände $|0\rangle_1$ zu der Grundzustandsenergie bestimmt. Dieser Eigenzustand wird aus dem Initialisierungszustand $|\mathrm{I}\rangle_1$ herausprojiziert, wodurch ein neuer Initialisierungszustand

$$|\mathrm{I}\rangle_2 \equiv |\mathrm{I}\rangle_1 - {}_1\langle \mathrm{I}|0\rangle_1|0\rangle_1 \tag{2.49}$$

gebildet wird. In einem zweiten Schritt wird erneut mit dem Lanczos-Algorithmus der numerisch niedrigste Eigenzustand $|0\rangle_2$ zu der Grundzustandsenergie bestimmt, diesmal jedoch zu dem Initialisierungszustand $|\mathrm{I}\rangle_2$. Sind die beiden Eigenzustände $|0\rangle_1$ und $|0\rangle_2$, orthogonal zueinander, so hat man die beiden nichtüberlappenden Eigenzustände des entarteten Grundzustandes für die Linearkombination (2.46) bestimmt, ansonsten wird wiederum der Zustand $|\mathrm{I}\rangle_2$ herausprojeziert und die obige Prozedur wiederholt.

2.5 Observablen zur Charakterisierung des Mott-Hubbard-Übergangs

2.5.1 Das Quasiteilchengewicht

Die Bestimmung der kritischen Wechselwirkungsstärke U_{c2}, oberhalb derer mit der Lokalisierung der Fermiflüssigkeit-Quasiteilchen die metallische Phase verschwindet, erfordert eine möglichst genaue Kenntnis des Quasiteilchengewichts $\mathcal{Z}$. Diese Größe kann aus dem Niederfrequenzverhalten der Selbstenergie bestimmt werden. Nach Luttinger [54,55] verhält sich die Selbstenergie einer lokalen Fermiflüssigkeit für kleine Frequenzen gemäß

$$\mathrm{Re}\,\Sigma_\sigma(\omega + \mathrm{i}0^+) = (1 - 1/\mathcal{Z})\,\omega + \mathcal{O}\left(\omega^3\right) \tag{2.50}$$

$$\mathrm{Im}\,\Sigma_\sigma(\omega + \mathrm{i}0^+) = -\beta\omega^2 + \mathcal{O}\left(\omega^4\right)\ , \tag{2.51}$$

mit $0 < \mathcal{Z} \leq 1$ und $\beta > 0$. Das Quasiteilchengewicht lässt sich daher aus (2.50) wie folgt bestimmen

$$\mathcal{Z} = \frac{1}{1 - \frac{\partial}{\partial\omega}\mathrm{Re}\,\Sigma_\sigma(\omega + \mathrm{i}0^+)\big|_{\omega=0}}\ . \tag{2.52}$$

Alternativ dazu kann das Quasiteilchengewicht aus der lokalen Greenfunktion des Hubbard-Modells $G_\sigma(\omega)$ und der lokalen freien Greenfunktion auf dem Bethe-Gitter $G^0_\sigma(\omega)$ ermittelt werden. Die Ableitung der Dyson-Gleichung (1.72) ergibt

$$G_\sigma{}'(\omega) = G^{0}_\sigma{}'\left(\omega - \Sigma_\sigma(\omega)\right) \cdot \Big(1 - \Sigma_\sigma{}'(\omega)\Big)\ . \tag{2.53}$$

Unter Berücksichtigung des Niederfrequenzverhaltens der Selbstenergie erhält man daraus für das Inverse des Quasiteilchengewichts

$$\mathcal{Z}^{-1} = \frac{G_\sigma{}'(0)}{G^0_\sigma{}'(0)} = 2t^{*2}\left(\mathrm{Re}\,G_\sigma\right)'(0)\ , \tag{2.54}$$

wobei im letzten Schritt die explizite Kenntnis der freien Greenfunktion auf dem Bethe-Gitter (1.75) und die Symmetrien der retardierten Greenfunktion $G_\sigma(\omega)$ verwendet wurden. Somit braucht die Selbstenergie für die Bestimmung des Quasiteilchengewichts des hier zu untersuchenden Systems nicht explizit berechnet zu werden. Stattdessen kann das Quasiteilchengewicht im Falle der Selbstkonsistenz

$(G_\sigma^{\rm Hub}(\omega) = G_\sigma^{\rm And}(\omega))$ direkt aus der mittels der dynamischen DMRG berechneten unverbreiterten retardierten Greenfunktion bestimmt werden.

Aus dem Niederfrequenzverhalten der Selbstenergie einer lokalen Fermiflüssigkeit und der Dyson-Gleichung (1.72) lässt sich eine weitere wichtige Eigenschaft für die lokale Spektraldichte $\rho_\sigma(\omega)$ folgern. Gemäß (1.75) gilt für diese

$$\rho_\sigma(\omega) = -\frac{1}{\pi}{\rm Im}\, G_\sigma^0\left(\omega - \Sigma_\sigma(\omega)\right) \ . \tag{2.55}$$

Somit ist nach (2.50) und (2.51) die lokale Spektraldichte eines wechselwirkenden Systems ($U \neq 0$) an der Fermienergie auf den Wert der freien lokalen Spektraldichte gepinnt

$$\rho_\sigma(0) = \rho_\sigma^0(0) \ . \tag{2.56}$$

Die Erfüllung dieses Pinning-Kriteriums ist ein wichtiger Indikator für die Unvoreingenommenheit des mittels (2.52) bzw. (2.55) bestimmten Quasiteilchengewichts. Ist das Pinning-Kriterium nur schlecht erfüllt, so kann dementsprechend das Quasiteilchengewicht nur unzureichend bestimmt werden.

2.5.2 Die Einteilchen-Anregungslücke

Die Einteilchen-Anregungslücke eines Systems mit L Elektronen bei $T = 0$ ist definiert durch

$$\Delta(U, L) \equiv \mu^+(U, L) - \mu^-(U, L) \ , \tag{2.57}$$

wobei die chemischen Potentiale

$$\mu^+(U, L) = E_0(L+1, U) - E_0(L, U) \ , \tag{2.58}$$

$$\mu^-(U, L) = E_0(L, U) - E_0(L-1, U) \tag{2.59}$$

die minimalen Energien sind, die benötigt werden, um ein Elektron zum Grundzustand eines Systems mit L bzw. $L-1$ Elektronen hinzuzufügen. Im Falle der Selbstkonsistenz und im Limes $L \to \infty$ stimmt die Einteilchen-Anregungslücke des Einstörstellen-Anderson-Modells mit der des hier untersuchten Einband-Hubbard-Modells überein.

Die Einteilchen-Anregungslücke des effektiven symmetrischen Einstörstellen-Anderson-Modells wird mittels der (klassischen) DMRG aus der Differenz der Grundzustandsenergie $E_0^{\rm And}(U, L)$ (der niedrigsten Energie im Unterraum, der durch die Quantenzahl $(S_{\rm z}^{\rm tot} + T_{\rm z}^{\rm tot}) = 0$ charakterisiert wird) und der Einteilchen-Anregungsenergie $E_1^{\rm And}(U, L)$ (der niedrigsten Energie im Unterraum, der durch die Quantenzahl $(S_{\rm z}^{\rm tot} + T_{\rm z}^{\rm tot}) = 1$ charakterisiert wird)

$$\Delta^{\rm And}(U, L)/2 \equiv E_1^{\rm And}(U, L) - E_0^{\rm And}(U, L) \tag{2.60}$$

ermittelt. Als Zielzustände werden hierzu der Grundzustand $|0\rangle$ mit einem Gewicht von $p_0 = 0.6$ und der Einteilchen-Anregungszustand[4] $|1\rangle$ mit einem Gewicht von

[4] Der Anregungszustand ist der Eigenzustand zu der Einteilchen-Anregungsenergie $E_1^{\rm And}(U, L)$. Er liegt im gleichen Unterraum wie der erste Lanczos-Vektor $\hat{S}_{\rm d}^+|0\rangle$.

$p_0 = 0.4$ anvisiert. Anders als bei der (dynamischen) Berechnung des Korrekturvektors, braucht die Grundzustandsentartung (vgl. Abschnitt 2.4.2) für die Berechnung der Einteilchen-Anregungslücke nicht zwingendermaßen berücksichtigt zu werden, da hier ausschließlich eine genaue Kenntnis der Grundzustandsenergie vonnöten ist.

Obwohl die Einteilchen-Anregungslücke des effektiven Einstörstellen-Anderson-Modells nur im Falle der Selbstkonsistenz und im Limes $L \to \infty$ mit der Anregungslücke des Einband-Hubbard-Modells übereinstimmt, erweist es sich als sinnvoll, diese Größe im Vorlauf jeder Iteration des Selbstkonsistenzzyklus, der stets für eine endliche Kettenlänge durchgeführt wird, zu berechnen. Die Information über die Einteilchen-Anregungslücke bei endlicher Kettenlänge wird für die Beseitigung von Entfaltungsartefakten innerhalb der Spektraldichte-Lücke verwendet. Des Weiteren wird die Stabilität dieser Größe für mehrere aufeinander folgende Iterationen des Selbstkonsistenzzyklus als ein zusätzliches Selbstkonsistenzkriterium benutzt.

Bei der Entfaltung einer Spektraldichte mit Lücke können Entfaltungsartefakte zu einem zwar sehr geringen jedoch endlichen Beitrag dieser Größe innerhalb der Lücke führen ($\rho_\sigma(\omega) \neq 0$ für $|\omega| \leq \Delta^{\mathrm{And}}(U,\infty)/2$). Diese Entfaltungsartefakte können beseitigt werden, indem die unverbreiterte Spektraldichte innerhalb der Lücke nachträglich gleich Null gesetzt wird ($\rho_\sigma(\omega) = 0$ für $|\omega| \leq \Delta^{\mathrm{And}}(U,\infty)/2$). Da die Berechnung der Einteilchen-Anregungslücke in jeder Iteration des Selbstkonsistenzzyklus für eine endliche Kettenlänge erfolgt, ist die Größe dieser Lücke nur für ein endliches L bekannt. Für hinreichend große Kettenlängen stellt diese dennoch eine gute Näherung zum thermodynamischen Limes dar

$$\Delta^{\mathrm{And}}(U,L) \approx \Delta^{\mathrm{And}}(U,\infty) \ . \tag{2.61}$$

Empirisch findet man heraus, dass die Einteilchen-Anregungslücke für ein endliches System größer ist als im thermodynamischen Limes: $\Delta^{\mathrm{And}}(U,L) \geq \Delta^{\mathrm{And}}(U,\infty)$. Um zu verhindern, dass neben den Entfaltungsartefakten ein tatsächlicher Beitrag der unverbreiterten Spektraldichte entfernt wird, muss diesbezüglich ein Korrekturparameter $\delta_L > 0$ eingeführt werden, so dass gilt

$$\Delta_\delta^{\mathrm{And}}(U,L)/2 \equiv \Delta^{\mathrm{And}}(U,L)/2 - \delta_L \leq \Delta^{\mathrm{And}}(U,\infty)/2 \ . \tag{2.62}$$

Dieser Korrekturparameter wird zu Beginn des Selbstkonsistenzzyklus festgelegt. Dabei muss beachtet werden, dass dieser hinreichend groß gewählt wird, so dass einerseits kein tatsächlicher Beitrag der Spektraldichte entfernt wird, andererseits alle Entfaltungsartefakte beseitigt werden. Des Weiteren muss darauf geachtet werden, dass die unverbreiterte Spektraldichte und der damit verknüpfte Imaginärteil der retardierten Greenfunktion an der Stelle $|\omega| = \Delta_\delta^{\mathrm{And}}(U,L)/2$ möglichst eine stetig differenzierbare Funktion bleibt, da sonst eine Unstetigkeit in dem mittels Kramers-Kronig-Relation rekonstruierten Realteil zu erwarten ist.

2.5.3 Die Grundzustandsenergie und die mittlere Doppelbesetzung

Die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz und die mittlere Doppelbesetzung des Einband-Hubbard-Modells können im Falle der Selbstkonsistenz unmittelbar aus den

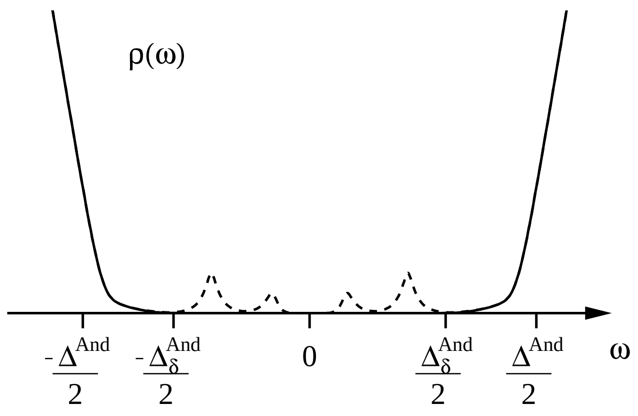

Abbildung 2.4: Beseitigung von Entfaltungsartefakten (gestrichelte Linie) innerhalb der Spektraldichte-Lücke. Die unverbreiterte Spektraldichte wird für $|\omega| \leq \Delta_\delta^{\mathrm{And}}(U,L)/2$ auf Null gesetzt.

Erwartungswerten des effektiven Einstörstellen-Anderson-Modells berechnet werden. Im Grenzfall $Z \to \infty$ stimmen dann die lokalen Greenfunktionen und Selbstenergien beider Modelle überein. Somit ist die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz des Einband-Hubbard-Modells mit der Grundzustandsenergie des effektiven Einstörstellen-Anderson-Modells an der Störstelle identisch. Die mittlere Doppelbesetzung ist in dem hier untersuchten Einband-Hubbard-Modell mit der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz E_0/L wie folgt verknüpft

$$\bar{d}(U) = \frac{1}{4} + \frac{1}{L}\frac{\partial E_0}{\partial U} \; . \tag{2.63}$$

Dadurch ist für $Z \to \infty$ und im Falle der Selbstkonsistenz auch die mittlere Doppelbesetzung des Einband-Hubbard-Modells mit der Doppelbesetzung an der Störstelle im effektiven Einstörstellen-Anderson-Modell identisch. Für die mittlere Doppelbesetzung des Einband-Hubbard-Modells erhält man daher

$$\bar{d}(U) = \langle \hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow}\rangle_{\mathrm{Hub}} = \langle \hat{n}_{\mathrm{d}\uparrow}\hat{n}_{\mathrm{d}\downarrow}\rangle_{\mathrm{And}} = \langle (1/2 + \hat{S}_{\mathrm{d}}^{\mathrm{z}})(1/2 + \hat{T}_{\mathrm{d}}^{\mathrm{z}})\rangle_{\mathrm{And}} \; . \tag{2.64}$$

Die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz des Einband-Hubbard-Modells bei halber Bandfüllung (E_0/L) lässt sich im Falle der Selbstkonsistenz aus der folgenden Beziehung gewinnen [56]

$$\frac{E_0}{L} = U\left(\langle \hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow}\rangle_{\mathrm{And}} - 1/4\right) + V\sum_{\sigma}\langle \hat{c}_{\mathrm{d}\sigma}^{\dagger}\hat{c}_{0\sigma}\rangle_{\mathrm{And}} \tag{2.65}$$

$$= U\left(\bar{d}(U) - 1/4\right) + V\langle \hat{S}_{\mathrm{d}}^{+}\hat{S}_{0}^{-} + \hat{T}_{\mathrm{d}}^{+}\hat{T}_{0}^{-}\rangle_{\mathrm{And}} \; , \tag{2.66}$$

wobei der erste Term auf der rechten Seite den Beitrag der potentiellen Energie und der zweite Term den Beitrag der kinetischen Energie darstellt. Die Erwarungswerte in (2.64) und (2.66) werden gemeinsam mit der Einteilchen-Anregungslücke im Vorlauf jeder Iteration des Selbstkonsistenzzyklus mittels der (klassischen) DMRG ermittelt, da zu deren Bestimmung die gleichen Zielzustände verwendet werden können. Analog zu der Einteilchen-Anregungslücke wird die Stabilität der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz und der mittleren Doppelbesetzung als ein weiteres zusätzliches Selbstkonsistenzkriterium verwendet.

Mit Hilfe der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz lässt sich im Falle einer Koexistenz der metallischen und isolierenden Lösung die Phase charakterisieren, in der sich das System zu einer vorgegebenen Wechselwirkungsstärke U tatsächlich befindet. Aus der mittleren Doppelbesetzung $\bar{d}(U)$ lassen sich am Übergang von der metallischen in die isolierende Phase Rückschlüsse über die Ordnung des Phasenübergangs gewinnen. Unter der Voraussetzung einer stetigen Grundzustandsenergie pro Gitterplatz als Funktion der Wechselwirkungsstärke U impliziert wegen (2.63) eine Unstetigkeit von $\bar{d}(U)$ an der kritischen Wechselwirkungsstärke U_c einen Phasenübergang erster Ordnung, andernfalls findet ein Phasenübergang von mindestens zweiter Ordnung statt.

2.6 Bemerkungen zur Implementierung

Die Implementierung der einzelnen Arbeitsschritte des iterativen Selbstkonsistenzzyklus erfolgt in der Programmiersprache C++. Dies ist die Programmiersprache, in der Raas' Störstellenlöser bereits implementiert wurde. Die Wahl der gleichen Programmiersprache ermöglicht es, Raas' Störstellenlöser als ein „Kernprogramm“ in eine Selbstkonsistenzschleife zu integrieren. Des Weiteren können bei der Implementierung der einzelnen Arbeitsschritte bereits vorhandende Routinen, beispielsweise für Operationen mit komplexen Zahlen, sowie optimierte Algorithmen aus den Numerical Recipes [51] verwendet und gegebenenfalls modifiziert werden. Für die Berechnung der Einteilchen-Anregungslücke, der mittleren Doppelbesetzung sowie der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz innerhalb der (klassischen) DMRG steht dann insbesondere eine Auswahl an optimierten DMRG-Routinen des Störstellenlösers zur Verfügung.

Der ordnungsgemäße Ablauf aller Arbeitsschritte wird mittels zusätzlich eingebauten Kontrollen überprüft. Zur Überprüfung der Kettenbruchentwicklung beispielsweise wird die retardierte Greenfunktion aus den Kettenbruchkoeffizienten rekonstruiert und mit der ursprünglichen retardierten Greenfunktion verglichen. Die Rekonstruktion der retardierten Greenfunktion

$$G_\sigma(\omega) = \cfrac{b_0^2}{\omega - \cfrac{b_1^2}{\omega - \dots \cfrac{}{\dots - \cfrac{b_k^2}{\omega - b_{k+1}^2 c(\omega)}}}} \tag{2.67}$$

erfolgt dabei unter Einsatz von speziellen Terminatoren $c(\omega)$, darunter dem sog.

Quadratwurzel-Terminator [34]

$$c(\omega) = \frac{1}{2b_{k+1}^2}\left(\omega - \sqrt{\omega^2 - 4b_{k+1}^2}\right) \tag{2.68}$$

für die retardierte Greenfunktion zu einer begrenzten Spektraldichte und dem sog. *Lücken-Terminator* [34]

$$c(\omega) = \frac{1}{2b_{k+1}^2}\left[\omega - \frac{b_k^2 - b_{k+1}^2}{\omega} - \sqrt{\frac{b_k^2 - b_{k+1}^2}{\omega^2} + \omega^2 - 2\left(b_k^2 + b_{k+1}^2\right)}\right] \tag{2.69}$$

für die retardierte Greenfunktion zu einer Spektraldichte mit einer Lücke an der Fermienergie. Alle berechneten statischen sowie dynamischen Größen, insbesondere die Modellparameter zur Beschreibung des effektiven Bades (V, γ_n), werden zu jeder Iteration in entsprechend gekennzeichneten Dateien ausgegeben. Dadurch kann der Selbstkonsistenzzyklus auch bei einem eventuellen Programmabbruch (z. B. bei Zeitüberschreitung auf den rechenzeitbeschränkten Computern des RRZK) problemlos von der letzten erfolgreich durchgeführten Iteration an wieder aufgenommen werden.

3 Ergebnisse

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse des in dieser Arbeit realisierten iterativen Lösungsansatzes der DMFT-Gleichungen basierend auf der dynamischen DMRG in der paramagnetischen metallischen und der paramagnetischen isolierenden Phase dargestellt und mit Ergebnissen anderer numerischer sowie störungstheoretischer Methoden verglichen. Als Energieeinheit wird dabei stets die halbe Bandbreite D verwendet ($2t^* \equiv D$).

3.1 Spektraldichten der paramagnetischen metallischen Phase

Die Berechnung einer selbstkonsistenten Lösung in der metallischen Phase zu den Wechselwirkungsstärken $U \leq 2D$ erfolgt mittels einer Initialisierungs-Hybridisierungsfunktion $\Gamma_S(\omega)$ zu der semielliptischen Zustandsdichte (1.51). Diese entspricht der exakten Lösung des zu untersuchenden Systems im Fermigas-Limes ($U = 0$). Für höhere Wechselwirkungsstärken ($U > 2D$) wird die Hybridisierungsfunktion zu der zuvor für $U = 2D$ selbstkonsistent berechneten (lokalen) Spektraldichte als Initialisierungsfunktion gewählt. Durch diese Wahl kann für $U > 2D$ die Anzahl der zur Bestimmung einer selbstkonsistenten Lösung benötigten Iterationen erheblich reduziert werden. Legitimiert wird diese Vorgehensweise durch die Erwartung, dass eine selbstkonsistente Lösung zu einer festen Systemgröße eindeutig ist, sofern die zu ihrer Berechnung gewählten Initialisierungsfunktionen die selbe Phase beschreiben ($\Gamma_S(0) \neq 0$ für die metallische Phase, $\Gamma_S(0) = 0$ für die isolierende Phase). Diese Eindeutigkeit wurde zuvor anhand verschieden gewählter Initialisierungsfunktionen überprüft. Des Weiteren werden in der metallischen Phase selbstkonsistente Lösungen zu verschiedenen Kettenlängen des Störstellenlösers bestimmt, um den Einfluss der Systemgröße, genauer den Einfluss der Anzahl an Bad-Gitterplätzen im selbstkonsistent zu bestimmenden effektiven Bad, auf die selbstkonsistenten Lösungen zu untersuchen. Zu diesem Zweck werden Lösungen für $L = 120$, $L = 160$ und teilweise für $L = 240$ Gitterplätze (eine Störstelle und $L - 1$ Bad-Gitterplätze) bestimmt. Diese Systemgrößen entsprechen Spinketten mit 240, 320 und 480 Spins. Da die Gesamtrechenzeit für die Berechnung der verbreiterten Spektraldichten auf einem vorgegebenen Intervall mit der Kettenlänge anwächst (ca. $\propto 2L$), erweist es sich bei der Verwendung von langen Ketten als sinnvoll, eine Initialisierungsfunktion zu wählen, die nach möglichst wenigen Iterationen zu einer selbstkonsistenten Lösung führt. Aus diesem Grund werden für große Kettenlängen Initialisierungs-Hybridisierungsfunktionen zu den zuvor für kleinere Kettenlängen selbstkonsistent bestimmten Lösungen verwendet.

