

Arbeit zur Erlangung des akademischen Grades
Master of Science

**Iterierte Bewegungsgleichungen für
das Einstörstellen-Andersonmodell bei
allgemeiner Füllung**

Sinja Behrensmeier
geboren in Werdohl

2022

Lehrstuhl für Theoretische Physik I
Fakultät Physik
Technische Universität Dortmund

Erstgutachter: Prof. Dr. Götz S. Uhrig
Zweitgutachter: Prof. Dr. Frithjof Anders
Abgabedatum: 22. März 2022

Kurzfassung

Das Einstörstellen-Andersonmodell beschreibt eine Störstelle in einem Metall. Es wird häufig für Untersuchungen Kondo-effektartiger Phänomene und stark korrelierter Systeme wie schwere Fermionen genutzt. In dieser Arbeit wird das Einstörstellen-Andersonmodell mithilfe der Methode der iterierten Bewegungsgleichungen betrachtet, in der die Basisoperatoren orthonormal unter dem Frobenius Skalarprodukt sind. Es wird bei einer Temperatur von $T = 0$ sowohl das symmetrische als auch das asymmetrische Modell für den Fall einer unendlichen und endlichen Coulomb Wechselwirkung im Breitbandlimit betrachtet. Die Basis wird auf 6 Basisoperatoren trunziert. Mit dieser Methode lässt sich die Besetzungszahl der Störstellenelektronen approximieren. Die Hubbardsatelliten sind an den erwarteten Stellen in der Spektraldichte zu finden. Der Kondo Peak lässt sich mit der Basis nicht berechnen. In der Spektraldichte sind Ausreißer mit analytischem Ursprung zu erkennen. In weiterführenden Analysen könnte mit einer größeren Basis die Genauigkeit der Ergebnisse verbessert werden.

Abstract

The single impurity Anderson model describes a perturbation in a metal. It is often used for studies of Kondo effect-like phenomena and strongly correlated systems such as heavy fermions. In this thesis, the single impurity Anderson model is considered using the method of iterated equations of motion in which the basis operators are orthonormal under the Frobenius scalar product. Both the symmetric and asymmetric models are considered at a temperature of $T = 0$ for an infinite and finite Coulomb interaction in the wide band limit. The basis is truncated to 6 basis operators. Using this method, the occupation number of the impurity electrons can be calculated approximately. The Hubbard satellites are found at the expected locations in the spectral density. The Kondo peak cannot be calculated by means of this basis. Outliers with analytical origin can be seen in the spectral density. In further analyses, the accuracy of the results can be improved by using a larger basis.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Einstörstellen-Andersonmodell	5
3	Methode der iterierten Bewegungsgleichungen	11
3.1	Zeitabhängigkeit der Operatoren	11
3.2	Basis	12
3.3	Liouville Matrix des SIAM	14
4	Erwartungswerte	16
4.1	Erwartungswert der Besetzungszahl	19
4.2	Berechnung der Funktion $w(k)$	22
4.3	Überlegungen zur Funktion $H(x)$	32
5	Berechnungen der Integrale	35
5.1	Analytische Betrachtung der Hybridisierungsfunktion	35
5.2	Numerische Berechnungen von Integralen	36
6	Ergebnisse	38
6.1	Verschwindende Coulomb Wechselwirkung	39
6.2	Symmetrischer Fall	39
6.3	Näherung der Funktion $w(k)$ als konstant	41
6.4	Endliche Coulomb Wechselwirkung	46
6.5	Grenzwert bei unendlicher Coulomb Wechselwirkung	58
7	Zusammenfassung und Ausblick	62
A	Berechnung der Liouville Matrix	64
B	Berechnung der Vektoren \vec{p}	70
C	Berechnung der benötigten Elemente der Resolvente	72
	Literatur	78

1 Einleitung

Metalle sind Materialien, die elektrischen Strom leiten können. Sie besitzen eine Gitterstruktur aus Atomen. Die äußeren Elektronen der Atome können sich quasi frei innerhalb des Gitters bewegen und werden als Valenz- oder Leitungselektronen bezeichnet [1]. Die positiv geladenen Ionen, also die Atomrümpfe, die den Atomkern und die inneren Elektronen beinhalten, sind gitterförmig angeordnet. Eine schematische Darstellung der Gitterstruktur ist in Abbildung 1.1 dargestellt.

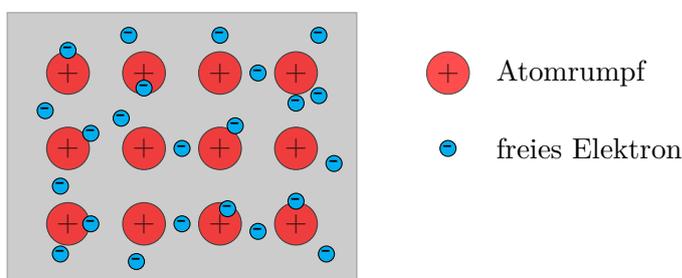


Abbildung 1.1: Zweidimensionale, schematische Darstellung der Gitterstruktur von Metall.

Fermionen sind Teilchen mit halbzahligem Spin, wobei der Spin den Eigendrehimpuls eines Teilchens beschreibt. Elektronen können einen Spin von $\frac{1}{2}$ besitzen und sind damit fermionische Teilchen. Der Spin kann zwei verschiedene Ausrichtungen in z-Richtung annehmen, nämlich $+\frac{1}{2}$ (\uparrow) und $-\frac{1}{2}$ (\downarrow). Elektronen unterliegen dem Pauli Prinzip, welches besagt, dass zwei Fermionen in einem System nie in allen Quantenzahlen übereinstimmen können [2]. Quantenzahlen kennzeichnen dabei Eigenschaften des Teilchens. Ein Beispiel für eine solche Zahl ist der Spin. Ein System im Grundzustand besitzt die niedrigste mögliche Energie, die das System erreichen kann. Da bei einem System aus vielen Elektronen aufgrund des Pauli Prinzips nicht alle Elektronen die gleiche Energie haben können, müssen einige Elektronen einen energetisch höheren Zustand einnehmen. Die Fermi-Energie E_f gibt die maximale Energie an, die ein Elektron besitzt, wenn sich das gesamte System im Grundzustand befindet [3].

Damit elektrischer Strom durch ein Metall fließen kann, muss eine elektrische Spannung angelegt werden. Durch die Spannung bewegen sich die freien Elektronen

1 Einleitung

in die entgegengesetzte Feldrichtung. Die freien Elektronen stoßen dabei mit Verunreinigungen in dem Metall und Phononen zusammen. Diese Stöße sind primär für den spezifischen Widerstand eines Metalls verantwortlich [1, 3]. Phononen sind Gitterschwingungen im Metall. Diese Schwingungen nehmen bei niedriger werdenden Temperaturen ab und verschwinden bei $T = 0$. Daher sinkt in den meisten Metallen der Widerstand mit sinkender Temperatur bis zu einem Restwiderstand bei $T = 0$ ab, welcher nur noch durch Kollisionen der freien Elektronen mit den Verunreinigungen hervorgerufen wird [3]. Sind die Verunreinigungen im Metall aber magnetisch, kann sich bei tiefen Temperaturen ein ungewöhnliches Verhalten zeigen. Der Widerstand sinkt bis zu einer bestimmten, niedrigen Temperatur ab und steigt anschließend wieder stark an [4]. Bereits 1934 wurde bei niedrigen Temperaturen ein Widerstandsminimum in Gold entdeckt [5]. Dieses Minimum ist in Abbildung 1.2 dargestellt. Das Phänomen ließ sich zu der Zeit jedoch noch nicht erklären. Dazu fehlte damals das Konzept nahezu lokalisierter Zustände, die durch Resonanzstreuung an der Verunreinigungsstelle entstehen [4].