Alle in dieser Arbeit durchgeführten DMRG-Berechnungen erfolgen mit einer Basis bestehend aus $m = 128$ für die Renormierung zu behaltenen Zuständen. Diese Wahl erweist sich für die in dieser Arbeit eingesetzten Kettenlängen als die beste Möglichkeit, auf der einen Seite eine hohe Genauigkeit zu gewährleisten und gleichzeitig die benötigte Rechenzeit nicht zu hoch werden zu lassen. Alle verbreiterten Spektraldichten in der paramagnetischen metallischen Phase werden auf einem Intervall $I = [-B, B]$ mit $B = 3D$ berechnet. Die Wahl dieses Intervalls resultiert aus der Beobachtung der optimalen Intervallgröße für mehrere aufeinander folgende Iterationen, die in jeder Iteration aus dem asymptotischen Verhalten der Kettenbruchfolge $\{b_n\}$ ermittelt wird (vgl. Abschnitt 2.3.2). Mit Ausnahme von $U = 2.8D$ wird das Intervall I für alle betrachteten Wechselwirkungsstärken durch $n_\mathrm{s} = 61$ Stützstellen ω_i, an denen die verbreiterte Spektraldichte mittels der dynamischen DMRG berechnet wird, äquidistant gerastert. Diese Rasterung entspricht einem Stützstellenabstand von $\Delta\omega = 0.1D$ und daher nach (2.21) einer für alle Stützstellen identisch gewählten Verbreiterung $\eta = 0.1D$. Für $U = 2.8D$ wird zur Auflösung von scharfen Strukturen in einzelnen Bereichen der Spektraldichte teilweise eine feinere Rasterung mit kleinerer Verbreiterung verwendet ($\Delta\omega = \eta = 0.05D$). Die unverbreiterte Spektraldichte wird mittels der Least-Bias-Entfaltung auf $N = 100001$ Stützstellen $\widetilde{\omega}_j$ bestimmt, um die retardierte Greenfunktion zu rekonstruieren und ihre Kettenbruchentwicklung zu ermitteln.

Eine metallische Lösung wird als selbstkonsistent aufgefasst, falls *mindestens* die folgenden beiden Selbstkonsistenzkriterien erfüllt sind:

1. Die unverbreiterten Spektraldichten aus zwei aufeinander folgenden Selbstkonsistenzzyklus-Iterationen erfüllen für alle $\widetilde{\omega}_j$ $(j = 1, \ldots, N_\mathrm{s})$

$$|\Delta\rho_\sigma(\widetilde{\omega}_j)| \equiv |\rho_\sigma^{(i)}(\widetilde{\omega}_j) - \rho_\sigma^{(i-1)}(\widetilde{\omega}_j)| < \varepsilon_\mathrm{met} \quad \text{mit} \quad \varepsilon_\mathrm{met} = 4 \times 10^{-3} D\,. \tag{3.1}$$

2. Die mittlere Doppelbesetzung und die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz sind für zwei aufeinander folgende Iterationen stabil, d. h. die relative Abweichung jeder dieser Größen zwischen zwei aufeinander folgenden Iterationen beträgt maximal 0.01%.

Sind beide Selbstkonsistenzkriterien erfüllt, kann der Selbstkonsistenzzyklus beendet werden. Die mittels des Störstellenlösers berechneten dynamischen Einteilchen-Eigenschaften stimmen dann mit denen des in dieser Arbeit untersuchten Einband-Hubbard-Modells im Rahmen der numerischen Genauigkeit überein. An dieser Stelle sei jedoch angemerkt, dass die Beendigung des Selbstkonsistenzzyklus nicht unmittelbar nach der Erfüllung der obigen Selbstkonsistenzkriterien erfolgt. Im Allgemeinen werden einige zusätzliche Iterationen durchgeführt, bis die Schranke ε_met in (3.1) nicht weiter herabgesetzt werden kann. Für kleine Wechselwirkungsstärken ($U < 1.8D$) wird das Kriterium (3.1) sogar mit einer Schranke $\varepsilon_\mathrm{met} = 10^{-3}D$ erfüllt. Die obigen Selbstkonsistenzkriterien stellen somit lediglich eine Minimalanforderung an die selbstkonsistenten Lösungen dar. Zum Erreichen der Selbstkonsistenz in der metallischen Phase werden je nach Wahl der Initialisierungsfunktion und der Wechselwirkungsstärke zwischen 12 und 24 Iterationen benötigt, wobei die Anzahl der benötigten Iterationen mit der Wechselwirkungsstärke wächst.

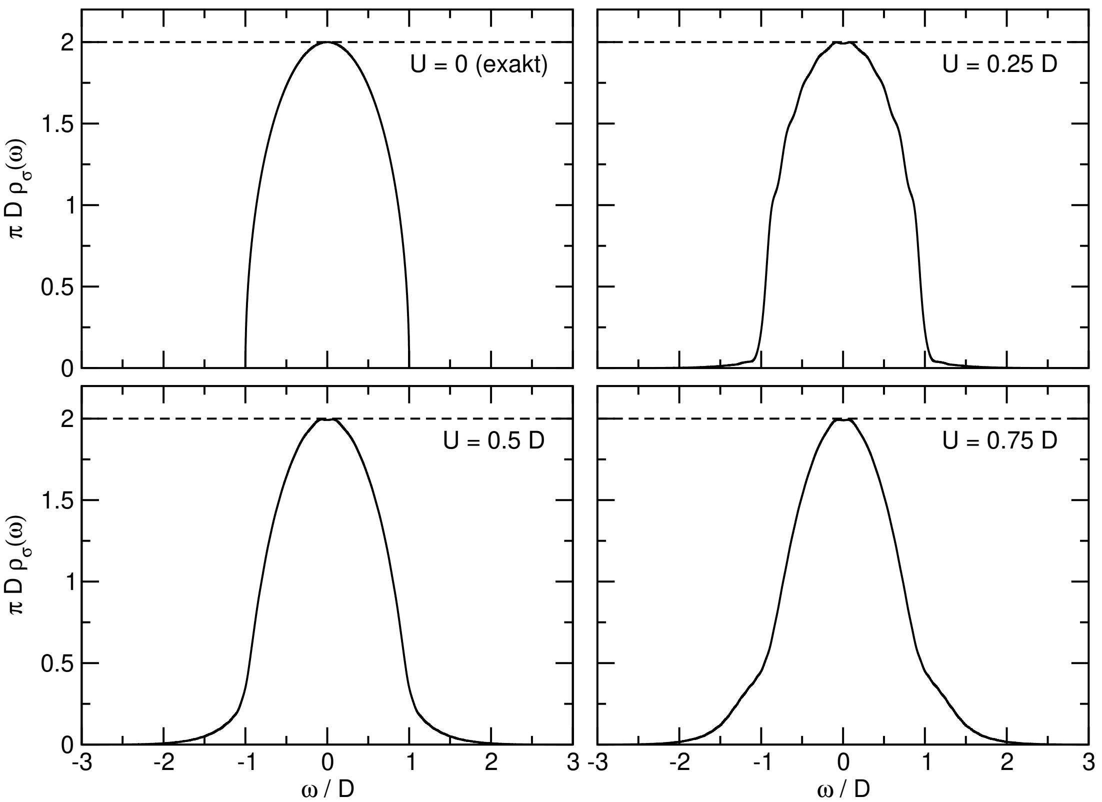

Abbildung 3.1: Lokale Spektraldichten des halbgefüllten Einband-Hubbard-Modells mit der semielliptischen Zustandsdichte für $Z \to \infty$ und $T = 0$ zu den Wechselwirkungsstärken $U/D = 0$, 0.25, 0.5, 0.75 berechnet mittels einer Spinkette der Länge 320 (Fermionenkette der Länge $L = 160$). Die gestrichelte Linie markiert den Wert der freien lokalen Spektraldichte an der Fermienergie ($\rho^0_\sigma(0) = 2/(\pi D)$) zur Verdeutlichung der Erfüllung des Pinning-Kriteriums.

In den Abbildungen 3.1, 3.2 und 3.3 sind die in dieser Arbeit selbstkonsistent bestimmten (lokalen) Spektraldichten des halbgefüllten Einband-Hubbard-Modells mit der semielliptischen Zustandsdichte für $Z \to \infty$ und $T = 0$ in der paramagnetischen metallischen Phase dargestellt. Im Fermigas-Limes ($U = 0$) ist die exakte Lösung der DMFT und damit die exakte Spektraldichte bekannt. In dem in dieser Arbeit untersuchten System ist es die freie semielliptische Bethe-Gitter-Zustandsdichte (1.51). Für Wechselwirkungsstärken unterhalb von $U = 0.75D$ bleibt die Spektraldichte strukturlos. Sie ähnelt überwiegend der freien Bethe-Gitter-Zustandsdichte (vgl. Abbildung 3.1). Mit steigender Wechselwirkungsstärke wird das Spektralgewicht zu den beiden Außenseiten der Spektraldichte verlagert. Es bildet sich zunehmend ein schmaler Quasiteilchen-Peak an der Fermienergie heraus. Bei diesem Peak handelt es sich um die aus der Sprache der Störstellen-Modelle bekannte Abrikosov-Suhl-Resonanz. Er trägt den Bruchteil $\mathcal{Z}$ des Gesamtspektralgewichts und ist in den Spektraldichten der paramagnetischen metallischen Phase für alle hier betrachteten

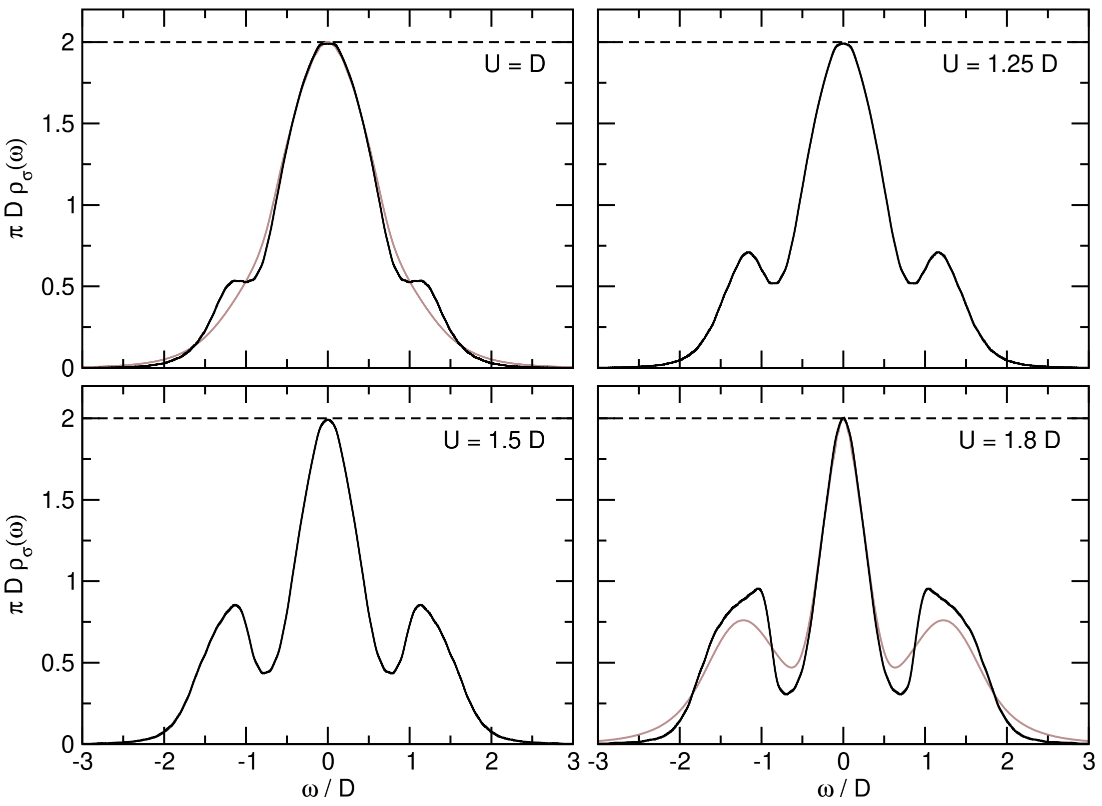

Abbildung 3.2: Lokale Spektraldichten des halbgefüllten Einband-Hubbard-Modells mit der semielliptischen Zustandsdichte für $Z \to \infty$ und $T = 0$ zu den Wechselwirkungsstärken $U/D = 1$, 1.25, 1.5, 1.8 berechnet mittels einer Spinkette der Länge 320 ($L = 160$). Die gestrichelte Linie markiert den Wert der freien lokalen Spektraldichte an der Fermienergie ($\rho^0_\sigma(0) = 2/(\pi D)$) zur Verdeutlichung der Erfüllung des Pinning-Kriteriums. Die graue Linie in den Abbildungen zu $U = D$ und $U = 1.8D$ stellt die Ergebnisse der auf NRG basierenden DMFT [57] dar.

Wechselwirkungsstärken nahezu auf den Wert der freien Zustandsdichte an der Fermienergie gepinnt ($\rho_\sigma(0) \approx \rho^0_\sigma(0) = 2/(\pi D)$), in sehr guter Übereinstimmung mit dem Luttinger-Theorem [54, 55] (vgl. Abschnitt 2.5.1). Die Werte der selbstkonsistent bestimmten Spektraldichten an der Fermienergie sowie deren relative Abweichungen vom Pinning-Wert sind in der Tabelle 3.1 zu verschiedenen Systemgrößen und Wechselwirkungsstärken zusammengefasst.

In den Spektraldichten oberhalb von $U = 0.75D$ treten zunehmend zwei weitere Strukturen beiderseits der Fermienergie hervor. Es sind die beiden im Abschnitt 1.1.3 diskutierten Hubbard-Bänder, deren endliche Breite die Folge des Nächstnachbarnhüpfens der Gitterelektronen ist. Das Bandzentrum des unteren und oberen Hubbard-Bandes liegt erwartungsgemäß in der Nähe von $\omega_{\mathrm{UHB}}/D = -U/2$ und $\omega_{\mathrm{OHB}}/D = U/2$. Mit steigender Wechselwirkungsstärke nimmt das Spektralgewicht dieser Bänder $(1 - \mathcal{Z})$ infolge einer Spektralgewichtverlagerung vom Quasiteilchen-

Peak in Richtung der höheren Energien zu (vgl. Abbildung 3.2). Für $U = 2D$ treten erstmals Unterstrukturen an den Innenseiten der beiden ansonsten strukturlosen Hubbard-Bänder hervor (vgl. Abbildung 3.3). Diese Unterstrukturen sind mit zunehmender Wechselwirkungsstärke immer stärker ausgeprägt. Des Weiteren lässt sich für $U \geq 2.4D$ eine mit steigendem U zunehmend schärfere Abgrenzung der beiden Hubbard-Bänder von dem immer schmaler werdenden Quasiteilchen-Peak beobachten (vgl. Abbildung 3.3). Diese Abgrenzung wurde bereits in den DMFT-Untersuchungen basierend auf der IPT [12] sowie der NRG [16] beobachtet und mit der Vorformung einer Lücke zwischen den beiden Hubbard-Bändern in Verbindung gebracht (mehr dazu im Abschnitt 3.3). Die mit steigendem U beobachtbare stetige Abnahme des Quasiteilchengewichts $\mathcal{Z}$ weist auf einen sich andeutenden Metall-Isolator-Übergang hin. Das Verhalten des Quasiteilchengewichts als Funktion der Wechselwirkungsstärke wird im Abschnitt 3.3.1 im Rahmen einer Untersuchung des Mott-Hubbard Metall-Isolator-Übergangs diskutiert. Auffällig ist, dass der Wert der Spektraldichte an der Fermienergie mit anwachsender Wechselwirkungsstärke zunehmend den Pinning-Wert ($\rho_\sigma^0(0) = 2/(\pi D)$) übersteigt (vgl. Tabelle 3.1). Die Abweichung vom Pinning-Wert lässt sich auf numerische Ungenauigkeiten in der Entfaltung von scharfen Strukturen zurückführen. Vermutlich können diese Ungenauigkeiten durch eine feinere Intervallrasterung und entsprechend kleinere Verbreiterung im Bereich des Quasiteilchen-Peaks verringert werden. Die geringe relative Abweichung der Spektraldichten an der Fermieenergie vom Pinning-Wert (für $L = 160$ und $U \leq 2.6D$ maximal nur 3%) spricht für eine sehr hohe Genauigkeit des in dieser Arbeit eingesetzten Störstellenlösers. Es sei an dieser Stelle betont, dass die Erfüllung des Pinning-Kriteriums essenziell für eine unvoreingenommene Bestimmung des Quasiteilchengewichts ist. Für einige numerische Methoden erweist sich das Pinning keinesfalls als selbstverständlich. Als Beispiel sei an dieser Stelle eine aktuelle DMFT-Untersuchung [58] basierend auf einer verwandten numerischen Methode, der Lanczos-DMRG, zu nennen.

Aus dem Vergleich der in dieser Arbeit berechneten Spektraldichten mit den NRG-Daten lässt sich eine sehr gute Übereinstimmung ausschließlich im Bereich des Quasiteilchen-Peaks beobachten. Diese Übereinstimmung ist ein Indiz dafür, dass die in dieser Arbeit verwendete dynamische DMRG eine quantitativ vergleichbare Genauigkeit und Auflösung im Bereich des Quasiteilchen-Peaks erzielt wie die aufgrund des geringeren rechnerischen Aufwandes für die Untersuchung von niederenergetischen Eigenschaften meist favorisierte NRG-Methode. Im hochenergetischen Bereich des Spektrums ist erwartungsgemäß keine quantitative Übereinstimmung zwischen den Ergebnissen der beiden numerischen Methoden zu verzeichnen. Mittels der NRG lassen sich die hochenergetischen Beiträge zum Spektrum, darunter die beiden Hubbard-Bänder, nur bedingt, d. h. mit einer hohen Verbreiterung [59] und damit nur ausgeschmiert bestimmen. Die dynamische DMRG hingegen gewährleistet eine hohe Auflösung auf der gesamten Energieskala und ermöglicht somit eine gegenüber der NRG genauere Bestimmung dieser hochenergetischen Beiträge. Ganz deutlich zeigt sich der Unterschied bei $U = D$. Während in der hier bestimmten Spektraldichte die beiden Hubbard-Bänder bereits ausgebildet sind, lassen sich diese in den

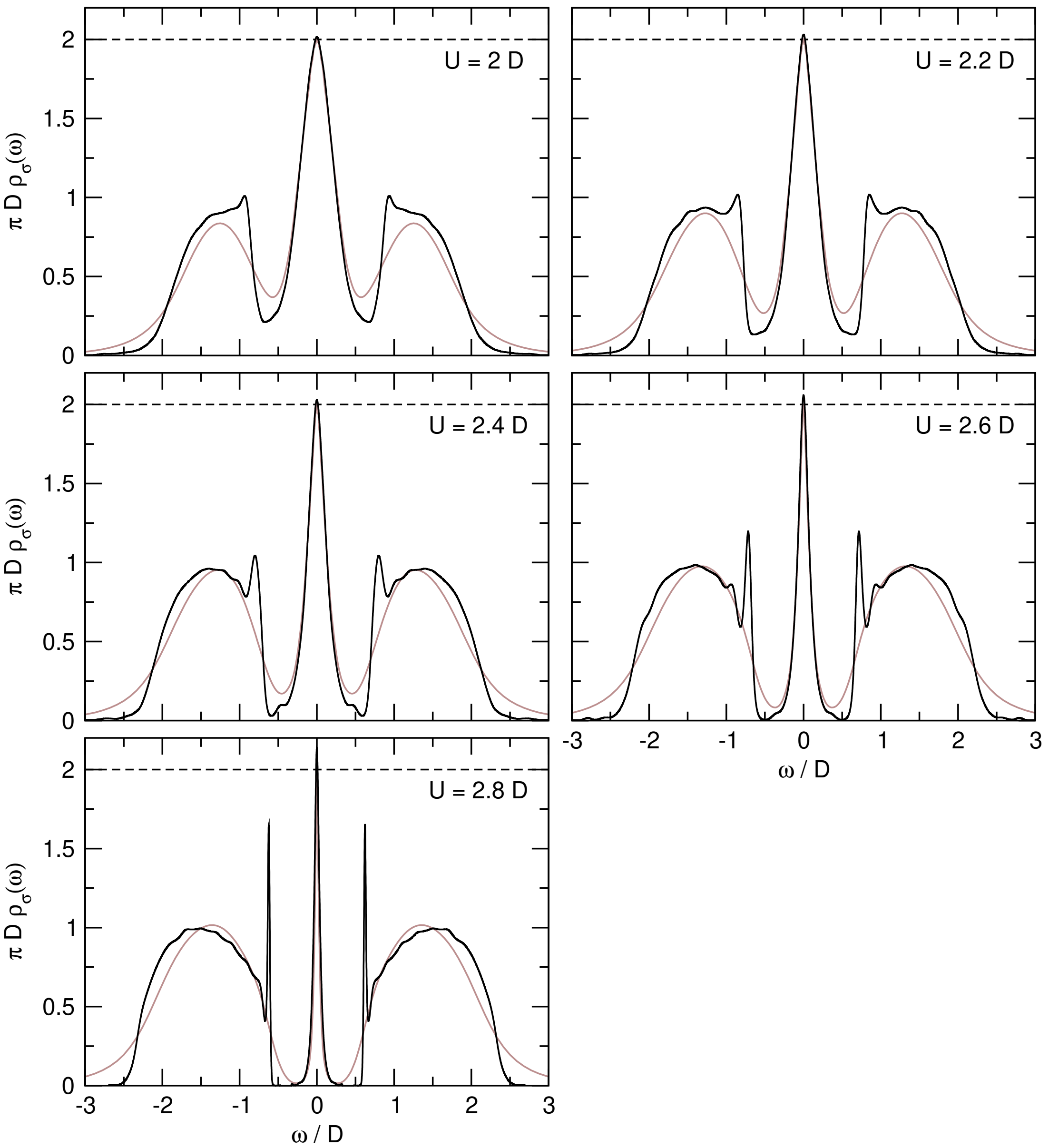

Abbildung 3.3: Lokale Spektraldichten des halbgefüllten Einband-Hubbard-Modells mit der semielliptischen Zustandsdichte für $Z \to \infty$ und $T = 0$ zu den Wechselwirkungsstärken $U/D = 2$, 2.2, 2.4, 2.6, 2.8 berechnet mittels einer Spinkette der Länge 320 ($L = 160$). Die gestrichelte Linie markiert den Wert der freien lokalen Spektraldichte an der Fermienergie ($\rho_\sigma^0(0) = 2/(\pi D)$) zur Verdeutlichung der Erfüllung des Pinning-Kriteriums. Die graue Linie stellt die Ergebnisse der auf NRG basierenden DMFT [57] dar.

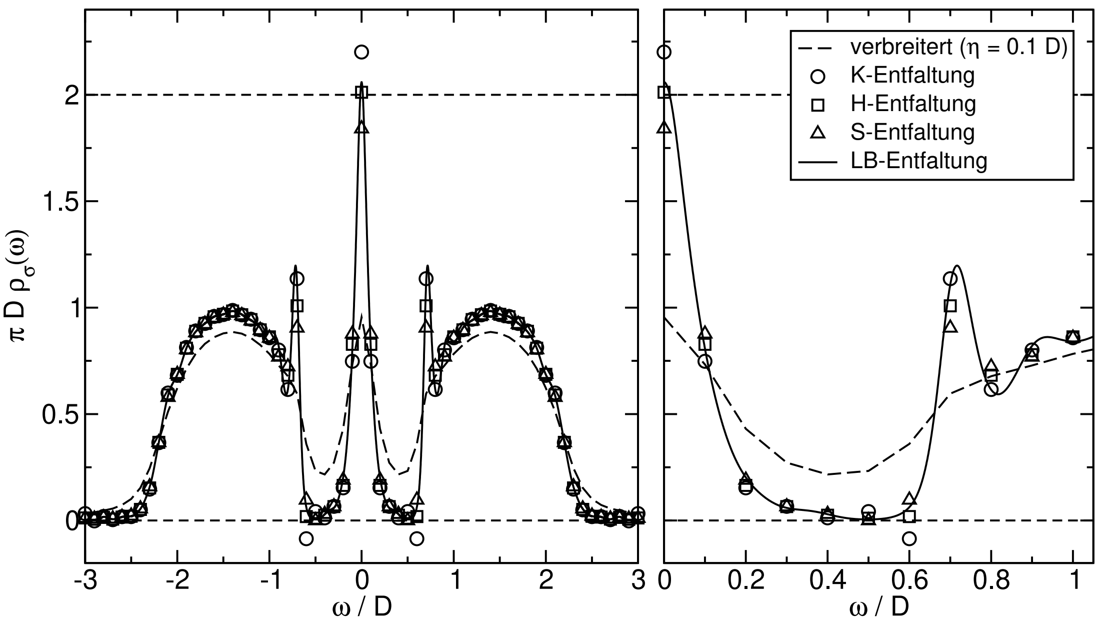

Abbildung 3.4: Lokale verbreitete Spektraldichte zu der Wechselwirkungsstärke $U = 2.6D$ entfaltet mittels verschiedener (linearer) Entfaltungsmethoden, darunter der kontinuierlichen Entfaltung (K), der Histogramm-Entfaltung (H) und der „Spikes“-Entfaltung (S) [24], im Vergleich zu der hier favorisierten nichtlinearen Least-Bias-Entfaltung (LB).

NRG-Daten nicht erkennen. Ähnliche Unterschiede wurden in der Referenz [48] beim Vergleich der NRG-Daten mit den störungstheoretisch (bis zur vierten Ordnung in U) bestimmten Spektraldichten bei $U = 0.8D$ festgestellt. Ansonsten lässt sich für höhere Wechselwirkungsstärken der hochenergetische Bereich des Spektrums in den NRG-Daten qualitativ richtig erfassen.

Bei einer Untersuchung der Unterstrukturen an den Innenseiten der beiden Hubbard-Bänder konnte sichergestellt werden, dass diese nicht als Entfaltungsartefakte der in dieser Arbeit verwendeten Least-Bias-Entfaltung zu deuten sind. Diese Schlussfolgerung resultiert aus einer Gegenüberstellung mehrerer mittels verschiedener linearer Entfaltungsmethoden entfalteten Spektraldichten, wie sie in der Abbildung 3.4 zu sehen ist. Man kann deutlich erkennen, dass alle zum Vergleich herangezogenen Entfaltungsmethoden identische Unterstrukturen in der Spektraldichte aufweisen. Insbesondere deuten sich diese Unterstrukturen bereits in einem deutlich erkennbaren „Knick“ in der verbreiterten Spektraldichte an. Die Unterstrukturen an den Innenseiten der beiden Hubbard-Bänder werden daher als ein tatsächlicher Beitrag zum Einteilchen-Anregungsspektrum interpretiert. Eine höhere Auflösung im Bereich dieser Unterstrukturen ($\eta = \Delta\omega = 0.05D$) liefert im Rahmen der numerischen Genauigkeit ein nahezu identisches Ergebnis. Die Unterstrukturen scheinen somit mit der hier gewählten Intervallrasterung und der entsprechend gewählten Verbreiterung hinreichend aufgelöst worden zu sein.

Einen besonderen Einblick in die Lage und Ausprägung dieser Unterstrukturen

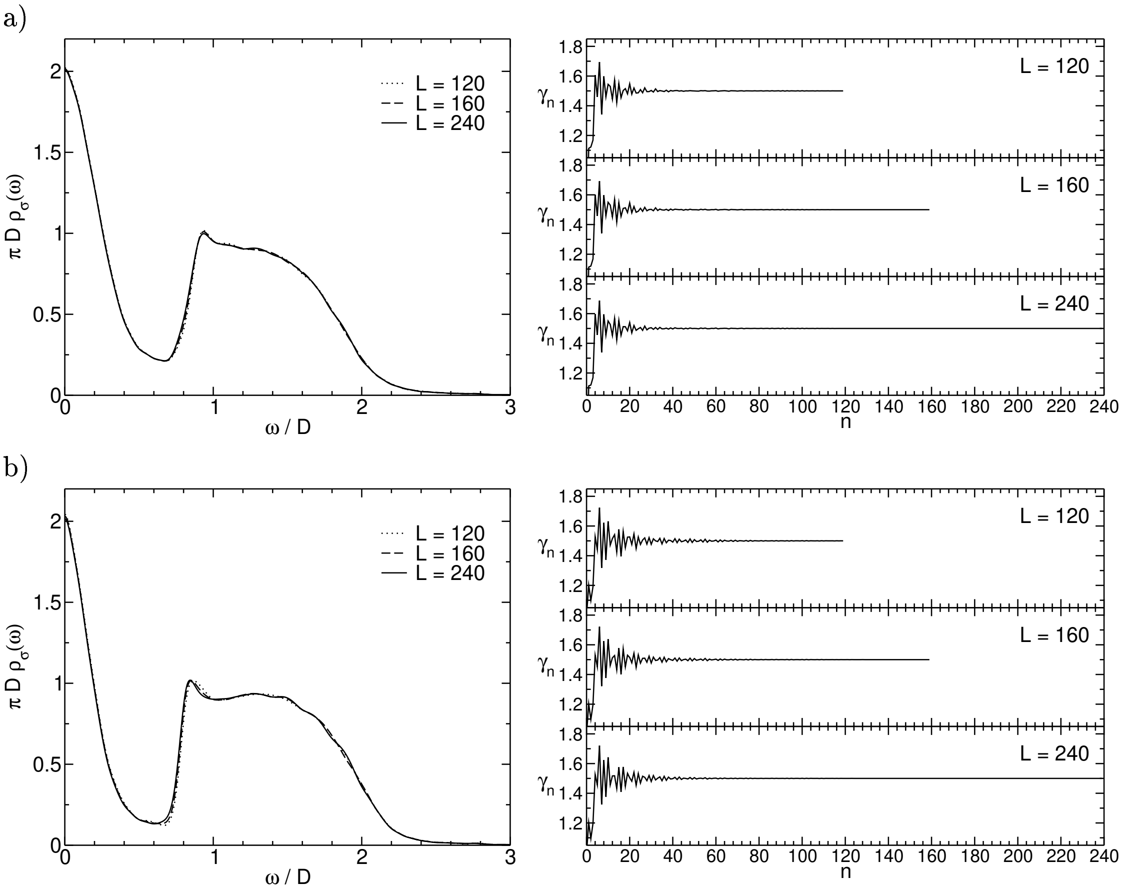

Abbildung 3.5: Links: Ausschnitt der lokalen Spektraldichten des halbgefüllten Einband-Hubbard-Modells mit der semielliptischen Zustandsdichte für $Z \to \infty$ und $T = 0$ berechnet zu verschiedenen Spinketten der Länge 240, 360 und 480 ($L = 120$, $L = 160$ und $L = 240$) und den Wechselwirkungsstärken **a)** $U = 2D$, **b)** $U = 2.2D$. **Rechts:** Die zugehörigen Modellparameter γ_n des effektiven Einstörstellen-Anderson-Modells, die das Bad mit dem die Störstelle gekoppelt ist, beschreiben.

liefert ein Vergleich der zu verschiedenen Systemgrößen selbstkonsistent bestimmten Spektraldichten. In den Abbildungen 3.5 und 3.6 sind diese zu verschiedenen Systemgrößen und Wechselwirkungsstärken zusammen mit den zu ihrer Berechnung verwendeten Modellparametern γ_n, die das effektive Bad in (2.7) bzw. (2.10) parametrisieren, dargestellt. Die Hybridisierung der Störstelle mit dem effektiven Bad ist hierbei aufgrund der Normierung der Spektraldichte stets auf $V = 0.5D$ festgesetzt. Für $U = 2D$, $U = 2.2D$ sowie für alle in dieser Arbeit betrachteten Wechselwirkungsstärken unterhalb von $U = 2D$ stellt man im Rahmen der numerischen Genauigkeit eine Übereinstimmung der zu verschiedenen Systemgrößen selbstkonsistent bestimmten Spektraldichten fest (vgl. Abbildung 3.5). Das Gleiche gilt qualitativ für die zu ihrer Berechnung verwendeten Modellparameter γ_n innerhalb eines gemeinsamen Teilbereichs ($n \leq 117$). Für $U = 2D$ und $U = 2.2D$ beispielsweise, nehmen

U/D	$L = 120$		$L = 160$		$L = 240$	
	$\pi D\rho_\sigma(0)$	Abw. [%]	$\pi D\rho_\sigma(0)$	Abw. [%]	$\pi D\rho_\sigma(0)$	Abw. [%]
0.25	1.988	-0.6	1.991	-0.5		
0.5	1.984	-0.8	1.992	-0.4		
0.75	1.991	-0.5	1.990	-0.5		
1	1.989	-0.6	1.989	-0.6	1.988	-0.6
1.25	1.991	-0.5	1.991	-0.5		
1.5	1.996	-0.2	1.992	-0.4		
1.8	2.004	$+0.2$	2.003	$+0.2$		
2	2.022	$+1.1$	2.015	$+0.8$	2.008	$+0.4$
2.2	2.042	$+2.1$	2.031	$+1.6$	2.015	$+0.8$
2.4	2.052	$+2.6$	2.029	$+1.5$	2.009	$+0.5$
2.6	2.082	$+4.1$	2.059	$+3.0$	2.049	$+2.5$
2.8	2.093	$+4.7$	2.138	$+6.9$		

Tabelle 3.1: Werte der Spektraldichten an der Fermienergie und deren relative Abweichungen vom Pinning-Wert zu verschiedenen Systemgrößen und Wechselwirkungsstärken.

unabhängig von der Wahl der Systemgröße alle Modellparameter γ_n oberhalb von $n \approx 80$ einen nahezu identischen asymptotischen Wert an. Daraus lässt sich folgern, dass die wesentlichen Strukturen der Spektraldichten für $U \leq 2.2D$ bereits durch ein System mit $L \approx 83$ Gitterplätzen hinreichend erfasst werden können. Da man für die Bestimmung der Spektraldichten ohnehin eine Verbreiterung zur Simulation eines kontinuierlichen Spektrums verwendet, brauchen daher Systeme mit $L > 120$ für die selbstkonsistente Bestimmung der Spektraldichten zu $U \leq 2.2D$ nicht zwingendermaßen herangezogen werden. Auffällig ist jedoch, dass die selbstkonsistent bestimmten Spektraldichten mit steigender Systemgröße das Pinning-Kriterium besser erfüllen (vgl. Tabelle 3.1). Der Grund hierfür liegt in der Kontinuumsbeschreibung, die mit zunehmender Systemgröße (und somit zunehmender Anzahl der Polstellen der retardierten Greenfunktion) besser realisiert wird. Eine bessere Kontinuumsbeschreibung kommt wiederum der Least-Bias-Entfaltung zugute. Es muss jedoch beachtet werden, dass mit der Größe eines Systems auch die Dimension seines Hilbertraums wächst. Dies hat zur Folge, dass bei festgehaltener Anzahl der für die Renormierung zu behaltenen DMRG-Basiszustände (hier $m = 128$) der Trunkierungsfehler und damit auch der Fehler bei der Berechnung der verbreiterten retardierten Greenfunktion mit der Systemgröße steigt.

Für Wechselwirkungsstärken oberhalb von $U = 2.2D$ stimmen die zu den unterschiedlichen Systemgrößen selbstkonsistent bestimmten Spektraldichten in der Umgebung der inneren Bandkanten der beiden Hubbard-Bänder quantitativ nicht mehr überein (vgl. Abbildung 3.6). Man beobachtet, dass das Spektralgewicht an den Innenseiten der beiden Hubbard-Bänder mit zunehmender Systemgröße zu den niedrigen Energien hin verlagert wird, ohne dass die scharfe Abgrenzung zwischen den

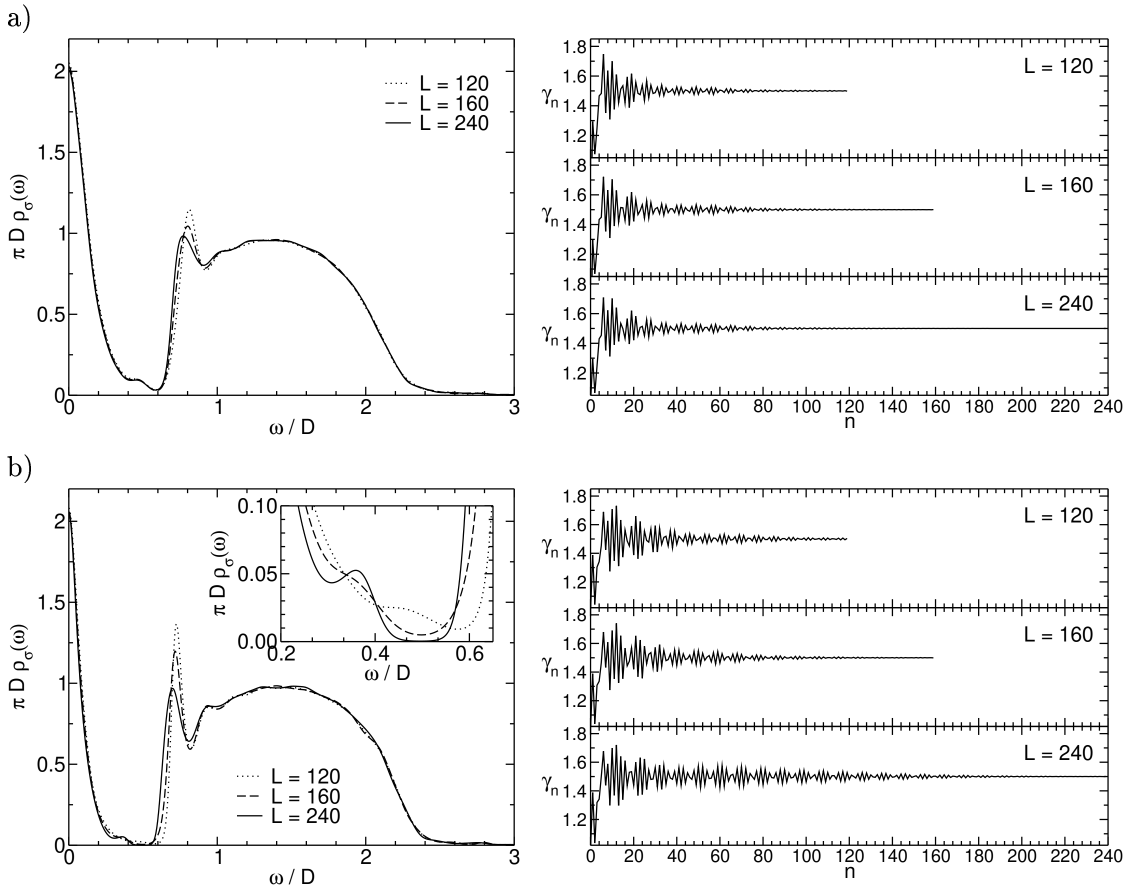

Abbildung 3.6: Links: Ausschnitt der lokalen Spektraldichten des halbgefüllten Einband-Hubbard-Modells mit der semielliptischen Zustandsdichte für $Z \to \infty$ und $T = 0$ berechnet zu verschiedenen Spinketten der Länge 240, 360 und 480 ($L = 120$, $L = 160$ und $L = 240$) und den Wechselwirkungsstärken **a)** $U = 2.4D$, **b)** $U = 2.6D$. **Rechts:** Die zugehörigen Modellparameter γ_n des effektiven Einstörstellen-Anderson-Modells, die das Bad mit dem die Störstelle gekoppelt ist, beschreiben.

Hubbard-Bändern und dem Quasiteilchen-Peak beeinträchtigt wird. Diese Verlagerung lässt sich für große U-Werte am deutlichsten beobachten. Mit der Spektralgewichtverlagerung nimmt gleichzeitig die Ausprägung der Unterstrukturen an den Innenseiten der beiden Hubbard-Bänder ab. Des Weiteren lässt sich eine geringe Abnahme der Quasiteilchen-Peak-Breite erkennen. Bei $U = 2.6D$ lässt sich zudem eine mit der Systemgröße immer stärker ausgeprägte Pseudo-Lücke zwischen dem Quasiteilchen-Peak und den steil abfallenden Innenseiten der beiden Hubbard-Bänder beobachten (vgl. Inset der Abbildung 3.6b).

Die Ausbildung einer Pseudo-Lücke zwischen den beiden Hubbard-Bändern und dem Quasiteilchen-Peak erweist sich für den in dieser Arbeit realisierten Selbstkonsistenzzyklus, insbesondere für die dort eingesetzte Kettenbruchentwicklung als problematisch. Innerhalb der Pseudo-Lücke besitzt der Realteil der Greenfunktion eine

Nullstelle. Der mit der Spektraldichte verknüpfte Imaginärteil besitzt an dieser Stelle ohnehin einen nahezu verschwindenden Wert. Dies hat zur Folge, dass die im Abschnitt 2.3.1 dargestellte rekursive Bestimmung der Kettenbruchentwicklung instabil wird (infolge des Beitrags $1/G_\sigma(\omega)$ in der Rekursionsbeziehung) und damit der iterative Selbstkonsistenzzyklus mit der Kettenbruchentwicklung zusammenbricht. Mit Korrekturen ähnlich wie bei der Spektraldichte mit Lücke (vgl. Abschnitt 2.4.1) lässt sich diese Instabilität nicht beheben, vor allem weil die Lage dieser Nullstelle nicht exakt bekannt ist, sondern numerisch ermittelt werden muss. Außerdem verschwindet die Greenfunktion an dieser Stelle nicht vollständig, sondern besitzt einen zwar sehr geringen jedoch endlichen imaginären Beitrag.

Um trotz dieser Pseudo-Lücke zu einer selbstkonsistenten Lösung zu gelangen, wird in dieser Arbeit ein anderer Weg eingeschlagen. Jedesmal wenn eine zur Instabilität der Kettenbruchentwicklung führende Pseudo-Lücke in der Spektraldichte auftaucht, wird der Imaginärteil der unverbreiterten Greenfunktion innerhalb der Pseudo-Lücke auf einen konstanten geringfügig abweichenden Wert gesetzt ($\mathrm{Im}\, G_\sigma(\omega) = -10^{-5}$), bei dem die Kettenbruchentwicklung noch stabil ist. Anschließend wird wie sonst der Realteil rekonstruiert und mittels der Kettenbruchentwicklung die Modellparameter für die nächste Iteration des Selbstkonsistenzzyklus bestimmt. Diese Vorgehensweise stellt zwar eindeutig einen Eingriff in den iterativen Selbstkonsistenzzyklus dar, man verlässt sich jedoch darauf, dass dieser winzige Eingriff in jeder Iteration korrigiert, und die Spektraldichte trotzdem mit jeder Iteration bis zur Selbstkonsistenz verbessert werden kann. Mit dieser Vorgehensweise ist es für $U = 2.8D$ gelungen, eine selbstkonsistente Spektraldichte zu bestimmen. Die Ergebnisse für $U = 2.8D$ dürfen jedoch nicht völlig unvoreingenommen betrachtet werden.

Das steile Abfallverhalten, die Ausbildung einer Pseudo-Lücke sowie eine Ansammlung des Spektralgewichts an den Innenseiten der Hubbard-Bänder suggeriert, dass das Spektralgewicht aus dem Bereich zwischen den Hubbard-Bändern und dem Quasiteilchen-Peak nach Außen hin (d. h. zu den höheren Energien hin) herausgedrängt wird. Dieses Verhalten bestätigt die bereits in der IPT- [12] und NRG-Untersuchung [16] sich andeutende Vorformung einer Lücke zwischen den beiden Hubbard-Bändern.