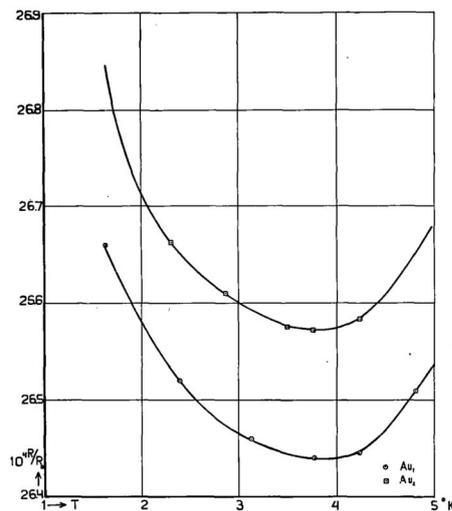


Abbildung 1.2: Widerstandsminimum in Gold bei kleinen Temperaturen [5].

Ein Modell, welches sich mit diesem Problem befasst, wurde 1961 von Philip Warren Anderson aufgestellt und ist als das Andersonmodell bekannt [6]. In dem Modell werden die Valenzelektronen eines Metalls durch ein Elektronenbad dargestellt, dessen Elektronen untereinander nicht wechselwirken. In dem Elektronenbad liegen Störstellen, die die magnetischen Verunreinigungen darstellen. Die Störstellenelektronen wechselwirken sowohl mit den Badelektronen als auch untereinander. Die Wechselwirkung zwischen den Störstellenelektronen wird für die Erklärung von stark lokalisierten, magnetischen Momenten benötigt, die durch Streuung an der Störstelle

hervorgerufen werden.

Ein weiteres Modell, welches sich mit dem Problem befasst, ist das s-d-Modell [7]. Es geht von einem bereits vorhandenen lokalen magnetischen Moment aus, das durch Spins repräsentiert wird, die mit der Wechselwirkung J an die Leitungselektronen koppeln. Für bestimmte Parameter entspricht das s-d-Modell dem Andersonmodell.

1964 gab Jun Kondo mit dem s-d-Modell eine Erklärung für das Widerstandsminimum [8]. Er betrachtete die Streuwahrscheinlichkeit der Leitungselektronen unter der zweiten Bornschen Näherung und entdeckte, dass eine singuläre Streuung der Leitungselektronen nahe der Fermi-Energie einen Beitrag zum spezifischen Widerstand liefert, der logarithmisch in der Temperatur T ist. Für eine antiferromagnetische Kopplung ($J < 0$) nimmt dieser Beitrag für kleiner werdende Temperaturen zu. Antiferromagnetisch bedeutet, dass die energetisch günstigste Ausrichtung der magnetischen Momente antiparallel ist, also dass Momente abwechselnd einander entgegengesetzt ausgerichtet sind: $\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow$. Zusammen mit dem Gitterwiderstand, der aus den Gitterschwingungen resultiert, lässt sich damit das Widerstandsminimum erklären [8]. Durch die logarithmische Temperaturabhängigkeit divergiert diese Lösung für $T \rightarrow 0$ gegen Unendlich. Dieses Problem ist als das "Kondo Problem" bekannt [4]. In dem Buch "The Kondo Problem to Heavy Fermions" [4] fasste Alexander C. Hewson 1993 bereits viele Ergebnisse des Kondo Problems zusammen.

P. B. Wiegmann und A. M. Tsvelick zeigen in Ref. [9], dass das Andersonmodell mit einer unendlichen Coulomb-Abstoßung $U = \infty$ komplett integrierbar ist und mithilfe des Bethe Ansatzes [10] exakt gelöst werden kann. In einigen theoretischen Arbeiten wird der einfache Fall $U = \infty$ diskutiert [11, 12]. In diesen Arbeiten wird auch das entartete Andersonmodell betrachtet, in dem die Orbitalstruktur des Störeelektrons, im Gegensatz zum nicht entarteten Andersonmodell, mit berücksichtigt wird. Es wurden auch Lösungen für endliche U berechnet, ebenfalls mithilfe des Bethe Ansatzes [13].

Das Andersonmodell, besonders mit nur einer Störstelle, wurde auch mit vielen anderen Methoden betrachtet, welche jeweils ihre Vor- und Nachteile haben. Bei den numerischen Methoden ist die Genauigkeit der Ergebnisse durch die Leistung des Computers begrenzt. Numerische Methoden, die häufiger bei Störstellenproblemen genutzt werden, sind zum Beispiel exakte Diagonalisierungen [14], numerische Renormierungsgruppen (NRG, engl. numerical renormalisation group) [15, 16, 17] oder Monte-Carlo Methoden [18]. Das N -fach entartete Andersonmodell wurde mit einer $1/N$ -Expansion betrachtet. Ergebnisse hierzu werden in dem Paper [12] von J. W. Rasul und Hewson mit den Werten des Bethe Ansatzes verglichen. Eine eher analytische Methode ist die Methode der iterierten Bewegungsgleichungen (iEoM, engl. iterated equation of motion). Sie wurde schon oft in unterschiedlichen

Varianten genutzt, um das Andersonmodell [19, 20, 21] sowie auch andere Modelle, zum Beispiel das Hubbard Modell [22], zu betrachten.

Das Andersonmodell wird häufig für Untersuchungen Kondo-effektartiger Phänomene und stark korrelierter Systeme wie schwere Fermionen genutzt [4]. In einem stark korrelierten System ist der Zustand eines Teilchens im System stark von den Zuständen der anderen Teilchen abhängig. Auch im Bereich von Quanteninformati-
onen, wie zum Beispiel bei der Untersuchung von Quantenpunkten [23], spielt das Andersonmodell eine Rolle.

In dieser Masterarbeit wird die Methode der iterierten Bewegungsgleichungen genutzt, um die Spektraldichte sowie die Besetzungszahl der Störstellenelektronen des Einstörstellen-Andersonmodells zu berechnen. Im Unterschied zu anderen Untersuchungen des Andersonmodells mit der Methode der iEoM wird hier eine trunkierte Operatorbasis genutzt, die orthonormal unter dem Frobenius Skalarprodukt ist [22, 24, 25]. Dazu wird in Kapitel 2 das Einstörstellen-Andersonmodell dargestellt. In Kapitel 3 wird das Konzept der Methode der iEoM erklärt, die Zeitabhängigkeit der Operatoren sowie die orthonormierte Operatorbasis berechnet und die Liouville Matrix aufgestellt. Die analytischen Berechnungen zu der Besetzungszahl der Störstellenelektronen und damit auch die Berechnungen zu ihrer Spektraldichte sind in Kapitel 4 dargestellt. Da in diesen Berechnungen Integrale auftauchen, die analytisch nicht lösbar sind, müssen diese mit numerischen Methoden berechnet werden. Ansätze und genutzte Funktionen für diese Berechnungen sind in Kapitel 5 beschrieben. Die Ergebnisse der Berechnungen sind in Kapitel 6 für verschiedene Fälle dargestellt.

2 Einstörstellen-Andersonmodell

Das Andersonmodell [6] beschreibt magnetische Störstellen in Metallen. In dem Modell werden die Leitungselektronen des Metalls durch ein Elektronenbad beschrieben, dessen Elektronen untereinander nicht wechselwirken und in dem sich Störstellen befinden, die von den Störstellenelektronen besetzt werden. Die orbitale Struktur dieser Störstellenelektronen lässt sich mithilfe des N -fach entarteten Andersonmodells berücksichtigen [13]. Das nicht-entartete Andersonmodell beschreibt den vereinfachten Fall, in dem diese Struktur vernachlässigt wird. An einer Störstelle dürfen hier aufgrund des Pauli Prinzips maximal zwei Elektronen sitzen, eines mit Spin \uparrow und eines mit Spin \downarrow . Das nicht-entartete Andersonmodell entspricht für $N = 2$ dem entarteten Modell. Beide Modelle wurden bereits oft untersucht und mit dem Bethe Ansatz exakt gelöst [4, 11, 26]. In dieser Arbeit wird das nicht-entartete Andersonmodell betrachtet.