Die Abweichung der zu verschiedenen Systemgrößen selbstkonsistent bestimmten Spektraldichten lässt sich anhand der zu ihrer Berechnung verwendeten Modellparameter erklären. Für $U = 2.6D$ stimmen die Modellparameter zu den unterschiedlichen Systemgrößen nicht mehr wie im Falle $U \leq 2.2D$ innerhalb eines gemeinsamen Teilbereichs qualitativ überein. Des Weiteren weisen die Modellparameter mit zunehmendem n nur eine langsame Konvergenz auf. Anders als für $U \leq 2.2D$ existiert zu den verschiedenen Systemgrößen kein gemeinsamer Wert n, oberhalb dessen die Modellparameter zu den verschiedenen Systemgrößen einen asymptotischen Wert erreichen. Daraus lässt sich die Schlussfolgerung ziehen, dass für eine genaue Bestimmung der komplizierten Unterstrukturen an den Innenseiten der beiden Hubbard-Bänder und in deren Umgebung für Wechselwirkungsstärken oberhalb von $U = 2.2D$ noch größere Systeme als die in dieser Arbeit verwendeten herangezogen werden müssen. Die in dieser Arbeit verwendeten Systemgrößen reichen zwar aus, um die Unterstruk-

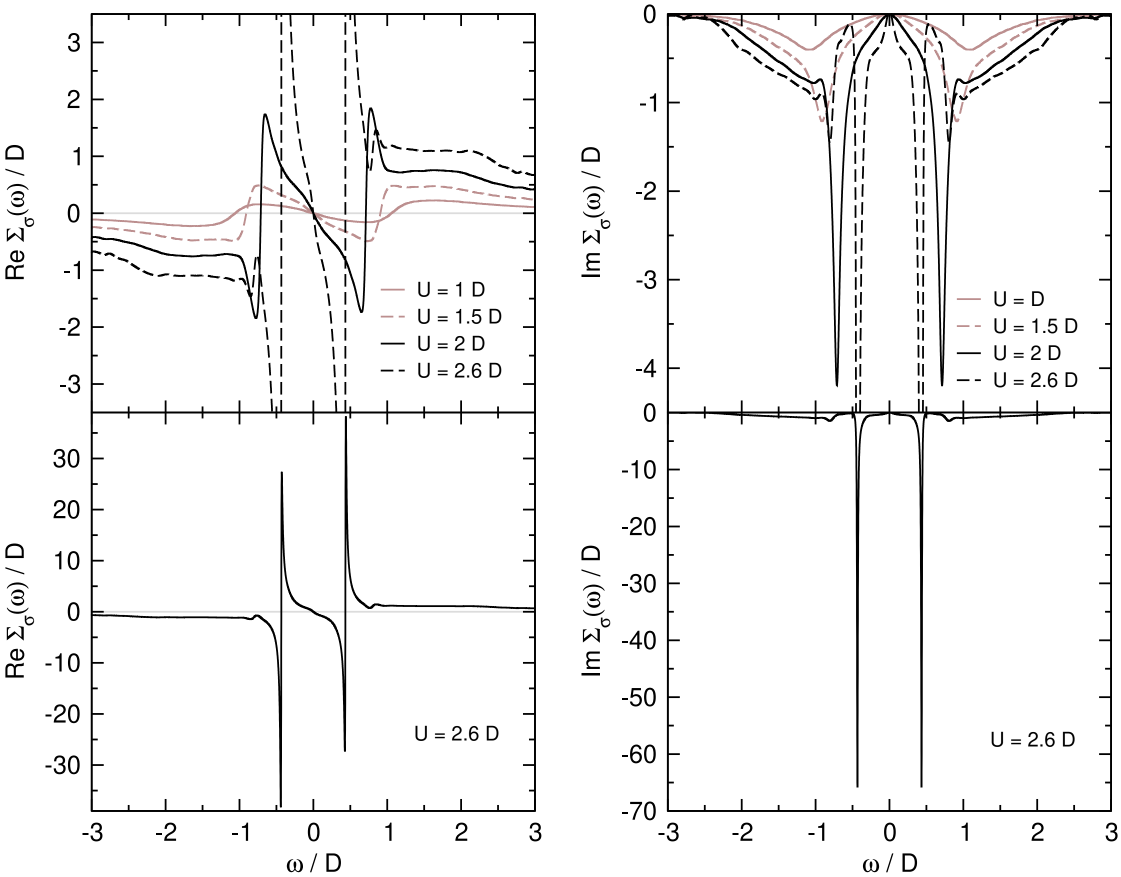

Abbildung 3.7: Real- und Imaginärteil der lokalen Selbstenergie des halbgefüllten Einband-Hubbard-Modells mit der semielliptischen Zustandsdichte für $Z \to \infty$ und $T = 0$ in der paramagnetischen metallischen Phase zu den Wechselwirkungsstärken $U/D = 1, 1.5, 2, 2.6$. Die lokale Selbstenergie wird aus der selbstkonsistent bestimmten Greenfunktion ($L = 160$) und der zu ihrer Berechnung verwendeten Hybridisierungsfunktion berechnet.

turen qualitativ zu bestimmen und dadurch deren Existenz für alle Wechselwirkungsstärken zu bestätigen. Eine genaue quantitative Bestimmung dieser Unterstrukturen kann hier jedoch ausschließlich für Wechselwirkungsstärken unterhalb von $U = 2.2D$ erfolgen. An dieser Stelle sei betont, dass die in dieser Arbeit aufgelösten Unterstrukturen an den beiden Hubbard-Bändern keine Gemeinsamkeit mit den Strukturen in den mittels der Lanczos-DMRG berechneten Spektraldichten [58] besitzen. Die in der mittels Lanczos-DMRG realisierten DMFT auftretenden Strukturen in der Referenz [58] ziehen sich über die gesamte Spektraldichte hindurch. Die in dieser Arbeit aufgelösten Unterstrukturen hingegen treten ausschließlich auf den Innenseiten der beiden Hubbard-Bänder auf. Die Existenz dieser Unterstrukturen lässt sich anders als in der Referenz [58] nicht auf eine nur approximative Kontinuumsbeschreibung zurückführen.

Schulterförmige Hubbard-Bänder wurden bereits in der DMFT-Untersuchung basierend auf der NRG [16, 59] für $U \approx 2.85D$ beobachtet. Sie konnten jedoch in den hochenergetischen Bereich des Spektrums nur unzureichend aufgelöst werden. An dieser Stelle zeigt sich insbesondere der Vorteil der in dieser Arbeit eingesetzten dynamischen DMRG gegenüber der NRG. Im Gegensatz zu der NRG ist man mittels der dynamischen DMRG in der Lage, eine hohe Auflösung auf der gesamten Energieskala zu erzielen und somit die genaue Form der beiden Hubbard-Bänder einschließlich ihrer Unterstrukturen bestimmen zu können. Diese Auflösung ist allerdings mit einem deutlich höheren rechnerischen Aufwand verbunden.

Aus der selbstkonsistent bestimmten retardierten Greenfunktion und der zu ihrer Berechnung verwendeten Hybridisierungsfunktion lässt sich mittels (1.71), (1.70) und (1.68) die lokale Selbstenergie des Einband-Hubbard-Modells

$$\Sigma_\sigma(\omega) = \omega - \Gamma(\omega) - \frac{1}{G_\sigma(\omega)} \tag{3.2}$$

bestimmen. In der Abbildung 3.7 sind die mittels (3.2) berechneten Selbstenergien in der metallischen Phase zu den Wechselwirkungsstärken $U/D = 1, 1.5, 2, 2.6$ dargestellt. Der Real- und Imaginärteil dieser Selbstenergien weist erwartungsgemäß ein für eine lokale Fermiflüssigkeit typisches Verhalten in der Umgebung der Fermienergie auf (vgl. Abschnitt 2.5.1). Der Realteil von $\Sigma_\sigma(\omega)$ verläuft in der Nähe der Fermienergie linear mit einer negativen Steigung, die mit steigender Wechselwirkungsstärke steiler wird. Der Imaginärteil von $\Sigma_\sigma(\omega)$ weist in dieser Umgebung ein in ω quadratisches Verhalten auf: $\Sigma_\sigma(\omega) \propto -\omega^2$. Die bereits im Pinning-Kriterium sich äußernde Übereinstimmung mit dem Luttinger-Theorem kann somit gleichermaßen anhand der Selbstenergie verifiziert werden. Die Zwei-Peak-Struktur im Imaginärteil von $\Sigma_\sigma(\omega)$ ist mit der Drei-Peak-Struktur der Spektraldichte (zwei Hubbard-Bänder und ein Quasiteilchen-Peak) eng verknüpft. Nach (3.2) bildet die Selbstenergie an denjenigen Stellen Peak-Strukturen aus, an denen sowohl der Realteil als auch der Imaginärteil der Greenfunktion kleine Werte annehmen. Dies ist hier in den Bereichen zwischen den Hubbard-Bändern und dem Quasiteilchen-Peak der Fall.

3.2 Spektraldichten der paramagnetischen isolierenden Phase

Die Berechnung aller selbstkonsistenten Lösungen in der paramagnetischen isolierenden Phase erfolgt unter Verwendung einer Initialisierungs-Hybridisierungsfunktion zu einer Spektraldichte bestehend aus zwei um $\omega/D = -U/2$ und $\omega/D = U/2$ zentrierten Semiellipsen mit der Höhe $1/(\pi D)$ und der Breite $2D$ (vgl. Abbildung 3.8). Ähnlich wie bei Lösungen in der paramagnetischen metallischen Phase zu kleinen Wechselwirkungsstärken ($U \leq 2.2D$) genügt es hierbei, kleine Systeme mit $L = 121$ (d. h. Spinketten mit 242 Spins) heranzuziehen. Größere Systeme ($L = 161$) weisen im Rahmen der numerischen Genauigkeit identische selbstkonsistene Lösungen auf. Der Grund hierfür ist offenbar die geringere Komplexität der Spektraldichten in der isolierenden Phase gegenüber den Spektraldichten in der metallischen Phase infolge

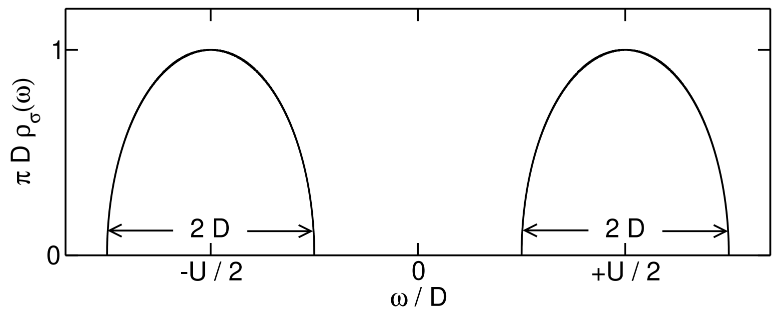

Abbildung 3.8: Spektraldichte bestehend aus zwei um $\omega/D = -U/2$ und $\omega/D = U/2$ zentrierten Semiellipsen mit der Breite $2D$ und der Höhe $1/(\pi D)$. Die Hybridisierungsfunktion zu dieser Spektraldichte wird als Initialisierungsfunktion $\Gamma_{\mathrm{S}}(\omega)$ zur Bestimmung der isolierenden Lösungen mittels des iterativen Selbstkonsistenzzyklus verwendet.

einer Unterdrückung von Ladungsfluktuationen durch die Anwesenheit einer großen Energielücke. Dadurch ist man in der Lage, die wesentlichen Strukturen der Spektraldichten bereits mittels kleinerer Systeme erfassen zu können. Die verbreiterten Spektraldichten werden überwiegend auf einem äquidistant gerasterten Intervall I mit einem Stützstellenabstand $\Delta\omega = 0.1D$ berechnet. Entsprechend wird für diese Stützstellen die Verbreiterung $\eta = 0.1D$ gewählt. Für Wechselwirkungsstärken $U \leq 3.6D$ wird in der Umgebung der inneren und äußeren Bandkanten der beiden Hubbard-Bänder eine feinere Rasterung eingesetzt ($\Delta\omega = \eta = 0.05D$, bei $U = 2.4$ sogar $\Delta\omega = \eta = 0.01D$ in der Umgebung der inneren Bandkanten). Dadurch können diese Bandkanten für eine Untersuchung des Abfallverhaltens, für die Untersuchung eventuell auftretender Unterstrukturen [56] sowie zur Bestimmung der Einteilchen-Anregungslücke im thermodynamischen Limes besser aufgelöst werden. Die Wahl der Intervallgrenze B in der isolierenden Phase orientiert sich an der Lage der *äußeren* Bandkanten der beiden Hubbard-Bänder. Diese lässt sich bereits nach wenigen Iterationen des Selbstkonsistenzzyklus abschätzen. Analog zu den selbstkonsistenten metallischen Lösungen wird die Eindeutigkeit einiger selbstkonsistenter isolierender Lösungen anhand verschiedener Initialisierungsfunktionen überprüft.

Die geringere Komplexität der Spektraldichten in der isolierenden Phase, die sich bereits nach einigen wenigen Iterationen andeutet, erlaubt es, gegenüber den metallischen Lösungen strengere Selbstkonsistenzkriterien zu formulieren, die zusätzlich die Stabilität der Einteilchen-Anregungslücke des endlichen Systems mit einbeziehen. Eine isolierende Lösung wird daher als selbstkonsistent aufgefasst, falls *mindestens* die folgenden drei Selbstkonsistenzkriterien erfüllt sind:

1. Die unverbreiterten Spektraldichten zweier aufeinander folgenden Selbstkonsistenzzyklus-Iterationen erfüllen für alle $\widetilde{\omega}_j$ $(j = 1, \ldots, N_{\mathrm{s}})$

$$|\Delta\rho_\sigma(\widetilde{\omega}_j)| = |\rho_\sigma^{(i)}(\widetilde{\omega}_j) - \rho_\sigma^{(i-1)}(\widetilde{\omega}_j)| < \varepsilon_{\mathrm{iso}} \quad \text{mit} \quad \varepsilon_{\mathrm{iso}} = 10^{-3}D\ . \tag{3.3}$$

2. Die mittlere Doppelbesetzung und die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz

sind für zwei aufeinander folgende Iterationen stabil, d. h. die relativen Abweichungen jeder dieser Größen zwischen zwei aufeinander folgenden Iterationen beträgt maximal 0.01%.

3. Die relative Abweichung der Einteilchen-Anregungslücken des *endlichen* Systems zwischen zwei aufeinander folgenden Selbstkonsistenz-Iterationen beträgt maximal 1%.

Ähnlich wie bei den metallischen Lösungen stellen auch hier die Selbstkonsistenzkriterien eine Minimalanforderung an die isolierenden Lösungen dar. Zum Erreichen der Selbstkonsistenz werden in der isolierenden Phase je nach Wahl der Initialisierungsfunktion zwischen 12 und 18 Iterationen benötigt. Die Wahl der Wechselwirkungsstärke spielt hierbei eine untergeordnete Rolle.

In den Abbildungen 3.9 und 3.10 sind die in dieser Arbeit selbstkonsistent bestimmten Spektraldichten des halbgefüllten Einband-Hubbard-Modells mit der semielliptischen Zustandsdichte für $Z \to \infty$ und $T = 0$ in der paramagnetischen isolierenden Phase dargestellt. Sie bestehen aus den beiden, im Gegensatz zu den Ergebnissen in der Referenz [58], strukturlosen Hubbard-Bändern der Breite $W^* \approx 2D$, deren Bandzentren beiderseits der Fermienergie bei $\omega/D \approx \pm U/2$ liegen. Die kleinen Buckel an den Außenseiten der beiden Hubbard-Bänder, die verstärkt in den Spektraldichten zu $U = 3D$ und $U = 3.2D$ auftreten, sind als Entfaltungsartefakte zu deuten. Die beiden Hubbard-Bänder sind durch die Einteilchen-Anregungslücke getrennt. Diese nimmt mit der Wechselwirkungsstärke U erwartungsgemäß ab. Im Gegensatz zu den auf FE-DMFT[1](DDMRG[2]) [56] basierenden Untersuchungen treten in der Nähe des Übergangs $U \approx 2.4D$ von der isolierenden in die metallische Phase bei vergleichbarer Auflösung keine Schulterstrukturen an den Innenseiten der beiden Hubbard-Bänder auf. Es wird vermutet, dass die Schulterstrukturen in den Spektraldichten der in [56] realisierten Methode die Folge eines nicht optimalen Umgangs mit den Informationen über die für endliche Systeme berechnete Einteilchen-Anregungslücke sind.

Die mittels der klassischen DMRG berechnete Einteilchen-Anregungslücke wird in der vorliegenden Arbeit ausschließlich zur Beseitigung von Entfaltungsartefakten verwendet, wobei der Korrekturparameter δ_L großzügig gewählt wird (vgl. Abbschnitt 2.5.2). Bei der FE-DMFT [48, 56, 60] hingegen wird die zu verschiedenen Systemgrößen bestimmte Einteilchen-Anregungslücke zu einem Wert im thermodynamischen Limes ($L \to \infty$) extrapoliert, der zur Justierung der inneren Bandkanten der beiden

[1]FE-DMFT steht hier für „fixed-energy"-DMFT. In dieser Methode wird die Lage der inneren Bandkanten und die Breite der Hubbard-Bänder selbstkonsistent justiert. Die Energien der Bad-Niveaus werden während einer selbstkonsistenten Berechnung der Hybridisierungsstärken relativ zu den beiden Bandkanten der beiden Hubbard-Bänder festgehalten [48, 60]. Bei dem Einstörstellen-Modell, welches der Untersuchung mittels dieser Methode zugrunde liegt, handelt es sich ebenfalls um das Einstörstellen-Anderson-Modell, jedoch in der „Stern-Geometrie".

[2]Bei dieser Variante der dynamischen Dichtematrix-Renormierung handelt es sich um eine Umformulierierung der Korrekturvektor-Methode zu einem Variationsproblem [61]. Die Genauigkeit dieser Variations-Methode ist vergleichbar mit der hier eingesetzen Korrekturvektor-Methode [62].

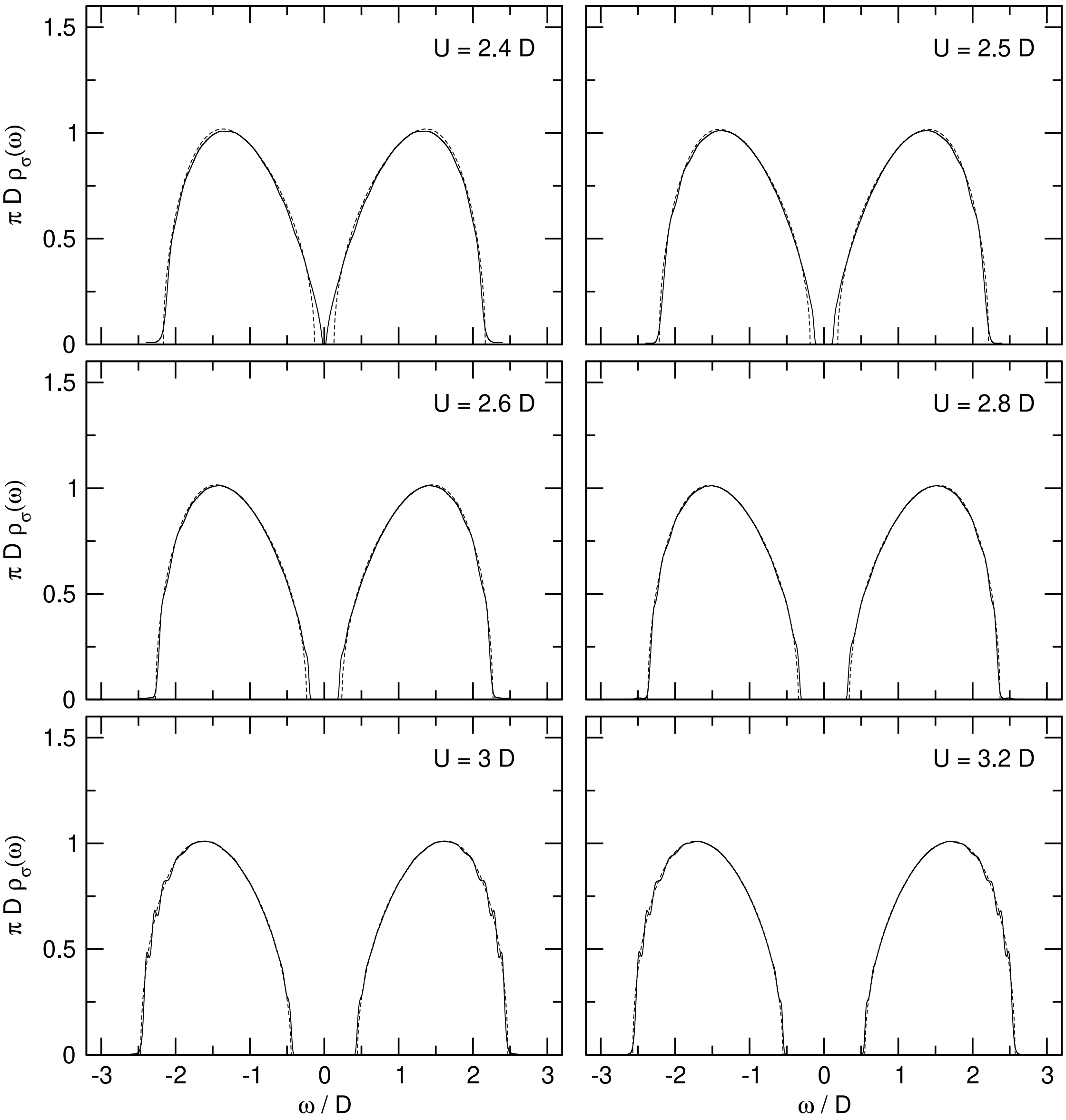

Abbildung 3.9: Lokale Spektraldichten des halbgefüllten Einband-Hubbard-Modells mit der semielliptischen Zustandsdichte für $Z \to \infty$ und $T = 0$ in der paramagnetischen isolierenden Phase zu den Wechselwirkungsstärken $U/D = 2.4$, 2.5, 2.6, 2.8, 3.0, 3.2 berechnet mittels einer Spinkette der Länge 242 ($L = 121$). Die gestrichelte Linie stellt die Ergebnisse der Störungstheorie [60] bis zur zweiten Ordnung in $1/U$ dar.

Hubbard-Bänder verwendet wird. Ein eventueller Fehler in der Extrapolation hat zur Folge, dass die Lücke im Spektrum schlimmstenfalls zu groß bestimmt wird. In diesem Fall wird ein tatsächlicher Beitrag der Spektraldichte in der nächsten DMFT-Iteration eventuell nicht erfasst. Diese Vermutung basiert auf den in der vorliegenden Arbeit gesammelten Erfahrungen mit einem zu klein gewählten Korrekturparameter δ_L. Die Spektraldichten in den einzelnen Iterationen wiesen in diesem Fall vergleichbare Schulterstrukturen auf. Diese Strukturen erwiesen sich jedoch als instabil. Ihre Lage und Ausprägung änderte sich mit jeder Iteration des Selbstkonsistenzzyklus. Eine Selbstkonsistenz konnte in diesem Fall nicht erreicht werden, da die Einteilchen-Anregungslücke mit jeder Iteration zunahm.

In den Abbildungen 3.9 und 3.10 lässt sich eine nahezu exzellente Übereinstimmung mit den störungstheoretisch [60] (bis zur zweiten Ordnung in $1/U$) bestimmten Spektraldichten beobachten. Deutliche Abweichungen von den in dieser Arbeit bestimmten Spektraldichten treten vor allem für Wechselwirkungsstärken unterhalb von $U = 3.2D$ auf, und zwar je näher U an die kritische Wechselwirkungsstärke heranrückt, an der sich die beiden Hubbard-Bänder verschmelzen. Für diese Wechselwirkungsstärken weisen die störungstheoretisch bestimmten Spektraldichten eine größere Einteilchen-Anregungslücke auf. Des Weiteren tragen sie für U-Werte nahe am Übergang geringfügig mehr Spektralgewicht an den Außenseiten der beiden Hubbard-Bänder. Die in dieser Arbeit bestimmten Spektraldichten weisen ein flaches Abfallverhalten an den Außenseiten dieser Bänder auf, je näher U an die kritische Wechselwirkungsstärke heranrückt. Die störungstheoretisch bestimmten Spektraldichten weisen hingegen ein steiles (Wurzel-)Abfallverhalten auf. Es ist jedoch nicht zu erwarten, dass es scharfe Bandkanten an den Außenseiten der beiden Hubbard-Bänder gibt. An dieser Stelle sei betont, dass die Abweichungen der störungstheoretisch bestimmten Spektraldichten von den Ergebnissen dieser Arbeit nahe am Übergang nicht verwunderlich sind. Die zum Vergleich herangezogene Störungsreihe besitzt nur Beiträge bis zur zweiten Ordnung in $1/U$ und berücksichtigt keine Mehrteilchen-Effekte. Sie weist in der Nähe des Phasenübergangs ein schlechtes Konvergenzverhalten und eine höhere Ungenauigkeit auf.

Im Gegensatz zu den Außenseiten der beiden Hubbard-Bänder weisen die Innenseiten für alle Wechselwirkungsstärken ein steiles Abfallverhalten und nahezu scharfe Bandkanten auf. Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass die in dieser Arbeit eingesetzte Least-Bias-Entfaltung nur bedingt in der Lage ist, eventuell auftretende scharfe Bandkanten in der unverbreiterten Spektraldichte darzustellen. Der Grund hierfür ist eine stets vorhandene exponentielle Ausschmierung, die aus der Darstellung der unverbreiterten Spektraldichte mittels Exponentialfunktionen (2.27) resultiert. Eine Konsequenz dieser exponentiellen Ausschmierung ist, dass die Einteilchen-Anregungslücke im thermodynamischen Limes nicht ohne weiteres aus der unverbreiterten Spektraldichte abgelesen werden kann. Des Weiteren wird eine eventuell auftretende Gesetzmäßigkeit im Abfallverhalten (beispielsweise in Form eines Potenzgesetzes) durch die exponentielle Ausschmierung überdeckt. Die Bestimmung der Einteilchen-Anregungslücke im thermodynamischen Limes aus einer Extrapolation der zu verschiedenen Systemgrößen selbstkonsistent bestimmten Einteilchen-

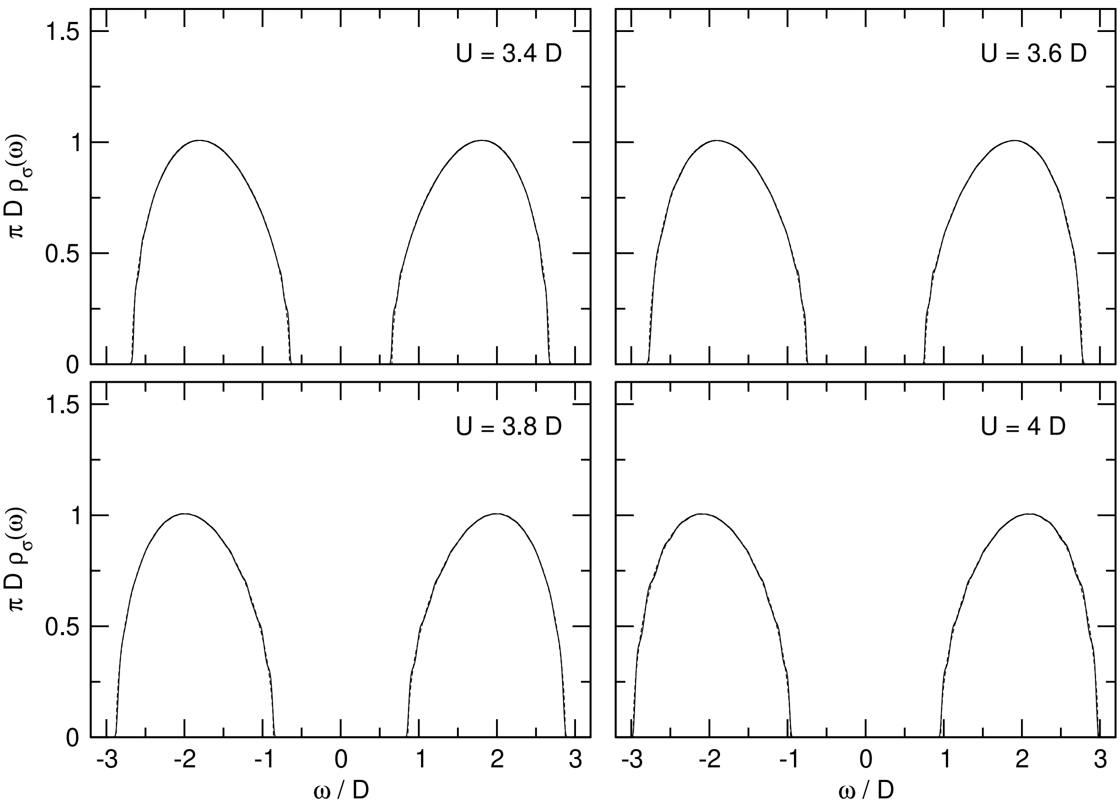

Abbildung 3.10: Lokale Spektraldichten des halbgefüllten Einband-Hubbard-Modells mit der semielliptischen Zustandsdichte für $Z \to \infty$ und $T = 0$ in der paramagnetischen isolierenden Phase zu den Wechselwirkungsstärken $U/D = 3.4$, 3.6, 3.8, 4 berechnet mittels einer Spinkette der Länge 242 ($L = 121$). Die gestrichelte Linie stellt die Ergebnisse der Störungstheorie [60] bis zur zweiten Ordnung in $1/U$ dar.

Anregungslücken $\Delta(U, L)$ erweist sich aufgrund der exponentiellen Ausschmierung als keine sinnvolle Vorgehensweise. Der Grund hierfür ist, dass mit der zunehmenden Systemgröße die exponentielle Ausschmierung in der Kettenbruchentwicklung besser aufgelöst wird und dadurch in den Modellparametern des effektiven Einstörstellen-Anderson-Modells zunehmend Eingang findet. Der eigentliche Finite-Size-Effekt resultierend aus der Bestimmung der Einteilchen-Anregungslücke mittels endlicher Kettenlängen wird daher mit steigender Systemgröße durch die zunehmende „Information“ über die exponentielle Ausschmierung überdeckt.

Zur Bestimmung der Einteilchen-Anregungslücke sowie des Abfallverhaltens an den inneren Bandkanten der beiden Hubbard-Bänder wird in dieser Arbeit daher eine andere Verfahrensweise angewendet. Die Einteilchen-Anregungslücke und das Abfallverhalten werden mittels eines geeignet gewählten Fits der Spektraldichte bestimmt. Aufgrund der Achsensymmetrie der Spektraldichte genügt es dabei, nur eines der beiden Hubbard-Bänder (hier das obere Hubbard-Band) zu betrachten. An

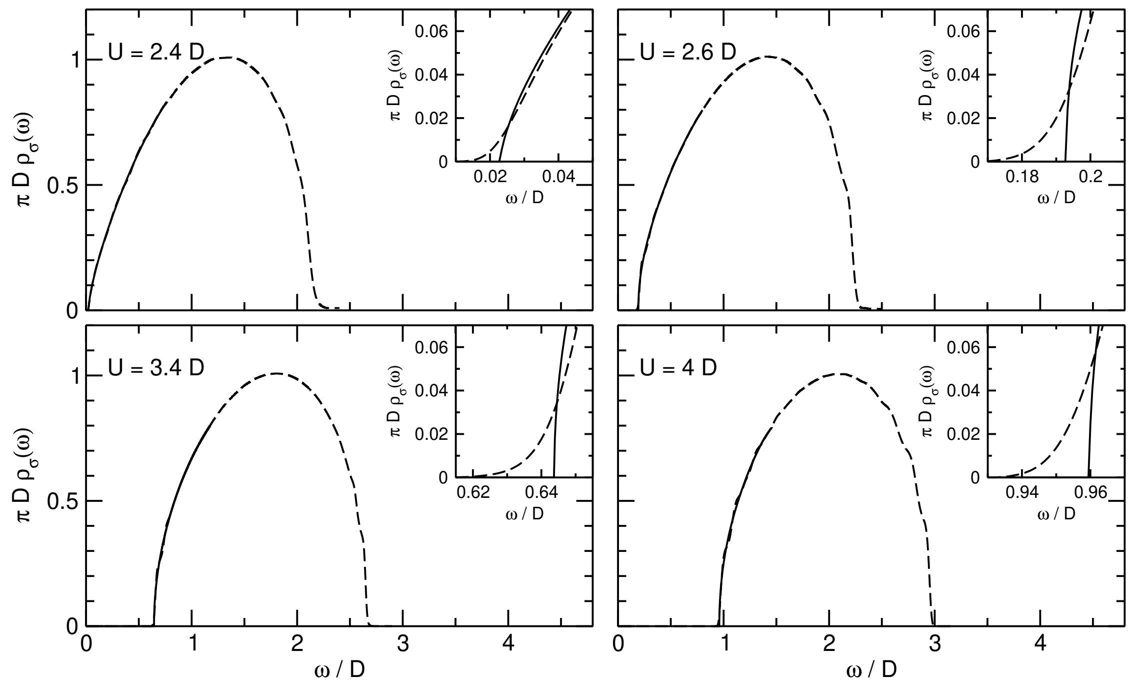

Abbildung 3.11: Lokale Spektraldichten des oberen Hubbard-Bandes zu den Wechselwirkungsstärken $U/D = 2.4$, 2.6, 3.4, 4 (gestrichelte Linie). Die durchgezogene Linie stellt die an die Innenseite des oberen Hubbard-Bandes angefittete Funktion (3.4) dar. Aus den Fit-Parametern dieser Funktion wird der führende Exponent α in dem Abfallverhalten bestimmt.

die Innenseite des oberen Hubbard-Bandes wird die Funktion

$$f_{\mathrm{OHB}}(\omega) = \Theta(\omega - \Delta/2)\left[(\omega - \Delta/2)^{\alpha} P_3(\omega - \Delta/2)\right] \tag{3.4}$$

mit

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} c_i x^i \ , \tag{3.5}$$

den Fit-Parametern α, Δ, c_i sowie der Heaviside-Funktion $\Theta(x)$ angefittet. Der Fit-Parameter Δ liefert die Größe der Einteilchen-Anregungslücke im thermodynamischen Limes, der Parameter α den führenden Exponent im Abfallverhalten der Spektraldichte für $\omega \to \Delta/2$. Die Untersuchung des Abfallverhaltens im Hinblick auf ein eventuell auftretendes Potenzgesetz ist durch die Ergebnisse der Störungstheorie bis zur zweiten Ordnung in $1/U$ [60] motiviert. Diesen zur Folge fällt die Spektraldichte des oberen Hubbard-Bandes für $\omega \to \Delta(U)/2$ mit $\Delta(U) \equiv \Delta(U,\infty)$ gemäß

$$\rho_\sigma^{\mathrm{OHB}}(\omega) \propto \left(\omega - \frac{\Delta(U)}{2}\right)^{1/2} \tag{3.6}$$

ab. Die angefitteten Funktionen sind in der Abbildung 3.11 für Spektraldichten zu

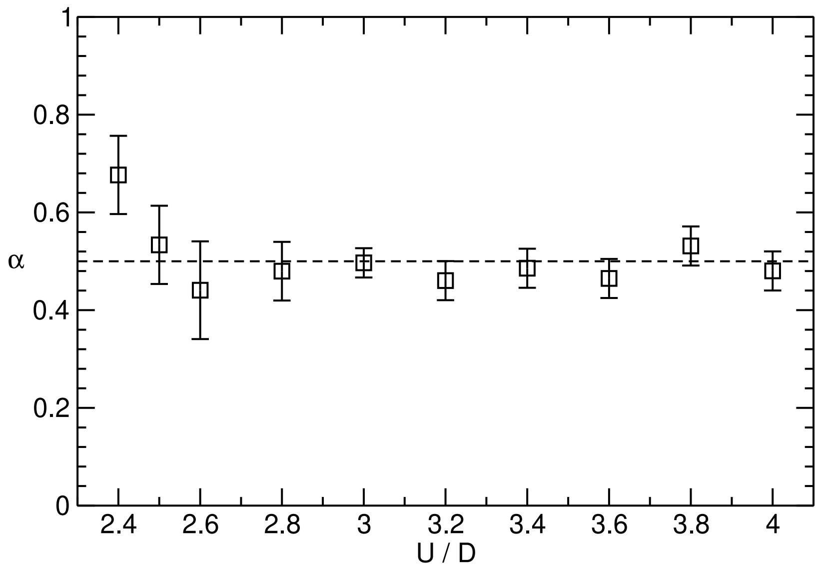

Abbildung 3.12: Führender Exponent α im Abfallverhalten der Spektraldichte des oberen Hubbard-Bandes $\rho_\sigma^{\mathrm{OHB}}(\omega)$ für $\omega \to \Delta/2$ zu verschiedenen Wechselwirkungsstärken. Die gestrichelte Linie markiert den aus der Störungstheorie bis zur zweiten Ordnung in $1/U$ bestimmten Wert ($\alpha = 0.5$).

den Wechselwirkungsstärken $U/D = 2.4$, 2.6, 3.4, 4 gezeigt. Die aus dem Fit ermittelten Parameter α zu allen hier betrachteten Wechselwirkungsstärken sind in der Abbildung 3.12 dargestellt. Der Fehler für α wird aus der Änderung dieser Größe infolge einer Änderung der Ordnung n des Polynoms (3.5) in der Fit-Funktion (3.4) bestimmt. Man stellt fest, dass die Fit-Parameter α für nahezu alle Wechselwirkungsstärken gut mit dem Wert aus der Störungstheorie ($\alpha = 0.5$) übereinstimmen. Die auftretenden Abweichungen sind vor allem auf die wellenförmigen Entfaltungsartefakte nahe der Bandkanten zurückzuführen. Die gute Übereinstimmung mit den störungstheoretisch bestimmten Abfallverhalten motiviert bei der Bestimmung der Einteilchen-Anregungslücke im thermodynamischen Limes eine Festlegung des Parameters α im Fit auf dessen störungstheoretisch bestimmten Wert ($\alpha \equiv 0.5$). Die in dieser Weise zu verschiedenen Wechselwirkungsstärken bestimmten Einteilchen-Anregungslücken Δ werden für die Untersuchung des Mott-Hubbard Metall-Isolator-Übergangs im Rahmen der DMFT herangezogen.

Analog zu der paramagnetischen metallischen Phase lässt sich mittels (3.2) die lokale Selbstenergie in der paramagnetischen isolierenden Phase aus der selbstkonsistent bestimmten retardierten Greenfunktion und der zu ihrer Berechnung verwendeten Hybridisierungsfunktion bestimmen. In der Abbildung 3.13 sind die mittels (3.2) berechneten Selbstenergien in der isolierenden Phase zu den Wechselwirkungsstärken $U/D = 2.4$, 2.8, 3.6, 4 dargestellt. Auch in der isolierenden Phase wird das erwartete Ergebnis verifiziert. Bis auf einen δ-Peak im Imaginärteil bei $\omega = 0$, ist

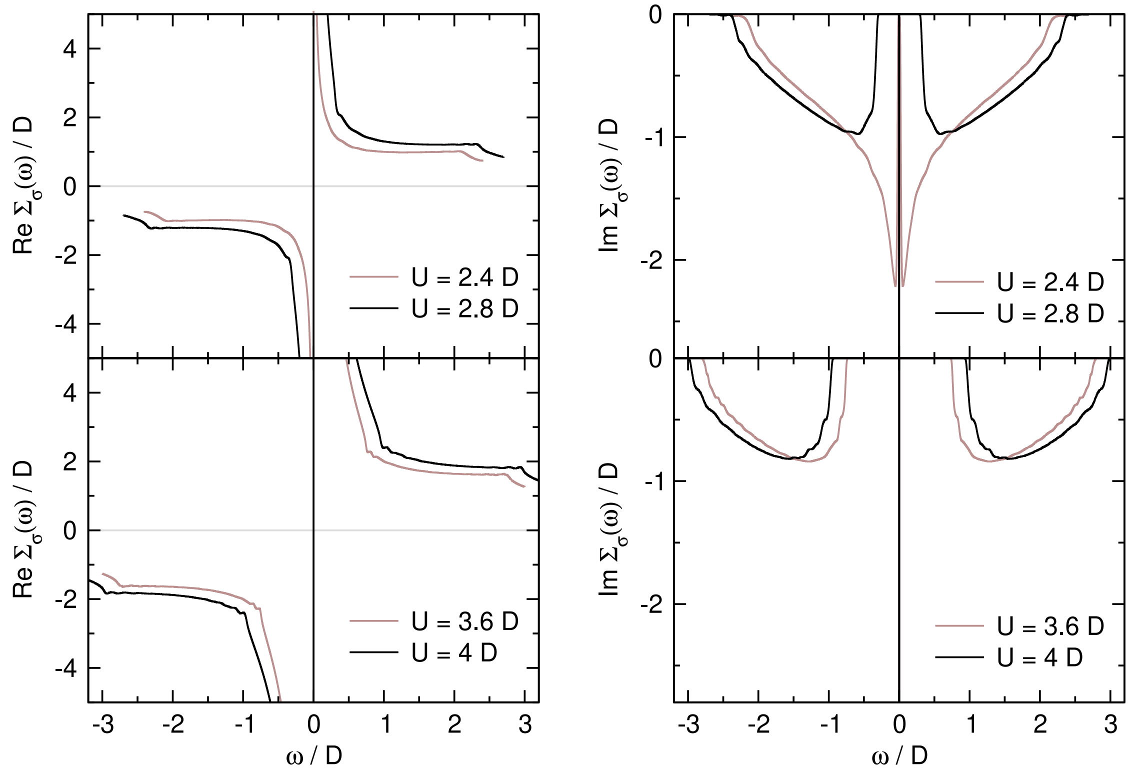

Abbildung 3.13: Real- und Imaginärteil der lokalen Selbstenergie des halbgefüllten Einband-Hubbard-Modells mit der semielliptischen Zustandsdichte für $Z \to \infty$ und $T = 0$ in der paramagnetischen isolierenden Phase zu den Wechselwirkungsstärken $U/D = 2.4$, 2.8, 3.6, 4. Die lokale Selbstenergie wird aus der selbstkonsistent bestimmten Greenfunktion ($L = 121$) und der zu ihrer Berechnung verwendeten Hybridisierungsfunktion berechnet.

die Selbstenergie innerhalb der Einteilchen-Anregungslücke strikt reell, d. h.

$$\mathrm{Im}\,\Sigma_\sigma(\omega) = -c\delta(\omega) \quad \text{für} \quad \omega \in [-\Delta/2, \Delta/2] \ , \tag{3.7}$$

mit $c > 0$. Der Realteil von $\Sigma_\sigma(\omega)$ weist in diesem Bereich erwartungsgemäß ein $1/\omega$ Verhalten auf mit einer Polstelle an der Fermienergie ($\mathrm{Re}\,\Sigma_\sigma(\omega) \propto 1/\omega$).

3.3 Der Mott-Hubbard Metall-Isolator-Übergang

Der Mott-Hubbard Metall-Isolator-Übergang innerhalb des Einband-Hubbard-Modells im Grenzfall unendlicher Koordinationszahl ist bis heute Gegenstand zahlreicher Diskussionen. Selbst im Rahmen der DMFT ist es bis heute noch umstritten, ob dieser Übergang kontinuierlich oder diskontinuierlich ist [4, 12, 63]. Bevor die in dieser Arbeit erzielten Ergebnisse zur Bestätigung eines der beiden Szenarien präsentiert werden, sollen im Folgendem die beiden in Frage kommenden Szenarien kurz dargestellt werden.