Der einfachste Fall des Modells ist das Einstörstellen-Andersonmodell (SIAM, engl. single impurity anderson model), welches genau eine Störstelle in dem Elektronenbad beschreibt. Im Folgenden wird davon ausgegangen, dass sich die Störstelle in der Mitte des Bades befindet. Eine schematische Darstellung des Systems mit sternförmiger Topologie ist in Abbildung 2.1 zu finden. Das rote Quadrat kennzeichnet die Störstelle in der Mitte des Systems, auf der maximal zwei Elektronen mit unterschiedlichem Spin sitzen dürfen. Diese Störstellenelektronen wechselwirken miteinander mit der Wechselwirkung U . Die blauen Punkte stellen die Badelektronen dar, welche jeweils die Energie ϵ_k besitzen und mit der Wechselwirkung V_k mit den Störstellenelektronen, nicht aber untereinander, interagieren. Der Hamiltonoperator für das nicht-entartete SIAM in zweiter Quantisierung lautet [13]

$$\begin{aligned} H &= H_{\text{Host}} + H_{\text{Imp}} + H_{\text{Hybr}} + H_U \\ &= \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} + \epsilon_f \sum_{\sigma} f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} + \sum_{k,\sigma} V_k (c_{k,\sigma}^\dagger f_{\sigma} + \text{h.c.}) + U f_{\uparrow}^\dagger f_{\uparrow} f_{\downarrow}^\dagger f_{\downarrow}. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Der Index k kennzeichnet das Badlevel der Leitungselektronen und reicht von $k = -D$ bis $k = D$. Der Index σ kennzeichnet den Spin. Die Badelektronen werden durch die Erzeuger- und Vernichter Operatoren $c_{k,\sigma}$, $c_{k,\sigma}^\dagger$ und die Störstellenelektronen ("f-Elektronen") durch f_{σ} , f_{σ}^\dagger dargestellt [13].

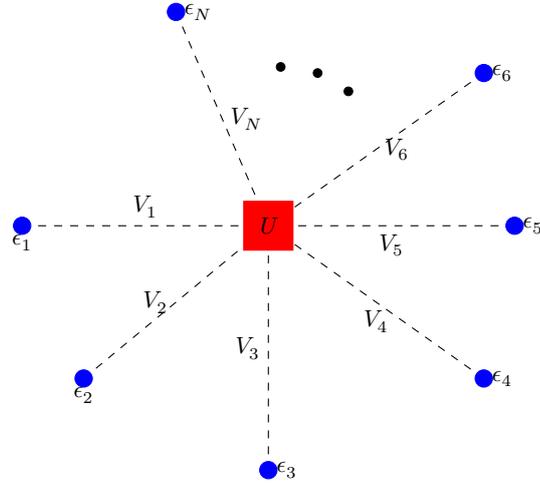


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung des SIAMs mit sternförmiger Topologie. Die blauen Punkte kennzeichnen die Badelektronen mit Energie ϵ_k , welche mit der Wechselwirkung V_k mit den Störstellenelektronen auf der Störstelle (rotes Quadrat) wechselwirken. Die Störstellenelektronen wechselwirken untereinander mit der Wechselwirkung U .

Der Term

$$H_{\text{Host}} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma}$$

beschreibt das Elektronenbad, wobei ϵ_k der Energie des k -ten Badelektrons im freien Zustand entspricht und die Dichte der Badelektronen als konstant angenommen wird [6]. Die Störstellenelektronen werden durch den Term

$$H_{\text{Imp}} = \epsilon_f \sum_{\sigma} f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma}$$

beschrieben und ϵ_f entspricht der ungestörten Energie eines Zustandes auf der Störstelle [6]. Die Wechselwirkung zwischen den Bad- und Störstellenelektron wird durch den "Hüpfterm"

$$H_{\text{Hybr}} = \sum_{k,\sigma} V_k (c_{k,\sigma}^\dagger f_{\sigma} + \text{h.c.})$$

beschrieben. Dabei gibt das Matrixelement V_k die Hybridisierung der Bad- und f -Elektronen an, d.h. mit bestimmter Amplitude können sich Badelektronen zu f -Elektronen umwandeln und andersherum [6]. Der Term

$$H_U = U f_{\uparrow}^\dagger f_{\uparrow} f_{\downarrow}^\dagger f_{\downarrow}$$

beschreibt die Coulomb-Abstoßung auf dem Störstellenorbital [13].

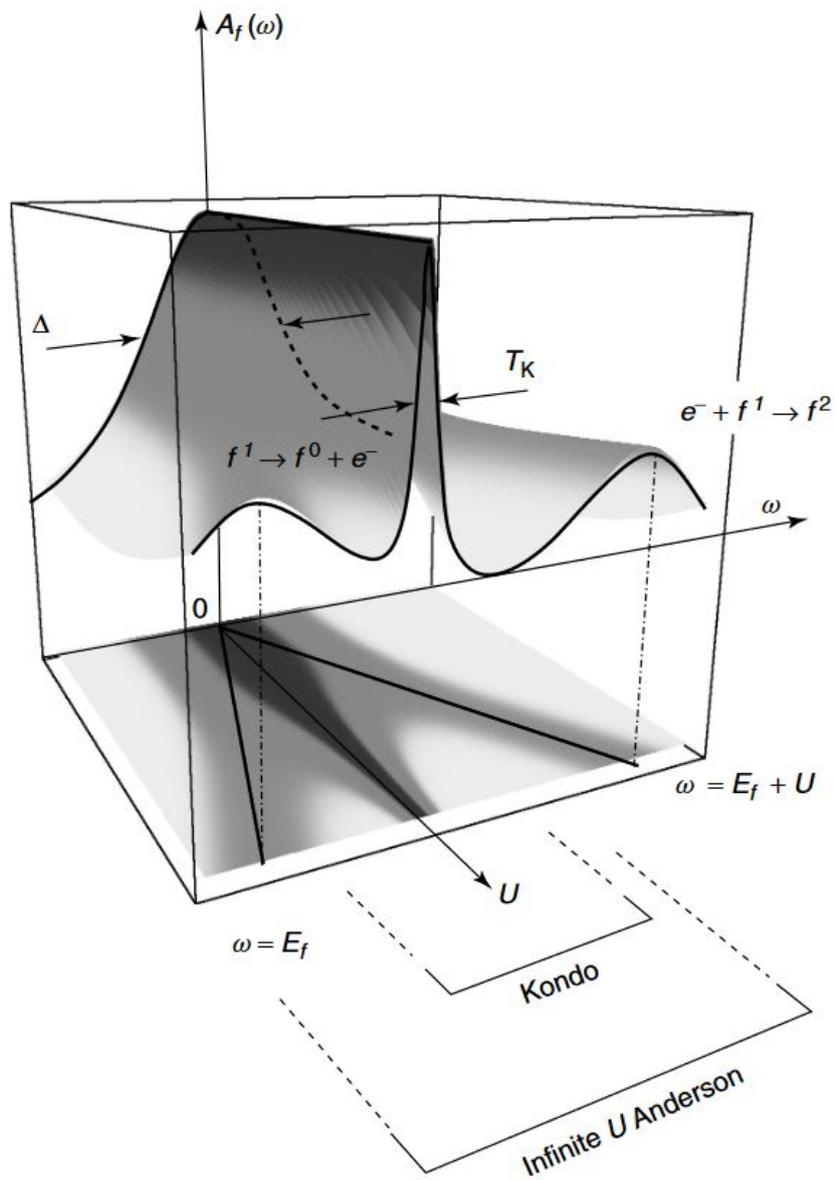


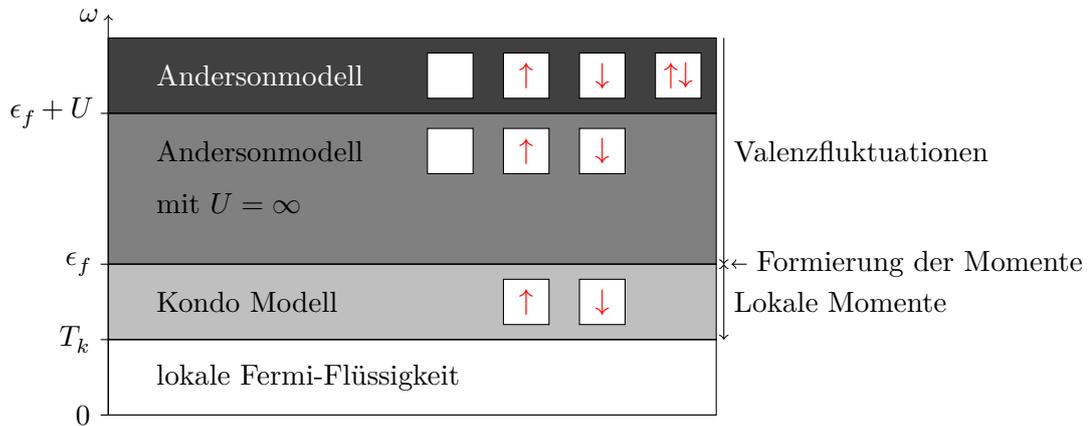
Abbildung 2.2: Schematische Darstellung der Spektralfunktion $A_{f f^\dagger}(\omega)$ der f -Elektronen in Abhängigkeit von ω und U [15]. E_f entspricht hier der ungestörten Energie eines Zustandes auf der Störstelle (im Text ϵ_f). T_k ist die Kondo Temperatur und Δ die Halbwertsbreite der Lorentzkurve bei $U = 0$. Ein doppelt besetzter Zustand auf der Störstelle wird durch f^2 dargestellt, einfache Besetzung durch f^1 und ein unbesetzter Zustand durch f^0 . Ein freies Elektron wird durch e^- dargestellt.

2 Einstörstellen-Andersonmodell

Da die Energien im Andersonmodell immer im Vergleich zu der Fermi-Energie betrachtet werden, wird in dieser Arbeit die Fermi-Energie der Einfachheit halber gleich Null gesetzt.

In der Abbildung 2.2 ist die Spektraldichte der f-Elektronen in Abhängigkeit von ω und U dargestellt [15]. Für eine verschwindende Wechselwirkung zwischen den Störstellenelektronen, also $U = 0$, bildet die Spektraldichte eine um $\omega = 0$ zentrierte Lorentzkurve mit der Breite γ aus. Wird U erhöht, teilt sich die Kurve in zwei Kurven auf, die um $\omega = \epsilon_f$ und $\omega = \epsilon_f + U$ zentriert sind. Dies sind die sogenannten Hubbard Satelliten. Auch für ansteigende U ist im Bereich um $\omega = 0$ ein Peak zu erkennen, der sogenannte Kondo Peak, dessen Halbwertsbreite proportional zur Kondo Temperatur T_k ist.

Abbildung 2.3: Schematische Darstellung der Energiebereiche des SIAMs nach Coleman [15].



Im SIAM lassen sich verschiedene Energiebereiche beobachten. Für Energien im Bereich $\omega > \epsilon_f + U$ sind Nicht-, Einfach- und Doppelbesetzung (bei zwei Elektronen mit unterschiedlichen Spins) an der Störstelle erlaubt. Ab einer Energie von $\omega = \epsilon_f + U$ oder kleiner wird der Übergang zur Doppelbesetzung verboten, da die Energie, die benötigt wird, um ein zweites Elektron an der Störstelle hinzuzufügen, nun nicht mehr aufgebracht werden kann. Dies entspricht dem Limes der unendlichen Wechselwirkung $U \rightarrow \infty$, bei der die Wechselwirkung zwischen den f-Elektronen so groß ist, dass sich an der Störstelle nur noch ein oder kein Elektron befinden kann. Der Bereich von Energie $\omega \approx |\epsilon_f|$ ist der Kondo Bereich. Hier wird auch der nichtbesetzte Zustand an der Störstelle verboten, es gibt also keine Valenzfluktuationen mehr, und es bilden sich lokale Momente aus. Bei Energien, die kleiner als die Kondo Temperatur T_k sind, wird das lokale Moment abgeschirmt, sodass sich eine Fermi-Flüssigkeit bildet [15]. Die Energiebereiche sind in der Abbildung 2.3 schematisch

dargestellt.

Die Besetzungszahl der Störstelle n_f des Andersonmodells wird oft mithilfe eines renormierten Energielevels ϵ_f^* dargestellt, um die Besetzungszahl unabhängig von den Energieparametern D , γ und im Falle endlicher Coulomb Wechselwirkungen auch unabhängig von U darstellen zu können. In den Papern [12] und [13] werden die Besetzungszahlen der Störstelle für $U = \infty$, beziehungsweise für allgemeine U in Abhängigkeit des renormierten Energielevels berechnet. Beide Ergebnisse sind in der Grafik 2.4 dargestellt. Hier wird n_f gegen $\frac{\epsilon_f^*}{N_f \gamma}$ geplottet, wobei N_f die maximale Anzahl an Elektronen auf der Störstelle angibt. In dieser Arbeit gilt also $N_f = 2$.

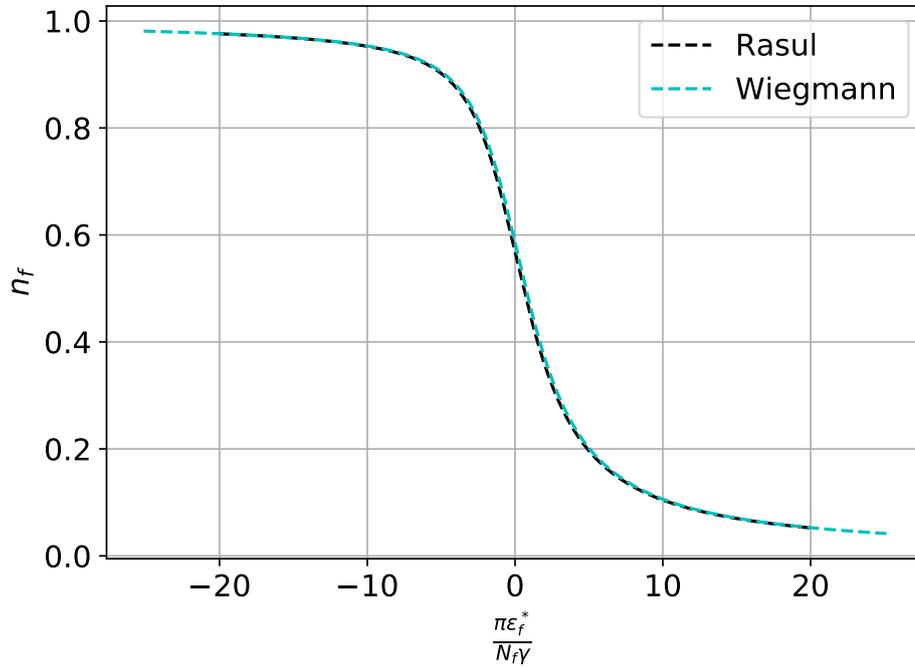


Abbildung 2.4: Darstellung der Besetzungszahl n_f aus den Papern [12] und [13] gegen das renormierte Energielevel $\frac{\epsilon_f^*}{N_f \gamma}$.

Die Ergebnisse aus dem Paper von Wiegmann [13] gelten für das asymmetrische SIAM bei $T = 0$, d.h. in den Bereichen

$$2\epsilon_f + U \gg \sqrt{U\gamma}, \quad |\epsilon_f| \ll U, \quad \text{und} \quad U \gg \gamma. \quad (2.2)$$

Die Ergebnisse aus dem Paper von Rasul [12] gelten für $U = \infty$. Die in dieser Arbeit berechneten Werte werden mit denen aus diesen beiden Papern verglichen.

Die Renormierung für ϵ_f wird für unterschiedliche Parameterbereiche verschieden gewählt. Wenn das Leitungsband groß ist, sodass die Relation $|\epsilon_f|, |\epsilon_f + U| \ll D$ erfüllt ist, gibt es keine signifikante Renormierung [4], hier gilt also

$$\epsilon_f \approx \epsilon_f^*. \quad (2.3)$$

Dieser Fall wird in dieser Arbeit betrachtet. Renormierung tritt beispielsweise dann auf, wenn die Wechselwirkung U größer gewählt wird, sodass $\epsilon_f + U \gg D$ und $|\epsilon_f| \leq D$ gilt. In diesem Energiebereich tritt eine Vielteilchen-Renormierung aufgrund der hohen Wechselwirkung auf [4]. Für $\gamma \ll D$ lässt sich die Renormierung berechnen nach [4]

$$\epsilon_f^* = \epsilon_f + \frac{\gamma}{\pi} \log\left(\frac{\pi D}{2\gamma}\right). \quad (2.4)$$

Ein Spezialfall des SIAMs ist das symmetrische SIAM. Es gilt $\epsilon_f = -\frac{U}{2}$ und es liegt Halbfüllung vor, also gilt $\langle n_\sigma \rangle = 0,5$. Abseits des symmetrischen SIAMs wirkt ein chemisches Potential $\mu \neq 0$ und die Energie ϵ_f lässt sich beschreiben durch

$$\epsilon_f = -\frac{U}{2} - \mu. \quad (2.5)$$

Mithilfe der linearen Antworttheorie lässt sich die Auswirkung einer kleinen Störung auf ein System bestimmen. Die Antwort des Systems auf die Störung ist dabei durch die retardierte Greenfunktion gegeben [27]. Die retardierte Greenfunktion der f-Elektronen des SIAMs lautet

$$G_{f_\sigma f_\sigma^\dagger}^{\text{ret}}(t) = -\frac{i}{\hbar} \langle \{f_\sigma(t), f_\sigma^\dagger\} \rangle \Theta(t) \quad (2.6)$$

und wird im Folgenden dazu genutzt, die Spektraldichte und die Besetzungszahl der Störstellenelektronen zu berechnen. Die Funktion $\Theta(t)$ entspricht dabei der Heaviside Funktion, $\langle \dots \rangle$ dem Erwartungswert und $\{.,.\}$ dem Antikommutator.