Szenario I: *Diskontinuierlicher Übergang*

In diesem Szenario existiert für die Wechselwirkungsstärke ein Bereich, in dem *beide* selbskonsistenten Lösungen, d. h. sowohl eine metallische als auch eine isolierende Lösung koexistieren. Ausgehend von einer metallischen Initialisierungs-Hybridisierungsfunktion (mit $\Gamma_S(0) \neq 0$) erhält man eine selbstkonsistente metallische Lösung mit einem endlichen Quasiteilchengewicht $\mathcal{Z}$. Dieses Quasiteilchengewicht verschwindet an einer kritischen Wechselwirkungsstärke U_{c2}. Von der anderen Seite kommend erhält man ausgehend von einer isolierenden Initialisierungs-Hybridisierungsfunktion (mit $\Gamma_S(0) = 0$) eine selbstkonsistente isolierende Lösung mit einer endlichen Einteilchen-Anregungslücke Δ. Diese verschwindet an einer kritischen Wechselwirkungsstärke U_{c1} mit $U_{c1} < U_{c2}$ und legt somit einen „Koexistenzbereich“ $U_{c1} \leq U \leq U_{c2}$ für die metallischen und isolierenden Lösungen fest. Innerhalb dieses Koexistenzbereichs bestimmt für $T = 0$ die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz die tatsächlich vorliegende Grundzustandsphase. Die selbstkonsistenten isolierenden Lösungen liegen dort energetisch höher als die entsprechenden metallischen Lösungen. Bevor also das Quasiteilchengewicht bei U_{c2} verschwindet, bildet sich eine vorgeformte Einteilchen-Anregungslücke aus. Diese springt bei U_{c2} auf einen endlichen Wert und weist somit ein diskontinuierliches Verhalten auf. Es sei an dieser Stelle betont, dass ein diskontinuierliches Verhalten der Einteilchen-Anregungslücke bei U_{c2} das Auftreten eines Phasenübergangs zweiter Ordnung nicht ausschließt [4].

Szenario II: *Kontinuierlicher Übergang*

In diesem Szenario verschwindet das Quasiteilchengewicht an der selben kritischen Wechselwirkungsstärke, an der die Einteilchen-Anregungslücke sich auszubilden beginnt ($U_{c1} = U_{c2}$).

Verschiedene numerische und analytische Methoden zur Untersuchung des Einband-Hubbard-Modells im Grenzfall unendlicher Koordinationszahl unterstützen entweder das erste [16, 58, 64–67] oder das zweite Szenario [4, 63]. Kehrein zeigte in seiner Arbeit [68], dass die Abgrenzung des Quasiteilchen-Peaks von den Hubbard-Bändern und die Ausbildung einer vorgeformten Lücke im Widerspruch zur Konvergenz der Skelettdiagrammentwicklung steht. Da es derzeit keine exakte Lösung der DMFT-Gleichungen gibt, existiert bisher kein überzeugender Beweis für eines der beiden Szenarien. In den folgenden Abschnitten werden die in dieser Arbeit erzielten Ergebnisse hinsichtlich der Bestimmung der beiden kritischen Wechselwirkungsstärken U_{c1} und U_{c2} dargestellt und mit Ergebnissen anderer numerischer und analytischer Methoden verglichen. Des Weiteren werden für die Diskussion des Phasenübergangs die notwendigen Ergebnisse zu der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz und der mittleren Doppelbesetzung herangezogen.

3.3.1 Bestimmung des Koexistenzbereichs

Die Berechnung des Quasiteilchengewichts zu einer vorgegebenen Wechselwirkungsstärke innerhalb der metallischen Phase erfolgt in dieser Arbeit mittels der Gleichung (2.54), d. h. mittels der Ableitung des Realteils der selbstkonsistent bestimmten retardierten Greenfunktion. Die übliche Vorgehensweise, um die Ableitung einer fein gerasterten Funktion numerisch zu bestimmen, bestünde in der Bildung des Differenzenquotients. Die Spektraldichten zu $U \leq D$ weisen jedoch an der Spitze des Quasiteilchen-Peaks eine Delle auf, die als ein numerisches Artefakt der Least-Bias-Entfaltung zu deuten ist (vgl. Abbildung 3.1). Die Anwesenheit dieser Delle überträgt sich wegen (2.28) auf den mit der Spektraldichte verknüpften Imaginärteil der Greenfunktion und beeinflusst somit deren mittels Kramers-Kronig-Relation rekonstruierten Realteil in einer kleinen Umgebung um $\omega = 0$, auf der der Differenzenquotient üblicherweise gebildet wird. Es erweist sich daher als ungeschickt, das Quasiteilchengewicht mittels des Differenzenquotienten zu bestimmen. Stattdessen wird für eine unvoreingenommene Bestimmung von $\mathcal{Z}$ die Ableitung des Realteils in (2.54) aus dem Fit-Parameter a einer an den Realteil der Greenfunktion angefitten Polynomfunktion dritter Ordnung in ω

$$f_{\mathrm{Re}}(\omega) = a\omega + b\omega^3 \tag{3.8}$$

ermittelt. Die Abwesenheit von Beiträgen gerader Ordnung in (3.8) resultiert aus der Symmetrie des Realteils von $G_\sigma(\omega)$. Der Fit erfolgt auf einer Umgebung um $\omega = 0$, deren Größe derart gewählt wird, dass einerseits der Teilbereich dieser Umgebung, der durch die Delle beeinflusst wird, verhältnismäßig gering ist, andererseits der Realteil von $G_\sigma(\omega)$ in dieser Umgebung ein nahezu lineares Verhalten aufweist. Dadurch lässt sich der Einfluss der Delle auf den Fit-Parameter a und somit auf das Quasiteilchengewicht $\mathcal{Z} = 2/a$ gering halten. Für $U = 0.25D$ beispielsweise erfolgt der Fit auf dem Intervall $I_{\mathrm{Fit}} = [-0.5, 0.5]$. Für $U = D$ wird das Intervall $I_{\mathrm{Fit}} = [-0.3, 0.3]$ gewählt.

In der Abbildung 3.14 ist das auf diese Weise bestimmte Quasiteilchengewicht als Funktion der Wechselwirkungsstärke dargestellt. Unterhalb von $U = D$, d. h. im Bereich schwacher Korrelationen ist eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Ergebnis aus der Störungstheorie bis zur vierten Ordnung in U [48] zu verzeichnen. Für $U = 0.75D$ erhält man eine relative Abweichung von 0.05%. Diese Abweichung nimmt monoton mit der Wechselwirkungsstärke ab. Bei $U = 0.25D$ beträgt die relative Abweichung nur noch 0.03%. Im Bereich starker Korrelationen ($U \geq D$) ist die Störungstheorie nicht mehr in der Lage, das Quasiteilchengewicht quantitativ richtig zu erfassen. Eine wenn auch etwas schwächere Übereinstimmung kann auch mit den NRG Ergebnissen verzeichnet werden. Oberhalb von $U = 0.5D$ weisen die aus der NRG bestimmten $\mathcal{Z}$-Werte zwar qualitativ einen identischen Verlauf auf, sie sind jedoch geringfügig niedriger als die in dieser Arbeit bestimmten Werte. Diese qualitative Übereinstimmung mit den NRG-Daten konnte bereits anhand der Spektraldichten im Bereich des Quasiteilchen-Peaks vermutet werden. Die geringfügige Abweichung des mittels der NRG-DMFT bestimmten Quasiteilchengewichts

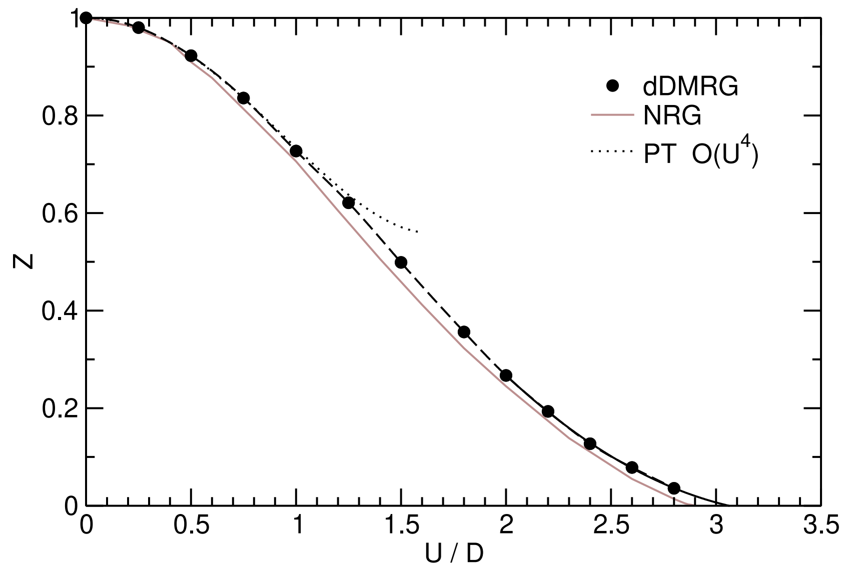

Abbildung 3.14: Das Quasiteilchengewicht als Funktion der Wechselwirkungsstärke im Vergleich zu den Ergebnissen aus der Störungstheorie (PT) vierter Ordnung in U [48] und der NRG [16]. Die gefüllten Kreise sind die mittels des Fitparameters a bestimmten Datenpunkte zu $\mathcal{Z}$, die gestrichelte Linie eine Spline-Interpolation dieser Datenpunkte. Die durchgezogene schwarze Linie stellt die angefittete Funktion $f_{\mathcal{Z}}(U)$ zur Extrapolation der kritischen Wechselwirkungsstärke U_{c2} dar.

lässt sich offenbar auf die Abweichung der Spektraldichten in der Nähe der beiden Hubbard-Bänder zurückführen.

Das Quasiteilchengewicht nimmt erwartungsgemäß mit steigender Wechselwirkungsstärke stetig und monoton ab. Des Weiteren lässt sich aus dem Verlauf von $\mathcal{Z}(U)$ darauf schließen, dass das Quasiteilchengewicht an einer endlichen kritischen Wechselwirkungsstärke U_{c2} verschwindet. Das kritische Verhalten von $\mathcal{Z}$ nahe U_{c2} wurde mittels zahlreichen verschiedenen Methoden untersucht, darunter der PSCM[3] [12,69], die eine sehr genaue Bestimmung von $\mathcal{Z}$ in der Nähe von U_{c2} erlauben soll. Diesen Untersuchungen zur Folge weist $\mathcal{Z}(U)$ ein lineares Verhalten nahe U_{c2} auf: $\mathcal{Z} \propto (U - U_{c2})$. Aus diesem Grund erscheint es als sinnvoll die kritische Wechselwirkungsstärke U_{c2} in dieser Arbeit durch das Anfitten der Funktion

$$f_{\mathcal{Z}}(U) = a_1\,(U - U_{c2}) + a_2\,(U - U_{c2})^2 \tag{3.9}$$

an die Werte von $\mathcal{Z}$ zu den Wechselwirkungsstärken $U/D = 2,\, 2.2,\, 2.4,\, 2.8$ zu bestimmen (vgl. Abbildung 3.14). Man erhält daraus $U_{c2} = (3.06 \pm 0.1)D$, in guter

[3] Bei der von Moeller [69] eingeführten *projective selfconsistent method* (PSCM) wird die bei stark korrelierten Systemen vorhandene strikte Trennung der Energieskalen ausgenutzt, um die hochenergetischen Freiheitsgrade aus dem stark korrelierten Problem zu entfernen, so dass dieses auf ein effektives niederenergetisches Problem mit nur einer Energieskala reduziert werden kann. Das reduzierte Problem lässt sich dann numerisch einfacher behandeln.

U_{c1}/D	U_{c2}/D	Methode	Autoren
2.38 ± 0.02	3.06 ± 0.1	Korrekturvektor-DMRG	Ergebnisse dieser Arbeit
2.225 ± 0.025		DDMRG (variationell)	Nishimoto et al. (2004) [56]
2.39 ± 0.02	3.0 ± 0.2	Lanczos-DMRG	Garcia et al. (2004) [58]
2.39		PT-QMC	Blümer et al. (2004) [70]
2.39	2.94	NRG	Bulla et al. (2001) [67]
	3	„linearisierte" DMFT	Bulla et al. (2000) [71]
	2.92 ± 0.05	PSCM	Moeller et al. (1995) [69]

Tabelle 3.2: Gegenüberstellung der mittels verschiedenen Methoden bestimmten kritischen Wechselwirkungsstärken U_{c1} und U_{c2} bei $T = 0$. Sämtliche Wechselwirkungsstärken wurden auf die in dieser Arbeit verwendete Energieeinheit reskaliert.

Übereinstimmung mit den DMFT-Ergebnissen basierend auf der PSCM [69], der NRG [16] und der Lanczos-DMRG [58]. Der Fehler für U_{c2} wird aus der Änderung dieser Größe infolge einer Nichtberücksichtigung des Datenpunktes bei $U = 2.8D$ im Fit bestimmt. Die kritischen Wechselwirkungsstärken zu den verschiedenen numerischen und analytischen Methoden sind in der Tabelle 3.2 zusammengefasst.

Die aus der Fit-Funktion (3.4) mit festem Parameter $\alpha = 0.5$ bestimmte Einteilchen-Anregungslücke ist in der Abbildung 3.15 als Funktion der Wechselwirkungsstärke dargestellt. Für große U-Werte ($U \geq 3.4D$) beobachtet man nur eine geringe Abweichung von dem Ergebnis der Störungstheorie bis zur zweiten Ordnung in $1/U$ [60]. Diese Abweichung ist von der Ordnung $\mathcal{O}(U^{-3})$. Es ist somit nicht ausgeschlossen, dass die Berücksichtigung von Korrekturen dritter Ordnung in der Störungsentwicklung zu einer besseren Übereinstimmung des in dieser Arbeit erzielten Ergebnisses mit den Ergebnis der Störungstheorie führt. Für kleinere U-Werte, insbesondere in der Umgebung der kritischen Wechselwirkungsstärke U_{c1}, an der die Einteilchen-Anregungslücke verschwindet, müssten eventuell Korrekturen weitaus höherer Ordnung in der Störungsentwicklung zum Vergleich herangezogen werden. Entgegen den Ergebnissen aus der FE-DMFT(DDMRG) [56] weist die in dieser Arbeit bestimmte Einteilchen-Anregungslücke als Funktion von U kein lineares Verhalten in der Umgebung von U_{c1} auf. Stattdessen wird dort eine Krümmung vergleichbar mit den Ergebnissen aus der IPT [72], der LMA[4] [73] sowie der Lanczos-DMRG [58] beobachtet. Der Verlauf von $\Delta(U)$ in der Nähe von U_{c1} suggeriert ein Potenzgesetz. Aus diesem Grund wird die kritische Wechselwirkungsstärke U_{c1} sowie der führende Exponent ζ im Verlauf von $\Delta(U)$ in dieser Arbeit durch einen Fit mittels der Funktion

$$f_\Delta(U) = (U - U_{c1})^\zeta \left(a_1 + a_2 (U - U_{c1})\right) \tag{3.10}$$

bestimmt. Man erhält hieraus $U_{c1} = (2.38 \pm 0.02)D$ und $\zeta = 0.73 \pm 0.04$. Der Fehler

[4]LMA steht hier für *local moment approach*. Eine detaillierte Übersicht zu dieser Methode kann in der Referenz [73] gefunden werden.

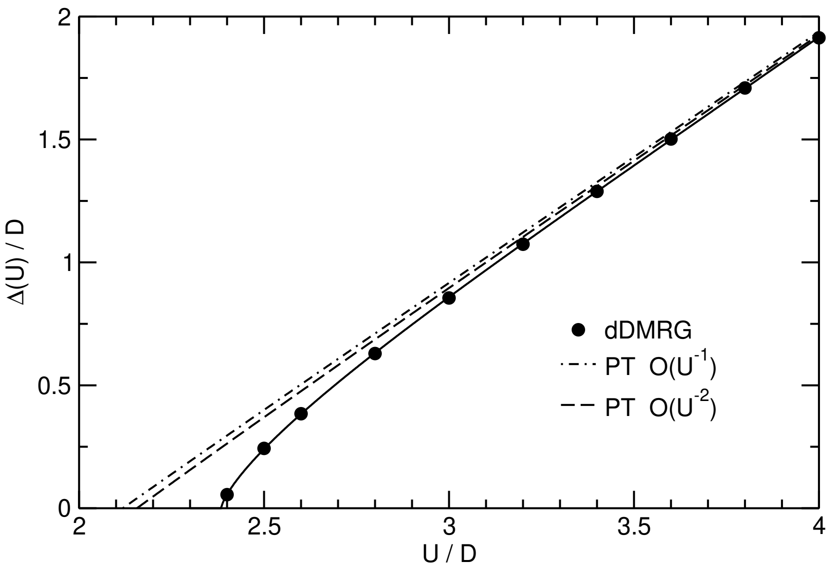

Abbildung 3.15: Die Einteilchen-Anregungslücke als Funktion der Wechselwirkungsstärke im Vergleich zu den Ergebnissen aus der Störungstheorie bis zur zweiten Ordnung in $1/U$ [60]. Die gefüllten Kreise sind die mittels der Fit-Funktion $f_{\text{OHB}}(\omega)$ mit festem Parameter $\alpha = 0.5$ bestimmten Δ-Werte. Die durchgezogene Linie stellt die angefittete Funktion $f_{\Delta}(U)$ dar zur Extrapolation der kritischen Wechselwirkungsstärke U_{c1} und zur Bestimmung des führenden Exponenten ζ im Abfallverhalten.

für U_{c1} und ζ wird hier aus der Änderung dieser Größen infolge einer Nichtberücksichtigung des Datenpunktes bei $U = 2.4D$ im Fit bestimmt. Der in dieser Arbeit ermittelte Wert für U_{c1} stimmt innerhalb des Fehlerbereichs mit den Ergebnissen aus der NRG [67], der PT-QMC [70] sowie der Lanczos-DMRG [58] sehr gut überein (vgl. Tabelle 3.2). Das Ergebnis aus der FE-DMFT(DDMRG) [56] kann trotz vergleichbarer Auflösung nicht bestätigt werden.

Die Koexistenz der metallischen und isolierenden Lösung innerhalb des von U_{c1} und U_{c2} festgelegten Bereichs lässt sich anhand der selbstkonsistent bestimmten Spektraldichten zu den verschiedenen Phasen verifizieren (vgl. Abbildung 3.16). Um die tatsächliche Grundzustandsphase innerhalb dieses Koexistenzbereichs zu bestimmen, wird im Folgenden die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz herangezogen. Zuvor sei jedoch angemerkt, dass die in dieser Arbeit bestimmten Werte für U_{c1} und U_{c2}, die den Koexistenzbereich festlegen, lediglich Ergebnisse bestätigen, die bereits mittels anderer Methoden unter einem deutlich geringeren rechnerischen Aufwand ermittelt wurden. Wesentliche Unterschiede sind vorallem in den selbstkonsistent bestimmten Spektraldichten zu verzeichnen. Für die Bestimmung des Quasiteilchengewichts sowie der Einteilchen-Anregungslücke in der Umgebung von U_{c1} und U_{c2} genügt es offenbar numerische Methoden heranzuziehen, die den niederenergetischen Bereich der Spektraldichten mit einer hohen Auflösung bestimmen können. Die hohe Genauigkeit auf der gesamten Energieskala der in dieser Arbeit eingesetzten Korrekturvektor-

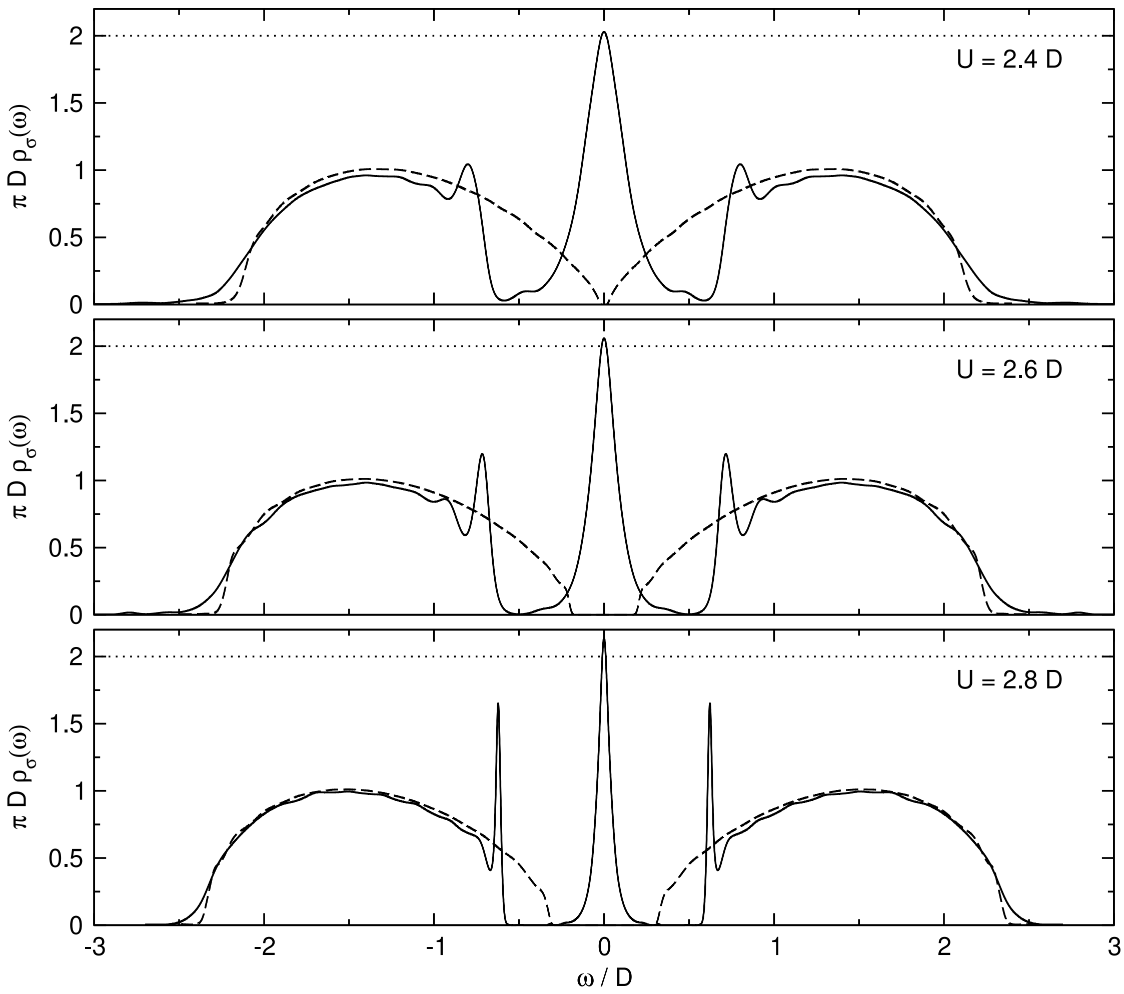

Abbildung 3.16: Metallische (durchgezogene Linie) und isolierende (gestrichelte Linie) Lösungen des halbgefüllten Einband-Hubbard-Modells mit der semielliptischen Zustandsdichte für $Z \to \infty$ und $T = 0$ innerhalb des Koexistenzbereichs $U_{c1} \leq U \leq U_{c2}$. Die gepunktete Linie markiert den Wert der freien lokalen Spektraldichte an der Fermienergie: $\rho^0_\sigma(0) = 2/(\pi D)$.