3 Methode der iterierten Bewegungsgleichungen

In diesem Kapitel wird die Methode der iterierten Bewegungsgleichungen erklärt. Das Ziel ist es, eine geeignete Darstellung der Zeitabhängigkeit der Operatoren in der retardierten Greenfunktion der f-Elektronen zu finden, um die Greenfunktion anschließend berechnen zu können. Die Greenfunktion der f-Elektronen ist in der Gleichung (2.6) dargestellt.

3.1 Zeitabhängigkeit der Operatoren

Ein Operator $C_H(t)$ im Heisenberg-Bild lässt sich nach der Gleichung [28]

$$C_H(t) = \hat{U}^\dagger(t) C_s \hat{U}(t) \quad (3.1)$$

aus dem Operator im Schrödinger-Bild C_S berechnen, wobei $\hat{U}(t)$ der unitäre Zeitentwicklungsoperator ist. Die Zeitabhängigkeit eines Operators $C_H(t)$ im Heisenberg-Bild wird mithilfe der Heisenbergschen Bewegungsgleichungen bestimmt [28]

$$\frac{d}{dt} C_H(t) = i[H_H(t), C_H(t)] = i\mathcal{L}(C_H(t)), \quad (3.2)$$

wobei der Liouville Operator $\mathcal{L}(x)$ die Kommutation von dem Operator x mit dem Hamiltonoperator beschreibt. Lässt sich die Zeitabhängigkeit des Operators $C(t)$ (der Index H für Heisenberg-Bild wird ab hier weggelassen) vollständig durch Vorfaktoren $h_i(t)$ beschreiben, kann der Operator mithilfe einer geeigneten Basis W_i geschrieben werden als [24]

$$C(t) = \sum_i W_i h_i(t). \quad (3.3)$$

Nach Gleichung (3.2) lässt sich nun die Zeitabhängigkeit bestimmen zu

$$\frac{d}{dt} C(t) = i\mathcal{L}(C(t)) = i\vec{W} \frac{d}{dt} \vec{h}(t), \quad (3.4)$$

wobei die Vektoren \vec{W} und $\vec{h}(t)$ die einzelnen Komponenten W_i und $h_i(t)$ beinhalten. Mithilfe der sogenannten Liouville Matrix \mathbf{M}

$$\mathcal{L}(W_i) = \sum_j M_{ji} W_j \quad (3.5)$$

kann die Zeitabhängigkeit geschrieben werden als

$$\frac{d}{dt}\vec{h}(t) = i\mathbf{M}\vec{h}(t) \Rightarrow \vec{h}(t) = e^{i\mathbf{M}t}\vec{h}(t=0). \quad (3.6)$$

Der Operator im Heisenberg-Bild muss für $t = 0$ nach $C_H(t=0) = C_S$ dem Operator im Schrödinger-Bild entsprechen. Daher stimmt $\vec{h}(t=0)$ mit dem i -ten Einheitsvektor überein, wenn C_S proportional zum i -ten Element der Basis ist, also

$$\vec{h}(t=0) = \vec{e}_C, \text{ mit } (\vec{e}_C)_i = \begin{cases} 1, & C(t=0) \sim W_i \\ 0, & C(t=0) \not\sim W_i \end{cases}. \quad (3.7)$$

Nun lässt sich der Operator $C(t)$ schreiben als

$$C(t) = \vec{W}^T e^{i\mathbf{M}t} \vec{e}_C. \quad (3.8)$$

Für einen komplex konjugierten Operator gilt

$$C^\dagger(t) = \vec{e}_{C^\dagger}^\dagger e^{-i\mathbf{M}t} \vec{W}^\dagger{}^T. \quad (3.9)$$

Bei einem zeitunabhängigen Hamiltonoperator ist der Zeitentwicklungsoperator $U(t) = e^{-iHt}$ unitär. Die Ergebnisse $\vec{h}(t)$ sind Superpositionen von Oszillationen, deren Frequenzen die Eigenenergien sind. Bei einem Wechsel in das Heisenberg-Bild sollte eine Zeitentwicklung ebenfalls zu solchen Ergebnissen führen. Um dies zu gewährleisten, muss \mathbf{M} diagonalisierbar mit reellen Eigenwerten sein. Eine mögliche aber nicht erforderliche Bedingung dafür ist, dass \mathbf{M} hermitesch ist, also $\mathbf{M} = \mathbf{M}^\dagger$ gelten muss [22].

Um dies zu erreichen, wird eine orthonormale Basis im Bezug auf das Frobenius Skalarprodukt betrachtet. Für zwei Operatoren x und y lautet es

$$(x|y)_{\text{Fr}} = \mathcal{N} \text{Tr}(x^\dagger y), \quad \mathcal{N} := \frac{1}{\text{Tr}\mathbb{1}}. \quad (3.10)$$

Damit gilt für die Liouville Matrix

$$M_{ij} = (W_j | \mathcal{L}(W_i))_{\text{Fr}}. \quad (3.11)$$

3.2 Basis

Um die Liouville Matrix und damit auch die Zeitabhängigkeit der Operatoren bestimmen zu können, muss eine passende Basis aufgestellt werden. Es wird dieselbe Methode wie in [22] genutzt, um eine Basis aufzustellen. Dazu wird zunächst

ein Startoperator gewählt. Da in diesem Fall die Greenfunktion der f-Elektronen berechnet werden soll, wird hier als Startoperator f_σ^\dagger gewählt, sodass gilt

$$W_1 \propto f_\sigma^\dagger, \quad (3.12)$$

wobei W_1 der erste Basisoperator ist. Durch Kommutation der Basisoperatoren mit dem Hamiltonoperator des Systems werden weitere Basisoperatoren bestimmt. Diese Kommutationen können wiederholt angewendet werden, wodurch die Basis immer größer wird. Da die Terme H_{Host} und H_{Imp} nur Diagonalterme beinhalten, tragen sie keine relevanten Beiträge zu der Operatorbasis bei und werden demnach im Folgenden nicht betrachtet. Somit müssen nur die Kommutationen mit dem Hybridisierungsterm H_{Hybr} und dem Coulomb Term H_U des Hamiltonoperators berücksichtigt werden.

Die Kommutation mit dem Hybridisierungsterm des Hamiltonoperators, also die Anwendung des Operators $\mathcal{L}_{\text{Hybr}}(\cdot)$, beschreibt dabei den Austauschprozess zwischen einem Bad- und einem Störstellenelektron, die Anwendung des Operators $\mathcal{L}_U(\cdot)$ die Coulomb Wechselwirkung zwischen den Störstellenelektronen. Werden diese beiden Prozesse auf den Operator W_1 angewandt, lassen sich folgende Basisoperatoren bestimmen

$$W_2^\dagger \propto \mathcal{L}_U(f_\sigma^\dagger) \propto f_\sigma^\dagger f_{\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} \quad (3.13)$$

$$W_3^\dagger(k) \propto \mathcal{L}_{\text{Hybr}}(f_\sigma^\dagger) \propto c_{k,\sigma}^\dagger. \quad (3.14)$$

Diese Basis ist geschlossen unter der Kommutation mit H_U , eine erneute Anwendung von $\mathcal{L}_U(\cdot)$ führt also nicht zu neuen Basisoperatoren. Die Anwendung von $\mathcal{L}_{\text{Hybr}}(\cdot)$ auf $W_3^\dagger(k)$ liefert ebenfalls keine neuen Basisoperatoren, sodass nur die Kommutation mit W_2^\dagger betrachtet werden muss

$$\mathcal{L}_{\text{Hybr}}(W_2^\dagger) \propto c_{k\sigma}^\dagger f_{\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} + f_\sigma^\dagger c_{k\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} + f_\sigma^\dagger f_{\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}}, \quad (3.15)$$

durch die drei weitere Basisoperatoren bestimmt werden

$$W_4^\dagger(k) \propto c_{k\sigma}^\dagger f_{\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} \quad (3.16)$$

$$W_5^\dagger(k) \propto f_\sigma^\dagger c_{k\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} \quad (3.17)$$

$$W_6^\dagger(k) \propto f_\sigma^\dagger f_{\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}}. \quad (3.18)$$

Auch diese Basisoperatoren sind geschlossen unter Kommutation mit H_U , wodurch die komplette Basis ebenfalls unter Kommutationen mit H_U geschlossen ist, nicht aber unter Kommutation mit H_{Hybr} . Demnach kann die Basis durch erneute Anwendung von $\mathcal{L}_{\text{Hybr}}(\cdot)$ erweitert werden. In dieser Arbeit werden aber nur die bis jetzt bestimmten sechs Basisoperatoren für die Operatorbasis berücksichtigt. Die Basis ist also trunziert und die mit ihr berechneten Werte sind demnach nur approximiert.

Als nächstes werden die einzelnen Basisoperatoren mit dem Frobenius Skalarprodukt (siehe Gleichung (3.10)) orthonormiert. Damit steht die Operatorbasis

$$W_1^\dagger = \sqrt{2} f_\sigma^\dagger \quad (3.19a)$$

$$W_2^\dagger = (\sqrt{2})^3 f_\sigma^\dagger (\hat{n}_\sigma - \frac{1}{2}) \quad (3.19b)$$

$$W_3^\dagger(k) = \sqrt{2} c_{k,\sigma}^\dagger \quad (3.19c)$$

$$W_4^\dagger(k) = (\sqrt{2})^3 c_{k\sigma}^\dagger (\hat{n}_\sigma - \frac{1}{2}) \quad (3.19d)$$

$$W_5^\dagger(k) = (\sqrt{2})^3 f_\sigma^\dagger c_{k\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} \quad (3.19e)$$

$$W_6^\dagger(k) = (\sqrt{2})^3 f_\sigma^\dagger f_{\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} \quad (3.19f)$$

und die komplex konjugierte Basis

$$W_1 = \sqrt{2} f_\sigma \quad (3.20a)$$

$$W_2 = (\sqrt{2})^3 f_\sigma (\hat{n}_\sigma - \frac{1}{2}) \quad (3.20b)$$

$$W_3(k) = \sqrt{2} c_{k,\sigma} \quad (3.20c)$$

$$W_4(k) = (\sqrt{2})^3 c_{k\sigma} (\hat{n}_\sigma - \frac{1}{2}) \quad (3.20d)$$

$$W_5(k) = (\sqrt{2})^3 f_\sigma c_{k\bar{\sigma}} f_\sigma \quad (3.20e)$$

$$W_6(k) = (\sqrt{2})^3 c_{k\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma. \quad (3.20f)$$

In Vektorschreibweise lautet die Basis

$$\vec{W} = (W_1, W_2, W_3(k), W_4(k), W_5(k), W_6(k))^T \quad (3.21)$$

und

$$\vec{W}^\dagger = (W_1^\dagger, W_2^\dagger, W_3^\dagger(k), W_4^\dagger(k), W_5^\dagger(k), W_6^\dagger(k)). \quad (3.22)$$

3.3 Liouville Matrix des SIAM

Mithilfe der Operatorbasis in (3.19f) und (3.20f) lässt sich nun die Liouville Matrix \mathbf{M} des SIAMs nach Gleichung (3.11) berechnen. Die einzelnen Berechnungen stehen im Anhang A. In kompakter Schreibweise und mit der Abkürzung $\tilde{\epsilon} = \epsilon_f + \frac{U}{2}$ lautet

die Matrix

$$M = \left(\begin{array}{cc|cccc} -\tilde{\epsilon} & -\frac{U}{2} & -V_k & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{U}{2} & -\tilde{\epsilon} & 0 & -V_k & -V_k & V_k \\ \hline -V_k & 0 & -\epsilon_k & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -V_k & 0 & -\epsilon_k & 0 & 0 \\ 0 & -V_k & 0 & 0 & -\epsilon_k & 0 \\ 0 & V_k & 0 & 0 & 0 & \epsilon_k - 2\tilde{\epsilon} \end{array} \right). \quad (3.23)$$

Dabei sind die Einträge, die von 1 bis N laufen, mit dem Index k zusammenfasst. Der Bereich links oben entspricht demnach einer 2×2 Matrix, jeder Eintrag im Bereich rechts oben (links unten) einem $1 \times N$ Vektor ($N \times 1$ Vektor) und im Bereich rechts unten einer diagonalen $N \times N$ Matrix. In Gleichung (A.28) ist die Matrix ausführlicher dargestellt.

4 Erwartungswerte

In diesem Kapitel werden die Erwartungswerte, die zur Bestimmung der Besetzungszahl der Störstellenelektronen n_f und ihrer Spektraldichte $A_{ff^\dagger}(\omega)$ benötigt werden, soweit wie möglich analytisch berechnet.

Allgemein lässt sich ein Erwartungswert von zwei Operatoren B und C^\dagger nach Gleichung

$$\langle C^\dagger B \rangle = \int_{\mathbb{R}} \frac{A_{BC^\dagger}(\omega)}{e^{\beta(\omega-\mu)} + 1} d\omega \quad (4.1)$$

berechnen, wobei $A_{BC^\dagger}(\omega)$ die Spektralfunktion ist [27]. Die Fermi-Verteilung

$$f(\omega, T) = \frac{1}{e^{\beta(\omega-\mu)} + 1} \quad (4.2)$$

lässt sich mit $\beta = \frac{1}{k_B T}$, dem chemisches Potential μ , der Temperatur T und der Boltzmann-Konstante k_B berechnen. In Abbildung 4.1 ist der Verlauf der Fermi-Verteilung für verschiedene Temperaturen T angegeben. Für die folgenden Rechnungen wird die Temperatur gleich Null gesetzt und es gilt

$$f(\omega, T = 0) = \Theta(-(\omega - E_f)) \stackrel{E_f=0}{=} \Theta(-\omega), \quad (4.3)$$

da die Fermi-Energie E_f ebenfalls gleich Null gesetzt wird. Das Integral in (4.1) vereinfacht sich damit zu

$$\langle C^\dagger B \rangle = \int_{-\infty}^0 A_{BC^\dagger}(\omega) d\omega. \quad (4.4)$$

Die Spektralfunktion lässt sich nach

$$A_{BC^\dagger}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(G_{BC^\dagger}^{\text{ret}}(\omega)) \quad (4.5)$$

aus der retardierten Greenfunktion berechnen [27]. Die zeitabhängige, retardierte Greenfunktion kann mithilfe der zuvor berechneten Zeitabhängigkeit der Operatoren (siehe Gleichung (3.8) und (3.9)) bestimmt werden nach

$$G_{BC^\dagger}^{\text{ret}}(t) = -i \langle \{B(t), C^\dagger\} \rangle \Theta(t) = -i \vec{p}_{BC^\dagger}^T e^{i\mathbf{M}t} \vec{e}_B \Theta(t). \quad (4.6)$$

Der Vektor $\vec{p}_{BC^\dagger}^T$ ist eine Kurzschreibweise für

$$\vec{p}_{BC^\dagger}^T = \frac{1}{2} \langle \{ \vec{W}^T, W_{C^\dagger} \} \rangle, \quad (4.7)$$

wobei die W_i die Basisoperatoren aus der Gleichung (3.20f) sind.