Methode scheint einen geringen Einfluss auf diese kritischen Wechselwirkungsstärken zu haben.

Ganz anders verhält es sich jedoch bei der Berechnung der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz und der mittleren Doppelbesetzung. Hierzu ist eine genaue Kenntnis der selbstkonsistenten Spektraldichten auf der gesamten Energieskala notwendig. Diese Notwendigkeit lässt sich am Beispiel der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz E_0/L und deren Verknüpfung mit dem ersten Moment der Spektraldichte über die

Beziehung [36]

$$M_1 = -\frac{1}{L}\left(E_0 + U\frac{\partial E_0}{\partial U}\right) \quad \text{mit} \quad M_1 = 2\int\limits_0^\infty \mathrm{d}\omega\, \omega \rho_\sigma(\omega) \tag{3.11}$$

in einer einfachen Weise veranschaulichen. Obgleich E_0/L in dieser Arbeit nicht mittels dieser Beziehung ermittelt wird, so lässt sich anhand dieser, insbesondere anhand des dort auftretenden ersten Moments M_1, der nicht zu vernachlässigende Einfluss der hochenergetischen Spektraldichtebeiträge auf die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz erkennen. Unter Verwendung der dynamischen DMRG ist man jedoch in der Lage, selbstkonsistente Spektraldichten auf der gesamten Energieskala mit einer hohen Auflösung bestimmen zu können. Daraus können erstmals die genauen Modellparameter des effektiven Einstörstellen-Anderson-Modells ermittelt werden, die für eine genaue Berechnung der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz und der mittleren Doppelbesetzung des Einband-Hubbard-Modells benötigt werden.

3.3.2 Die Grundzustandsenergie und die mittlere Doppelbesetzung

Für eine genaue Bestimmung der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz und der mittleren Doppelbesetzung existieren derzeit nur wenige numerische Methoden, die sowohl die paramagnetische metallische als auch die paramagnetische isolierende Phase bei $T = 0$ vollständig erfassen können. Störungstheoretische Methoden (PT aber auch IPT) sind nur bedingt in der Lage, das Verhalten dieser Größen nahe des Phasenübergangs zu beschreiben. Die Kenntnis dieser Größen ist jedoch essenziell um einen detaillierten Einblick in die Physik nahe des Phasenübergangs zu erhalten. Die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz E_0/L, deren kinetischer E_{kin}/L und potentieller Beitrag E_{pot}/L sowie die mittlere Doppelbesetzung $\bar{d}$ werden zu verschiedenen Wechselwirkungsstärken aus den Grundzustandserwartungswerten des effektiven Einstörstellen-Anderson-Modells in (2.64) und (2.66) mittels der (statischen) DMRG berechnet. Im Falle der Selbstkonsistenz stimmen diese Größen mit denen des in dieser Arbeit untersuchten Einband-Hubbard-Modells überein.

In der Abbildung 3.17 ist die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz als Funktion der Wechselwirkungsstärke vorerst separat in der paramagnetischen metallischen und der paramagnetischen isolierenden Phase zusammen mit den Ergebnissen aus der Störungstheorie [48, 60] dargestellt. Genau wie beim Quasiteilchengewicht ist in der metallischen Phase unterhalb von $U = D$ eine sehr gute Übereinstimmung von $E_0(U)/L$ mit dem Ergebnissen der Störungstheorie bis zur vierten Ordnung in U zu verzeichnen. Bei $U = 0.75D$ beträgt die relative Abweichung 0.02%. Bei $U = 0.25D$ beträgt diese jedoch 0.04%. Eine vergleichbare Übereinstimmung mit den Ergebnissen der Störungstheorie bis zur elften Ordnung in $1/U$ lässt sich ebenfalls in der isolierenden Phase beobachten. Die relative Abweichung beträgt dort bei $U = 4D$ weniger als 0.01%. Sie nimmt monoton zu, je näher U an den kritischen Wert U_{c1} heranrückt. Nahe am Übergang, bei $U = 2.4D$ weicht der störungstheoretisch bestimmte Wert bereits um 9% ab. Diese Abweichung ist jedoch nicht verwunderlich,

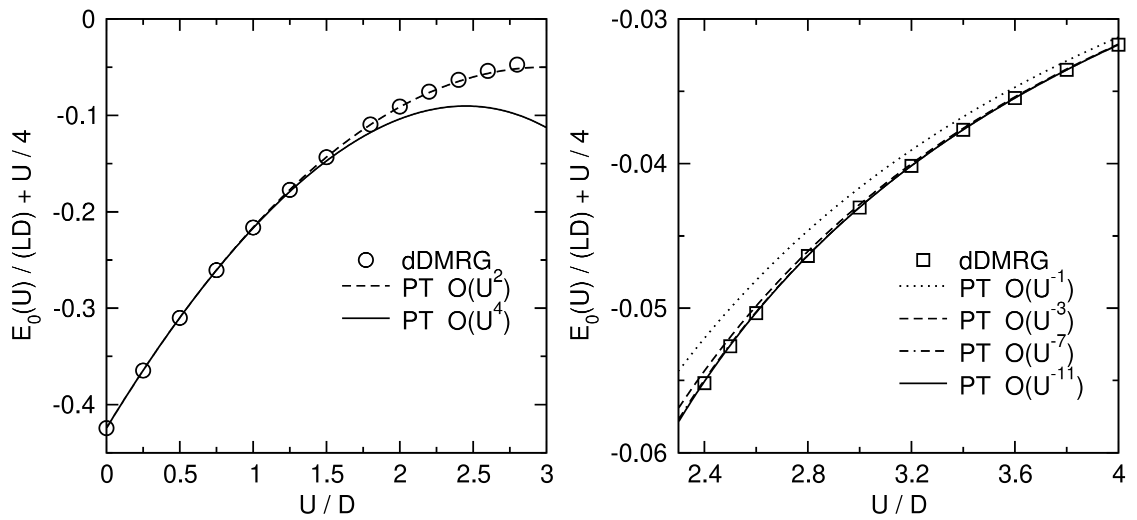

Abbildung 3.17: Die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz des halbgefüllten Einband-Hubbard-Modells mit der semielliptischen Zustandsdichte für $Z \to \infty$ und $T = 0$ zu verschiedenen Wechselwirkungsstärken im Vergleich zu den störungstheoretischen Ergebnissen (PT) [48, 60] in der paramagnetischen metallischen (links) und der paramagnetischen isolierenden Phase (rechts).

da das Konvergenzverhalten der Störungsreihe und somit die Genauigkeit der Störungsentwicklung nahe am Übergang sich zunehmend verschlechtert. Eine ähnliche Übereinstimmung mit den störungstheoretischen Ergebnissen zeigt sich ebenfalls in der mittleren Doppelbesetzung $\bar{d}$. Diese ist als Funktion der Wechselwirkungsstärke in der Abbildung 3.18 dargestellt. In der metallischen Phase beträgt die relative Abweichung bei $U = 0.75D$ vom Ergebnis der Störungsentwicklung dritter Ordnung in U etwa 0.8%. Bei $U = 0.25D$ beträgt diese nur 0.03%. In der isolierenden Phase stellt man gegenüber der Störungsentwicklung zwölfter Ordnung in $1/U$ für $U = 4D$ eine relative Abweichung von 0.03% fest, für $U = 2.4D$ jedoch 2.5%.

Die in dieser Arbeit bestimmte mittlere Doppelbesetzung und die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz erfüllen die Gleichung

$$\bar{d}(U) = \frac{1}{4} + \frac{1}{L}\frac{\partial E_0}{\partial U} \ . \tag{3.12}$$

Diese Gleichung ist für die zur Berechnung von E_0/L und $\bar{d}(U)$ herangezogenen Erwartungswerte des effektiven Einstörstellen-Anderson-Modells in (2.66) und (2.64) nur im Falle der Selbstkonsistenz gültig. Die Erfüllung dieser Gleichung bestätigt somit, dass die in dieser Arbeit bestimmten Daten tatsächlich selbstkonsistente Lösungen der DMFT-Gleichungen für das Einband-Hubbard-Modell bilden.

In der Abbildung 3.19 ist die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz und die mittlere Doppelbesetzung aller Lösungen gemeinsam dargestellt. Es lässt sich deutlich erkennen, dass die metallischen Lösungen innerhalb des Koexistenzbereichs energetisch niedriger liegen als die isolierenden Lösungen zu den gleichen Wechselwir-

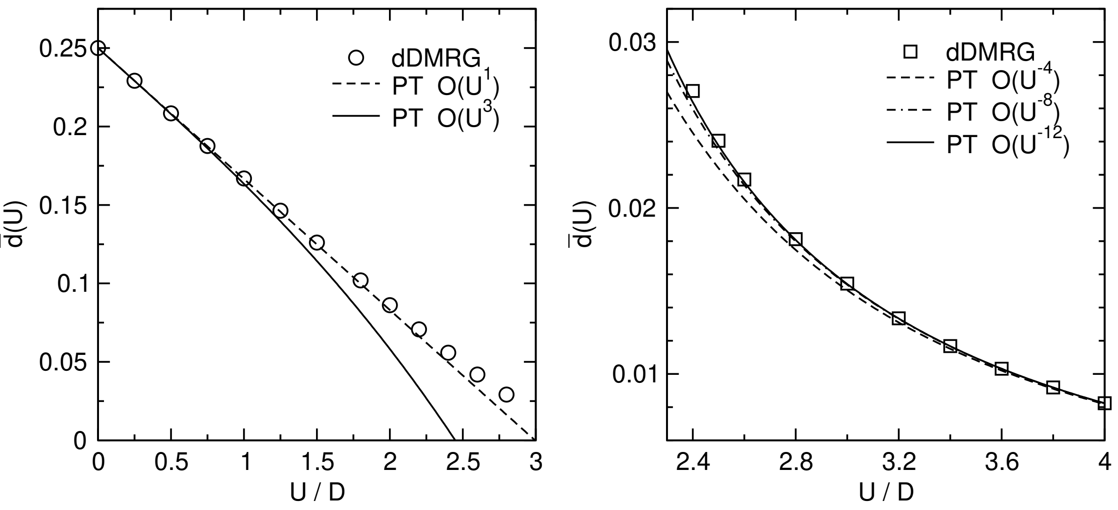

Abbildung 3.18: Die mittlere Doppelbesetzung des halbgefüllten Einband-Hubbard-Modells mit der semielliptischen Zustandsdichte für $Z \to \infty$ und $T = 0$ zu verschiedenen Wechselwirkungsstärken im Vergleich zu den störungstheoretischen Ergebnissen [48, 60] in der metallischen (links) und der isolierenden Phase (rechts).

kungsstärken. Die metallischen Lösungen bestimmen somit die tatsächliche Grundzustandsphase innerhalb dieses Koexistenzbereichs. Der Phasenübergang vom paramagnetischen Metall in den paramagnetischen Isolator bei $T = 0$ findet somit bei $U_\mathrm{c} = U_\mathrm{c2}$ statt. An der kritischen Wechselwirkungsstärke U_c schmiegt sich die Grundzustandsenergie der metallischen Lösung nahtlos an die der isolierenden Lösung an: $(E_0^\mathrm{met} - E_0^\mathrm{iso})/L|_{U=U_{\mathrm{c}2}} \approx 4 \times 10^{-6} D$. E_0/L scheint somit eine stetig differenzierbare Funktion in der Wechselwirkungsstärke, insbesondere bei U_c2, zu sein. Diese Feststellung bestätigt sich im stetigen Verlauf der mittleren Doppelbesetzung als Funktion von U, die mit der Grundzustandsenergie nach (3.12) über deren erste Ableitung verknüpft ist. Erwartungsgemäß nimmt die mittlere Doppelbesetzung Werte zwischen 0 und 0.25 an und ist für metallische Lösungen größer als für isolierende Lösungen. Der Schnittpunkt zwischen den an die Datenpunkte angefitteten Funktionen markiert den Übergang von der metallischen in die isolierende Phase. Man erhält für den Wechselwirkungswert dieses Schnittpunktes $U_\mathrm{c} = (3.06 \pm 0.04)D$ und somit eine exzellente Übereinstimmung mit dem aus dem Verlauf des Quasiteilchengewichts bestimmten kritischen Wert ($U_\mathrm{c} = U_\mathrm{c2}$). Im Gegensatz zu den auf Gutzwillers Variationsmethode basierenden Untersuchungen von Brinkman und Rice [32] verschwindet die mittlere Doppelbesetzung am Übergang nicht. Dieses Verhalten ist jedoch nicht verwunderlich, da der Beitrag der mittleren Doppelbesetzung am Übergang aus den virtuellen Hüpfprozessen im Isolator resultiert.

In der Abbildung 3.20 sind ergänzend die kinetischen E_kin/L und potentiellen E_pot/L Beiträge der Grundzustandsenergien pro Gitterplatz als Funktion der Wechselwirkungsstärke dargestellt. Innerhalb des Koexistenzbereichs erkennt man, dass die Differenz zwischen den Grundzustandsenergien der metallischen und isolieren-

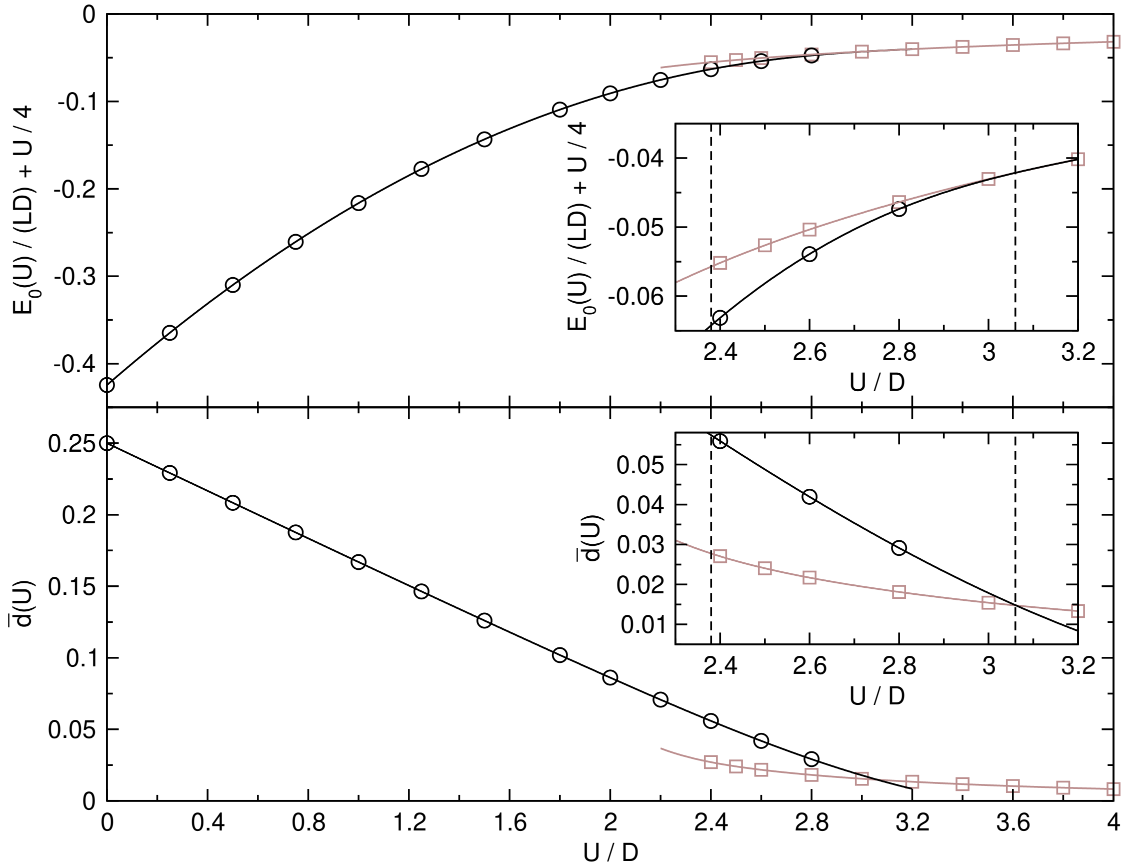

Abbildung 3.19: Grundzustandsenergie pro Gitterplatz und mittlere Doppelbesetzung als Funktion der Wechselwirkungsstärke zu dem halbgefüllten Einband-Hubbard-Modell mit der semielliptischen Zustandsdichte für $Z \to \infty$ und $T = 0$. Die schwarzen Kreise sind die berechneten Werte zu den metallischen-, die grauen Rechtecke die berechneten Werte zu den isolierenden Lösungen. Die durchgezogenen Linien sind die angefitteten Polynomfunktionen siebter Ordnung. Die gestrichelten vertikalen Linien in den Insets markieren den anhand des Quasiteilchengewichts und der Einteilchen-Anregungslücke zuvor bestimmten Koexistenzbereich.

den Lösungen deutlich kleiner ist, als die Differenz zwischen deren kinetischen und potentiellen Beiträgen, bei separater Betrachtung.

Die Ergebnisse dieser Arbeit bestätigen somit das Szenario eines diskontinuierlichen[5] Übergangs. Die metallische Phase verschwindet mit dem Quasiteilchengewicht bei $U_c = U_{c2} = (3.06 \pm 0.04)D$. Dort ist die Einteilchen-Anregungslücke bereits vorgeformt $\Delta(U_{c2}) \approx 0.92D$. Anhand der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz und der mittleren Doppelbesetzung konnte der Übergang von der paramagnetischen metallischen in die paramagnetische isolierende Phase als ein Phasenübergang zweiter

[5]Man beachte, dass der Begriff „diskontinuierlich“ sich auf das Verhalten der Einteilchen-Anregungslücke an der kritischen Wechselwirkungsstärke $U_c = U_{c2}$ bezieht.

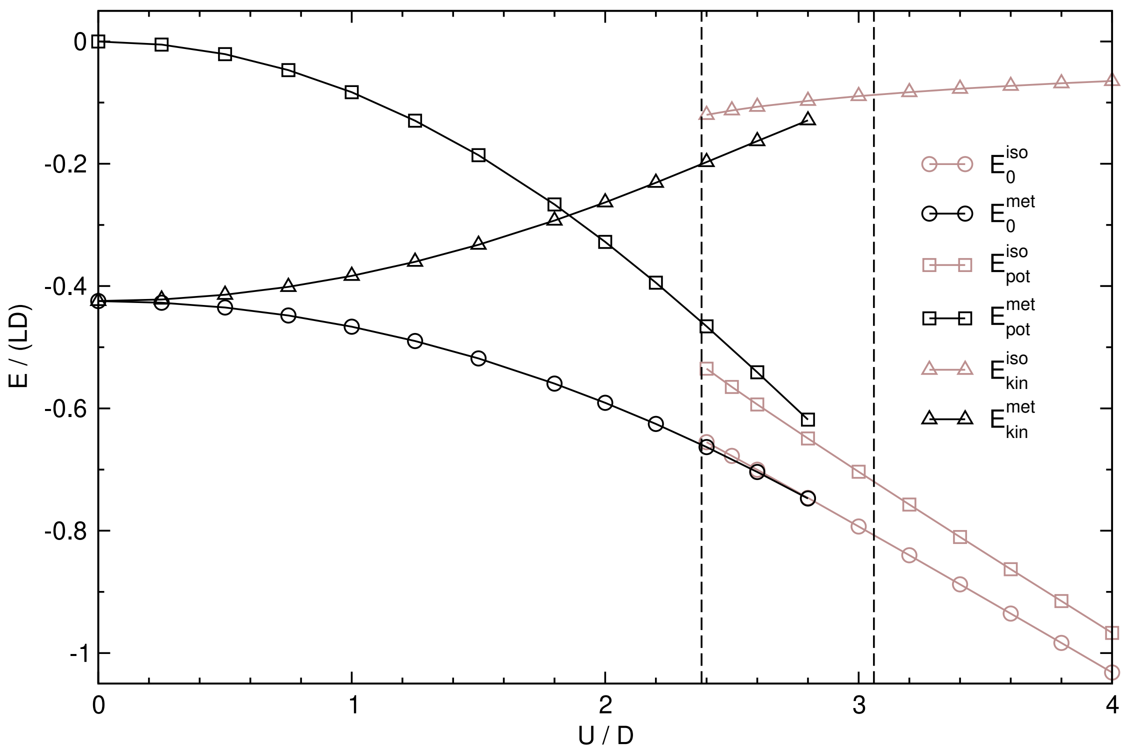

Abbildung 3.20: Grundzustandsenergie pro Gitterplatz, deren kinetischer und potentieller Beitrag als Funktion der Wechselwirkungsstärke zu dem halbgefüllten Einband-Hubbard-Modell mit der semielliptischen Zustandsdichte für $Z \to \infty$ und $T = 0$. Die gestrichelten vertikalen Linien markieren den anhand des Quasiteilchengewichts und der Einteilchen-Anregungslücke zuvor bestimmten Koexistenzbereich.

Ordnung bei $U_c(T = 0) = (3.06 \pm 0.04)D$ klassifiziert werden.