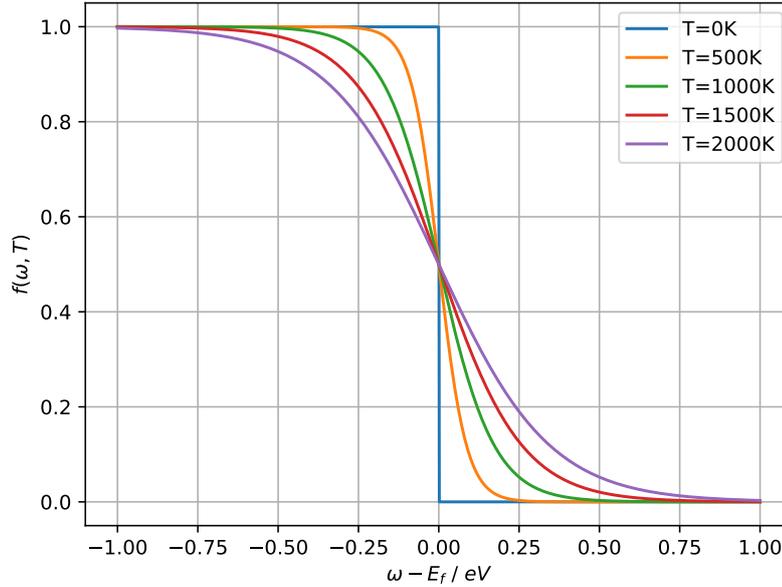


Abbildung 4.1: Fermi-Verteilung für unterschiedliche Temperaturen. E_f entspricht der Fermi-Energie, die in dieser Arbeit gleich Null gesetzt ist.

Um die Spektralfunktion in Gleichung (4.5) bestimmen zu können, wird die zeitabhängige Greenfunktion aus Gleichung (4.6) mit einer Fouriertransformation in den Impulsraum transformiert

$$\begin{aligned} G_{BC^\dagger}^{\text{ret}}(\omega) &= \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} G_{BC^\dagger}^{\text{ret}}(t) e^{i(\omega+i\delta)t} dt \\ &= \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \int_0^{\infty} -i\vec{p}_{BC^\dagger}^T e^{i\mathbf{M}t} \vec{e}_B e^{i(\omega+i\delta)t} dt \\ &= \lim_{\delta \rightarrow 0^+} -i\vec{p}_{BC^\dagger}^T \frac{1}{i\mathbf{M} + i(\omega + i\delta)} \vec{e}_B \\ &= \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \vec{p}_{BC^\dagger}^T \frac{1}{\omega + i\delta + \mathbf{M}} \vec{e}_B \\ &= \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \vec{p}_{BC^\dagger}^T \mathbf{R}(\omega) \vec{e}_B. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Dabei ist $\mathbf{R}(\omega)$ die Resolvente, welche sich nach

$$\mathbf{R}(\omega) = \frac{1}{\omega + i\delta + \mathbf{M}} \quad (4.9)$$

aus der Liouville Matrix \mathbf{M} in Gleichung (3.23) berechnet. Die Inverse dieser Resolvente \mathbf{R} ist für das SIAM durch die Matrix

$$\mathbf{R}^{-1}(\omega) = \left(\begin{array}{cc|cccc} \omega_i - \tilde{\epsilon} & -\frac{U}{2} & -V_k & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{U}{2} & \omega_i - \tilde{\epsilon} & 0 & -V_k & -V_k & V_k \\ \hline -V_k & 0 & \omega_i - \epsilon_k & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -V_k & 0 & \omega_i - \epsilon_k & 0 & 0 \\ 0 & -V_k & 0 & 0 & \omega_i - \epsilon_k & 0 \\ 0 & V_k & 0 & 0 & 0 & \omega_i + \epsilon_k - 2\tilde{\epsilon} \end{array} \right) \quad (4.10)$$

gegeben, wobei die Abkürzung $\omega_i = \omega + i\delta$ genutzt wurde.

Um den Erwartungswert $\langle CB^\dagger \rangle$ der Operatoren B^\dagger und C zu berechnen, werden die Spektralfunktion $A_{B^\dagger C}(\omega)$ und die retardierte Greenfunktion $G_{B^\dagger C}^{\text{ret}}(\omega)$ benötigt. Die zeitabhängige Greenfunktion lässt sich nach

$$G_{B^\dagger C}^{\text{ret}}(t) = -i \langle \{B^\dagger(t), C\} \rangle \Theta(t) = -i \vec{e}_{B^\dagger}^\dagger e^{-i\mathbf{M}t} \vec{p}_{B^\dagger C} \Theta(t) \quad (4.11)$$

berechnen. Der Vektor $\vec{p}_{B^\dagger C}$ ist hier die Abkürzung für

$$\vec{p}_{B^\dagger C} = \frac{1}{2} \left\langle \left\{ \left(\vec{W}^\dagger \right)^T, W_C \right\} \right\rangle. \quad (4.12)$$

Nach einer Fouriertransformation ergibt sich

$$G_{B^\dagger C}^{\text{ret}}(\omega) = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \vec{e}_{B^\dagger}^\dagger \mathbf{R}'(\omega) \vec{p}_{B^\dagger C} \quad (4.13)$$

mit der Resolvente $\mathbf{R}'(\omega)$

$$\mathbf{R}'(\omega) = \frac{1}{\omega + i\delta - \mathbf{M}}. \quad (4.14)$$

Die beiden Resolventen $\mathbf{R}(\omega)$ und $\mathbf{R}'(\omega)$ sind durch die Beziehung

$$\begin{aligned} \mathbf{R}(\omega) &= \frac{1}{\omega + i\delta + \mathbf{M}} = -\mathbf{R}'^*(-\omega) \\ \text{bzw} & \\ \mathbf{R}^{\text{ret}}(\omega) &= -\mathbf{R}'^{\text{av}}(-\omega) \end{aligned} \quad (4.15)$$

miteinander verknüpft. Dabei steht die Abkürzung av für Avanciert.

4.1 Erwartungswert der Besetzungszahl

Um den Erwartungswert der Besetzungszahl $\langle n_\sigma \rangle$ bei $T = 0$ nach

$$\begin{aligned} \langle n_\sigma \rangle &= \langle f_\sigma^\dagger f_\sigma \rangle = \int_{-\infty}^0 A_{f_\sigma f_\sigma^\dagger}(\omega) d\omega \\ &= \int_{-\infty}^0 -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left(G_{f_\sigma f_\sigma^\dagger}^{\text{ret}}(\omega) \right) d\omega \end{aligned} \quad (4.16)$$

zu bestimmen, wird die retardierte Greenfunktion im Impulsraum benötigt

$$G_{f_\sigma f_\sigma^\dagger}^{\text{ret}}(\omega) = \vec{p}_{f_\sigma f_\sigma^\dagger}^T \mathbf{R}(\omega) \vec{e}_{f_\sigma}. \quad (4.17)$$

Dabei entspricht $\mathbf{R}(\omega)$ der Resolvente, deren Inverses in Gleichung (4.10) dargestellt ist. Der Vektor \vec{e}_{f_σ} entspricht dem ersten Einheitsvektor \vec{e}_1 , da f_σ proportional zum ersten Element der Basis aus (3.20f) ist. Der Vektor $\vec{p}_{f_\sigma f_\sigma^\dagger}^T$ lässt sich nach Gl. (4.7) und (3.20f) bestimmen zu

$$\begin{aligned} \vec{p}_{f_\sigma f_\sigma^\dagger}^T &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \{ \vec{W}^T, f_\sigma^\dagger \} \rangle \\ &= (1, 2 \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle - 1, 0, 0, 2 \langle f_\sigma^\dagger c_{k,\bar{\sigma}} \rangle, 2 \langle c_{k,\bar{\sigma}}^\dagger f_\sigma \rangle). \end{aligned} \quad (4.18)$$

Die Berechnungen werden im Anhang B ausgeführt.