Das Szenario eines Phasenübergangs zweiter Ordnung lässt sich auch durch den Vergleich der Spektraldichten zu den metallischen und isolierenden Lösungen innerhalb des Koexistenzbereichs bestätigen (vgl. Abbildung 3.16). Bei der Betrachtung der beiden Hubbard-Bänder stellt man fest, dass die Spektraldichten der beiden koexistierenden Lösungen sich zunehmend angleichen, je näher U an den kritischen Wert U_c heranrückt. Dieses Verhalten legt die Vermutung nahe, dass am Übergang die Spektraldichten dieser Lösungen stetig ineinander übergehen, so wie man es bei einem Phasenübergang zweiter Ordnung erwarten würde. Um diese Vermutung zu untermauern, wird im Folgenden die Lage der inneren Bandkanten der beiden Hubbard-Bänder in den Spektraldichten der metallischen und isolierenden Lösungen in Abhängigkeit von U untersucht. Für Wechselwirkungsstärken innerhalb des Koexistenzbereichs weisen die Spektraldichten der metallischen Lösungen eine Pseudo-Lücke zwischen den Quasiteilchen-Peak und den beiden Hubbard-Bändern auf. Diese grenzt die beiden Hubbard-Bänder von den Quasiteilchen-Peak ab und ermög-

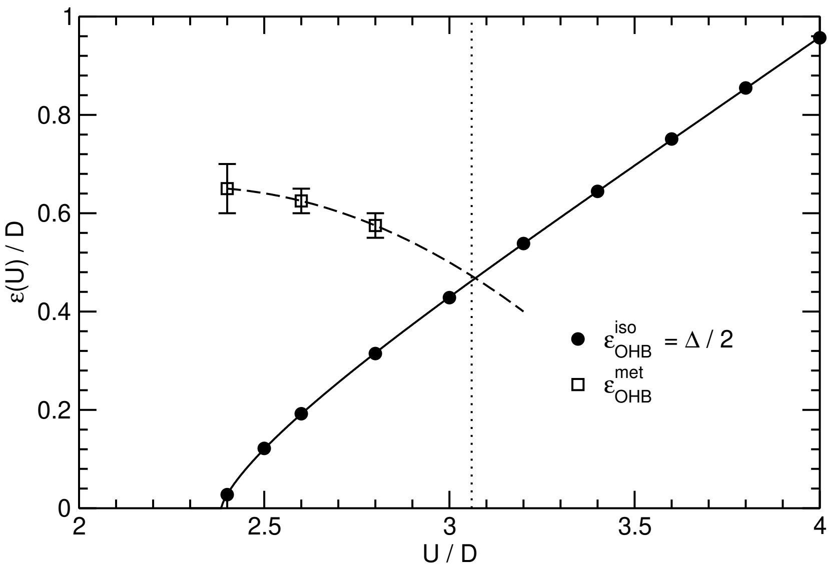

Abbildung 3.21: Abschätzung der Lage der inneren Bandkante des oberen Hubbard-Bandes in den Spektraldichten der metallischen $\epsilon^{\mathrm{met}}_{\mathrm{OHB}}$ und isolierenden Phase $\epsilon^{\mathrm{iso}}_{\mathrm{OHB}} = \Delta/D$. Die gepunktete Linie markiert die kritische Wechselwirkungsstärke $U_{\mathrm{c}} = U_{\mathrm{c2}}$ an der ein Phasenübergang zweiter Ordnung von der paramagnetischen metallischen in die paramagnetische isolierende Phase stattfindet. Die gestrichelte Linie ist ein Fit mittels eines Polynoms zweiter Ordnung in U.

licht somit eine einfache Abschätzung[6] für die Lage der inneren „Bandkanten" dieser Bänder. Aufgrund der Achsensymmetrie der Spektraldichten genügt es dazu eines der beiden Hubbard-Bänder zu betrachten (hier das obere Hubbard-Band). Zur Abschätzung der Lage der inneren Bandkante des oberen Hubbard-Bandes $\epsilon^{\mathrm{met}}_{\mathrm{OHB}}$ sucht man nach zwei benachbarten Stützstellen[7] ω_i und ω_{i+1} $(0 < \omega_i < \omega_{i+1})$ mit $\rho(\omega_i) \approxeq 0$ und $\rho(\omega_{i+1}) > 0$. $\epsilon^{\mathrm{OHB}}_{\mathrm{met}}$ muss dann zwischen diesen beiden Stützstellen liegen. Eine sinnvolle Abschätzung für $\epsilon^{\mathrm{met}}_{\mathrm{OHB}}$ ist daher

$$\epsilon^{\mathrm{met}}_{\mathrm{OHB}} = \frac{1}{2}(\omega_i + \omega_{i+1}) \ . \tag{3.13}$$

Der Fehler dieser Abschätzung ergibt sich zu

$$\Delta\epsilon^{\mathrm{OHB}}_{\mathrm{met}} = \frac{1}{2}(\omega_i - \omega_{i+1}) \ . \tag{3.14}$$

[6] Da es über das Abfallverhalten der inneren Bandkanten der beiden Hubbard-Bänder in der metallischen Phase derzeit keine Informationen gibt und die in dieser Arbeit herangezogenen Systemgrößen und Auflösungen nicht ausreichen um eindeutige Rückschlüsse hinsichtlich diesen Abfallverhalten zu ziehen, muss an dieser Stelle mit einer Abschätzung gearbeitet werden. Diese weist zwar gegenüber angefitteten Funktionen einen größeren Fehler auf, sie ist jedoch unvoreingenommen, da sie auf keine Annahmen angewiesen ist.

[7] Damit sind die Stützstellen gemeint, zu denen die verbreiterte Spektraldichte berechnet wird und nicht diejenigen, die man aus der kontrollierten Entfaltung mittels des Least-Bias-Algorithmus nachträglich bestimmt $(\widetilde{\omega}_j)$.

Die Lage der inneren Bankante des oberen Hubbard-Bandes zu Spektraldichten der isolierenden Lösungen $\epsilon_{\mathrm{OHB}}^{\mathrm{iso}}$ wird unmittelbar aus der Einteilchen-Anregungslücke bestimmen ($\epsilon_{\mathrm{OHB}}^{\mathrm{iso}} = \Delta/2$).

In der Abbildung 3.21 sind $\epsilon_{\mathrm{OHB}}^{\mathrm{met}}$ und $\epsilon_{\mathrm{OHB}}^{\mathrm{iso}}$ als Funktion der Wechselwirkungsstärke dargestellt. An die Datenpunkte von $\epsilon_{\mathrm{OHB}}^{\mathrm{met}}$ wird ein Polynom zweiter Ordnung in U angefittet um die Datenpunkte bis in den Bereich des Phasenübergangs zu extrapolieren. Trotz der recht groben Abschätzung von $\epsilon_{\mathrm{OHB}}^{\mathrm{met}}$ lässt sich die Vermutung hinsichtlich des stetigen Ineinandergehen der Lösungen am Übergang bestätigen. Man muss jedoch beachten, dass $\epsilon_{\mathrm{OHB}}^{\mathrm{met}}$ sich mit der Systemgröße geringfügig ändern kann (vgl. Abschnitt 3.1). Für eine genauere Untersuchung müssten die inneren Bandkanten der Spektraldichten besser aufgelöst werden. Desweiteren wäre eine weitere selbstkonsistent bestimmte Spektraldichte nahe am Übergang hilfreich, z. B. für $U = 2.9D$. Die Berechnung der selbstkonsistenten Spektraldichten nahe am Übergang erweist sich jedoch als sehr zeitintensiv, da man für eine Auflösung des schmallen Quasiteilchen-Peaks kleine Stützstellenabstände und Verbreiterungen verwenden und somit nach (2.21) größere Systeme heranziehen muss. Die Betrachtung größerer Systeme erfordert wiederum eine höhere Anzahl der für die Renormierung zu behaltenden Zustände m um eine hinreichend hohe Genauigkeit in der Bestimmung der dynamischen Größen zu gewährleisten.

Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde der von Raas und Uhrig erstellte, auf der dynamischen Dichtematrix-Renormierung (DMRG) basierende Störstellenlöser in einen iterativen Lösungsansatz zur Lösung von Gleichungen der dynamischen Molekularfeldtheorie (DMFT) integriert. Mit dessen Hilfe wurde dann der Mott-Hubbard Metall-Isolator-Übergang am halbgefüllten Einband-Hubbard-Modell auf einem Bethe-Gitter mit einer semielliptischen Zustandsdichte bei $T = 0$ im Rahmen der DMFT untersucht. Zur Entfaltung der für die numerische Berechnung und für die Simulation eines kontinuierlichen Spektrums notwendigerweise verbreiterten Spektraldichten wurde innerhalb des iterativen Selbstkonsistenzzyklus erstmals eine neue, von Raas und Uhrig entwickelte, nichtlineare Least-Bias-Entfaltung eingesetzt. Mittels dieser konnten Spektraldichten außerhalb der berechneten Stützstellen in einer kontrollierten Weise unter Berücksichtigung der Normierung und der Positiv-Semidefinitheit bestimmt werden. Die dabei entstandenden Entfaltungsartefakte innerhalb der Einteilchen-Anregungslücke und an den Intervallgrenzen konnten auf systematische Weise beseitigt werden. Des Weiteren wurden Konzepte zum Umgang mit der Grundzustandsentartung in der isolierenden Phase, zur Korrektur der Kettenbruchentwicklung in Anwesenheit einer Einteilchen-Anregungslücke und zum Umgang mit Pseudo-Lücken in der metallischen Phase entwickelt und erfolgreich umgesetzt.

Unter Verwendung des in dieser Arbeit realisierten iterativen Selbstkonsistenzzyklus wurden dynamische Einteilchen-Größen, darunter die (lokalen) Spektraldichten, Greenfunktionen und Selbstenergien für das zu untersuchende Einband-Hubbard-Modell sowohl in der metallischen als auch in der isolierenden Phase zu verschiedenen Wechselwirkungsstärken mit einer hohen Auflösung und Genauigkeit auf der gesamten Energieskala selbstkonsistent bestimmt. Aus diesen Größen wurde das Quasiteilchengewicht in der metallischen Phase und die Einteilchen-Anregungslücke in der isolierenden Phase als Funktion der Wechselwirkungsstärke ermittelt. Mittels der klassischen DMRG wurden zusätzlich die Grundzustandsenergien pro Gitterplatz und die mittleren Doppelbesetzungen des Einband-Hubbard-Modells zu den selbstkonsistenten Lösungen aus den Grundzustandserwartungswerten des effektiven Einstörstellen-Anderson-Modells im Falle der Selbstkonsistenz berechnet.

Die in dieser Arbeit selbstkonsistent bestimmten Spektraldichten der metallischen Phase weisen ein aus früheren numerischen und störungstheoretischen Untersuchungen bekanntes Ergebnis auf: Ausgehend von der semielliptischen Zustandsdichte konnte die mit zunehmender Wechselwirkungsstärke eintretende Verlagerung des Spektralgewichts zu den höheren Energien hin sowie die Ausbildung einer Drei-Peak-Struktur bestehend aus dem Quasiteilchen-Peak an der Fermienergie und den beiderseits der Fermienergie liegenden Hubbard-Bändern nachgewiesen werden. Die Übereinstimmung mit dem Luttinger-Theorem für lokale Fermiflüssigkeiten konnte anhand des Pinnig-Kriteriums und dem Verhalten der Selbstenergie in der Umgebung der Fermienergie verifiziert werden. In dem niederenergetischen Bereich der Spektraldichten wurde eine Übereinstimmung mit den Daten aus der NRG-DMFT festgestellt.

Für das Quasiteilchengewicht konnte eine stetige und monotone Abnahme mit der Wechselwirkungsstärke bis hin zu dessen Verschwinden bei $U_{\mathrm{c2}} = (3.06 \pm 0.1)D$ nachgewiesen werden.

In den Spektraldichten zu den Wechselwirkungsstärken nahe am Übergang konnten erstmals Unterstrukturen an den Innenseiten der beiden Hubbard-Bänder sowie eine Pseudo-Lücke zwischen diesen Bändern und dem Quasiteilchen-Peak aufgelöst werden, deren Ursache und Ursprung jedoch nicht geklärt werden konnten. Aus der Untersuchung dieser Unterstrukturen mittels Systemen zu verschiedenen Größen ließ sich die Schlußfolgerung ziehen, dass für eine genaue Bestimmung der Lage und Ausprägung dieser Unterstrukturen teilweise noch größere Systeme als die in dieser Arbeit eingesetzten herangezogen werden müssen.

Die selbstkonsistent bestimmten Spektraldichten der isolierenden Phase weisen zwei beiderseits der Fermienergie liegende strukturlose Hubbard-Bänder auf, die durch eine Einteilchen-Anregungslücke getrennt sind. In Übereinstimmung mit dem störungstheoretischen Ergebnis ließ sich ein Wurzel-Abfallverhalten der Spektraldichten an den inneren Bandkanten der beiden Hubbard-Bänder nachweisen. Für die Einteilchen-Anregungslücke konnte eine monotone und stetige Abnahme sowie ihr Verschwinden an der Wechselwirkungsstärke $U_{\mathrm{c1}} = (2.38 \pm 0.02)D$ bestimmt werden, das dem Potenzgesetz $\Delta(U) \propto (U - U_{\mathrm{c1}})^{\zeta}$ mit dem Exponenten $\zeta = 0.73 \pm 0.04$ gehorcht. Die Ergebnisse dieser Arbeit bestätigen die Existenz eines Koexistenzbereichs $U_{\mathrm{c1}} \leq U \leq U_{\mathrm{c2}}$, in dem sowohl die metallischen als auch die isolierenden Lösungen der DMFT-Gleichungen koexistieren.

Anhand der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz und der mittleren Doppelbesetzung konnte nachgewiesen werden, dass die metallische Phase die Grundzustandsphase innerhalb dieses Koexistenzbereichs bestimmt und der Metall-Isolator-Übergang bei $U_{\mathrm{c}} = U_{\mathrm{c2}} = (3.06 \pm 0.04)D$ stattfindet. Aus dem Verlauf dieser Größen als Funktion der Wechselwirkungsstärke wurde dieser Übergang eindeutig als ein Phasenübergang zweiter Ordnung charakterisiert. Dieses Ergebnis konnte erstmals anhand der Spektraldichten zu den koexisitierenden Lösungen innerhalb des Koexistenzbereichs, insbesondere anhand der Lage der inneren Bandkanten der beiden Hubbard-Bänder als Funktion der Wechselwirkungsstärke verifiziert werden. Die Ergebnisse dieser Arbeit bestätigen somit das Szenario eines diskontinuierlichen Übergangs.

Die hohe Auflösung der in dieser Arbeit eingesetzten numerischen Methode ermöglichte erstmals einen detaillierten Einblick in das gesamte Spektrum des hier betrachteten Einband-Hubbard-Modells und eine Auflösung von bis dahin nicht bekannten Details, insbesondere der Unterstrukturen an den Innenseiten der beiden Hubbard-Bänder. Diese Unterstrukturen gilt es in naher Zukunft genauer zu untersuchen und deren Ursache und Ursprung zu interpretieren. Des Weiteren soll der Störstellenlöser im Rahmen der DMFT für die Beschreibung von symmetriegebrochenen Phasen sowie der Multi-Orbitalmodelle erweitert werden, so dass man ihn beispielsweise zur Untersuchung des Einflusses von Ladungsfluktuationen auf die Untergittermagnetisierung in einer antiferromagnetisch geordneten Phase einsetzen kann.

Literaturverzeichnis

[1] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London Ser. A **276**, 238 (1963).

[2] J. Kanamori, Prog. Theor. Phys. **30**, 275 (1963).

[3] M. C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. **10**, 159 (1963).

[4] F. Gebhard, *The Mott Metall-Insulator Transition* (Springer, Tracts in Modern Physics Vol. 137, Berlin, 1997).

[5] N. F. Mott, Proc. Phys. Soc. A **62**, 416 (1949).

[6] W. Metzner und D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **62**, 324 (1989).

[7] E. Müller-Hartmann, Z. Phys. B **74**, 507 (1989).

[8] E. Müller-Hartmann, Z. Phys. B **76**, 211 (1989).

[9] E. Müller-Hartmann, Int. J. Mod. Phys. B **3**, 2169 (1989).

[10] Y. Kuramoto, C. I. Kim und T. Kasuya, Jpn. J. Appl. Phys. **26**, 459 (1987).

[11] T. Pruschke, M. Jarrel und J. K. Freericks, Adv. Phys. **44**, 187 (1995).

[12] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth und J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).

[13] P. W. Anderson, Phys. Rev. **124**, 41 (1961).

[14] M. Caffarel und W. Krauth, Phys. Rev. Lett. **72**, 1545 (1994).

[15] O. Sakai und Y. Kuramoto, Solid State Commun. **89**, 307 (1994).

[16] R. Bulla, Phys. Rev. Lett. **83**, 136 (1999).

[17] A. Georges und G. Kotliar, Phys. Rev. B **45**, 6479 (1992).

[18] X. Y. Zhang, M. J. Rozenberg und G. Kotliar, Phys. Rev. B **48**, 7167 (1993).

[19] M. Jarrell, Phys. Rev. Lett. **69**, 168 (1992).

[20] M. J. Rozenberg, X. Y. Zhang und G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **69**, 1236 (1992).

[21] S. Ramasesha, S. K. Pati, H. R. K. amd Z. Shuai und J. L. Brédas, Synthetic Metals **85**, 1019 (1997).

[22] T. D. Kühner und S. R. White, Phys. Rev. B **60**, 335 (1999).

[23] C. Raas, G. S. Uhrig und F. B. Anders, Phys. Rev. B **69**, 041102(R) (2004).

[24] C. Raas, *Spektraldichten des Einstörstellen-Anderson-Modells bei niedrigen und hohen Energien mittels dynamischer Dichtematrixrenormierung* (Dissertation, Universität zu Köln, 2005).

[25] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London A **281**, 401 (1964).

[26] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London A **277**, 237 (1964).

[27] M. Cyrot, Physica B **91**, 141 (1977).

[28] W. Langer, M. Plishke und D. Mattis, Phys. Rev. Lett. **23**, 1448 (1969).

[29] F. C. Zhang und T. M. Rice, Phys. Rev. B **37**, 3759 (1988).

[30] E. H. Lieb und F. Y. Wu, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968).

[31] F. D. M. Haldane, J. Phys. C **14**, 2585 (1981).

[32] W. F. Brinkman und T. M. Rice, Phys. Rev. B **2**, 4302 (1970).

[33] A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge University Press, Cambridge, 1993).

[34] V. S. Viswanath und G. Müller, *The Recursion Method* (Springer, Lecture Notes in Physics Vol. m23, Berlin, 1994).

[35] D. Vollhardt, *Proceedings of the Enrico Fermi School, Course CXXI* (edited by Broglia and Schrieffer, Amsterdam, 1994).

[36] A. L. Fetter und J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, New York, 1971).

[37] K. Hallberg, Phys. Rev. B **52**, 9827 (1995).

[38] E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics* (Springer, Series in Solid-State Sciences 7, Berlin, 1979).

[39] S. R. White und R. M. Noack, Phys. Rev. Lett. **68**, 3487 (1992).

[40] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1993).

[41] K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975).

[42] I. Peschel, K. Hallberg, X. Wang und M. Kaulke, *Density matrix renormalization: a new numerical method* (Springer, Lecture Notes in Physics Vol. 528, Berlin, 1999).

[43] P. A. Lee und D. S. Fisher, Phys. Rev. Letter **47**, 882 (1981).

[44] F. Zhang, *Matrix Theory, Basic Results and Techniques* (Springer, Berlin, 1999).

[45] M. R. Hestens und E. Stiefel, NBS J. Res. **49**, 409 (1952).

[46] P. Jordan und E. Wigner, Z. Phys. **47**, 631 (1928).

[47] R. Freund, SIAM J. Sci. Comput. **14**, 470 (1993).

[48] F. Gebhard, E. Jeckelmann, S. Mahlert, S. Nishimoto und R. Noack, Eur. Phys J. B **36**, 491 (2003).

[49] C. Raas und G. S. Uhrig, in Bearbeitung.

[50] H. Fischer und H. Kaul, *Mathematik für Physiker* (B.G. Teubner Verlag, Stuttgart, 2001).

[51] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vettering und B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C++* (Cambridge University Press, Cambridge, 2002).

[52] E. O. Brigham, *The fast Fourier transform* (Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1974).

[53] D. G. Pettifor und D. L. Weaire, *The Recursion Method and Its Applications* (Springer, Series in Solid-State Sciences 58, Berlin, 1985).

[54] J. M. Luttinger, Phys. Rev. **119**, 1153 (1960).

[55] J. M. Luttinger, Phys. Rev. **121**, 942 (1961).

[56] S. Nishimoto, F. Gebhard und E. Jeckelmann, cond-mat/0406666 (2004).

[57] R. Bulla, private Korrespondenz.

[58] D. J. Garcia, K. Hallberg und M. J. Rozenberg, cond-mat/0403169 (2004).

[59] R. Bulla, A. C. Hewson und T. Pruschke, J. Phys. Condensed Matter **10**, 8365 (1998).

[60] M. P. Eastwood, F. Gebhard, E. Kalinowski, S. Nishimoto und R. M. Noack, Eur. Phys. J **35**, 155 (2003).

[61] E. Jeckelmann, Phys. Rev. B **66**, 045114 (2002).

[62] C. Raas, private Mitteilung.

[63] R. M. Noack und F. Gebhard, Phys. Rev. Lett. **82**, 1915 (1999).

[64] J. Schlipf, M. Jarrel, P. G. J. van Dongen, N. Blümer, S. Kehrein, T. Pruschke und D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **82**, 4890 (1999).

[65] M. J. Rozenberg, R. Chitra und G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **83**, 3498 (1999).

[66] W. Krauth, Phys. Rev. B **62**, 6860 (2000).

[67] R. Bulla, T. A. Costi und D. Vollhardt, Phys. Rev. B **64**, 045103 (2001).

[68] S. Kehrein, Phys. Rev. Lett. **81**, 3912 (1998).

[69] G. Moeller, Q. Si, G. Kotliar, M. J. Rozenberg und D. S. Fisher, Phys. Rev. Lett. **74**, 2082 (1995).

[70] N. Blümer und E. Kalinowski, cond-mat/0407442 (2004).

[71] R. Bulla und M. Potthoff, Eur. Phys. J. B. **13**, 257 (2000).

[72] M. J. Rozenberg, G. Kotliar und X. Y. Zhang, Phys. Rev. B **49**, 10181 (1994).

[73] D. E. Logan, M. P. Eastwood und M. A. Tusch, J. Phys. Condensed Matter **9**, 4211 (1997).

Danksagung

Ich möchte mich an dieser Stelle herzlich bei Prof. Dr. Müller-Hartmann und Priv.-Doz. Dr. Götz S. Uhrig für die Vergabe und Betreuung dieser Arbeit bedanken. Mein Dank gilt auch Carsten Raas für die Bereitstellung des Störstellenlösers, die hilfreichen Diskussionen zur dynamischen DMRG und die kritische Durchsicht dieser Arbeit. Sandra Heyn und Kai Schmidt möchte ich ebenfalls für das Korrekturlesen dieser Arbeit danken. Ein besonderer Dank gilt meinen Eltern und Geschwistern, die mich während meines Studiums stets unterstützt haben.

Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass die vorliegende Arbeit von mir selbstständig angefertigt wurde und außer den angegebenen Quellen keine weiteren Hilfsmittel benutzt wurden.

Michał Karski