Der Vektor $\vec{p}_{f_\sigma f_\sigma^\dagger}^T$ ist abhängig von den Erwartungswerten $\langle f_\sigma^\dagger c_{k,\bar{\sigma}} \rangle$, $\langle c_{k,\bar{\sigma}}^\dagger f_\sigma \rangle$ und $\langle n_{\bar{\sigma}} \rangle$. Da ein symmetrisches System betrachtet wird, also ein System, in dem die Störstelle in der Mitte des Bades liegt, gilt $\langle n_\sigma \rangle = \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle = \langle n \rangle$. Für die Berechnung von $\langle n \rangle$ wird der Wert $\langle n \rangle$ selbst benötigt. Demnach liegt hier ein Selbstkonsistenzproblem vor. Die Erwartungswerte $\langle f_\sigma^\dagger c_{k,\bar{\sigma}} \rangle$ und $\langle c_{k,\bar{\sigma}}^\dagger f_\sigma \rangle$ werden im nächsten Abschnitt genauer betrachtet. Es wird hier vorerst angenommen, dass beide Erwartungswerte reell sind und sich mit der Abkürzung

$$\begin{aligned} \langle c_{k,\bar{\sigma}}^\dagger f_\sigma \rangle &= -\langle f_\sigma c_{k,\bar{\sigma}}^\dagger \rangle = V_k w(k) \in \mathbb{R} \\ \langle f_\sigma^\dagger c_{k,\bar{\sigma}} \rangle &= \langle c_{k,\bar{\sigma}}^\dagger f_\sigma \rangle^* = V_k w(k), \end{aligned} \quad (4.19)$$

schreiben lassen, sodass gilt

$$\vec{p}_{f_\sigma f_\sigma^\dagger}^T = (1, 2 \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle - 1, 0, 0, 2V_k w(k), 2V_k w(k)). \quad (4.20)$$

Damit lässt sich die Greenfunktion der f-Elektronen bestimmen zu

$$G_{f_\sigma f_\sigma^\dagger}^{\text{ret}}(\omega) = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \left[R_{11}(\omega) + R_{21}(\omega)(2 \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle - 1) + 2 \sum_k R_{51k}(\omega) V_k w(k) + 2 \sum_k R_{61k}(\omega) V_k w(k) \right]. \quad (4.21)$$

Anhand der Greenfunktion ist zu erkennen, dass nicht die komplette Resolvente bestimmt werden muss, sondern nur die Elemente $R_{11}(\omega)$, $R_{21}(\omega)$, $R_{51k}(\omega)$ und $R_{61k}(\omega)$. Da die Einträge der inversen Resolvente (siehe Gleichung (4.10)) im Bereich rechts oben (links unten) einem $1 \times N$ Vektor ($N \times 1$ Vektor) entsprechen, muss dies auch für die Elemente der Resolventen berücksichtigt werden durch den Index k . Die benötigten Elemente werden mithilfe der Relation $R(\omega)R^{-1}(\omega) = \mathbb{1}$ berechnet, genauere Rechnungen dazu finden sich in Anhang C. Die Elemente lauten

$$R_{11}(\omega) = \frac{1}{\omega + i\delta - \tilde{\epsilon} - \Gamma(\omega) - \Sigma(\omega)} \quad (4.22a)$$

$$R_{21}(\omega) = \frac{2}{U} \Sigma(\omega) R_{11}(\omega) \quad (4.22b)$$

$$R_{51k}(\omega) = \frac{V_k}{\omega + i\delta - \epsilon_k} R_{21}(\omega) \quad (4.22c)$$

$$R_{61k}(\omega) = -\frac{V_k}{\omega + i\delta + \epsilon_k - 2\tilde{\epsilon}} R_{21}(\omega). \quad (4.22d)$$

Dabei entspricht $\Gamma(\omega)$ der Hybridisierungsfunktion

$$\Gamma(\omega) = \sum_k \frac{V_k^2}{\omega + i\delta - \epsilon_k}, \quad \delta > 0 \quad (4.23)$$

$$-\Gamma^*(-\omega) = \sum_k \frac{V_k^2}{\omega + i\delta + \epsilon_k}$$

und $\Sigma(\omega)$ der Selbstenergie

$$\Sigma(\omega) = \frac{U^2}{4} \frac{1}{\omega - \tilde{\epsilon} - 2\Gamma(\omega) + \Gamma^*(-\omega + 2\tilde{\epsilon})}. \quad (4.24)$$

Im Folgenden wird der Kontinuumsliches $N \rightarrow \infty$ betrachtet und angenommen, dass die Hybridisierung unabhängig von k ist und sich schreiben lässt als

$$V_k = \frac{V}{\sqrt{N}}. \quad (4.25)$$

Bei gleichmäßig verteilten Energien der Badelektronen von $k = -D$ bis $k = D$ wird der Breitbandlimes $D \rightarrow \infty$ betrachtet, also der Limes einer unendlichen Bandweite. Alle Energielevel liegen innerhalb der Bandweite und es gilt $\frac{V}{\sqrt{N}} = \text{konst.}$ Im Breitbandlimes ergibt sich nach den Rechnungen in 5.1 für die Hybridisierungsfunktion

$$\begin{aligned} \Gamma(x) &= -i \frac{\pi V^2}{2 D} = -i\gamma \\ -\Gamma^*(-x) &= -i\gamma \end{aligned} \quad (4.26)$$

mit $\gamma = \frac{\pi V^2}{2 D} = \text{konst.}$ und für die Selbstenergie

$$\Sigma(\omega) = \frac{U^2}{4} \frac{1}{\omega + i\delta - \tilde{\epsilon} + 3\gamma i}. \quad (4.27)$$

In der Abbildung 4.2 ist die Selbstenergie für den symmetrischen SIAM dargestellt.

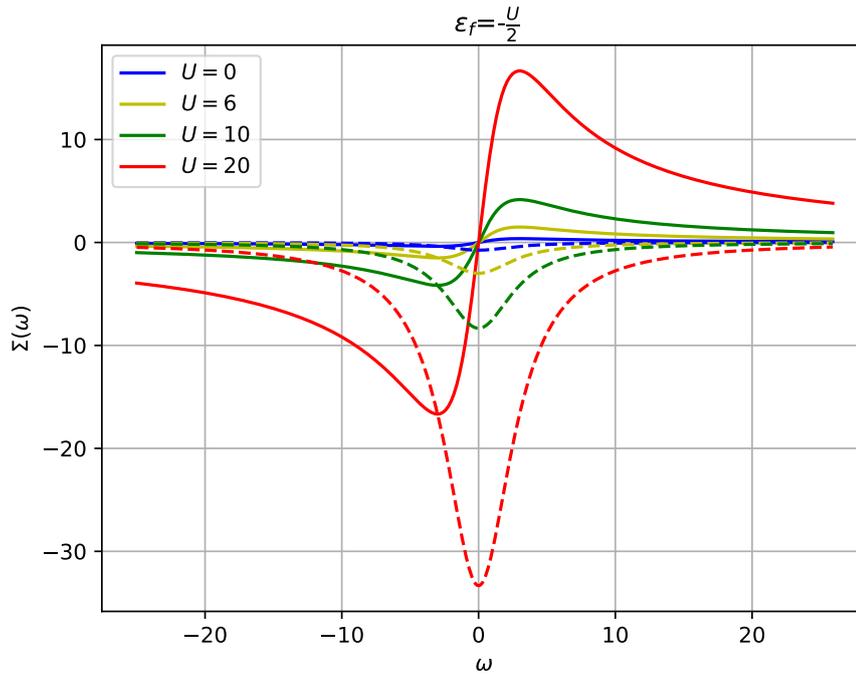


Abbildung 4.2: Selbstenergie des symmetrischen SIAMs für unterschiedliche U . Dabei entspricht die durchgezogene Linie dem Realteil und die gestrichelte Linie dem Imaginärteil der Selbstenergie.

Das System befindet sich für diesen Fall in Halbfüllung und es gilt $\langle n \rangle = 0,5$

und $\epsilon_f = -\frac{U}{2}$. Der Realteil der Selbstenergie ist durch die durchgezogenen Linien dargestellt und ist antisymmetrisch zum Ursprung. Der Imaginärteil ist durch gestrichelte Linien gekennzeichnet und achsensymmetrisch zur y-Achse.

Die Greenfunktion der f-Elektronen lässt sich im Breitbandlimes schreiben als

$$\begin{aligned}
 G_{f_\sigma f_\sigma^\dagger}^{\text{ret}}(\omega) &= \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \left[R_{11}(\omega) + R_{21}(\omega)(2 \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle - 1) + 2 \sum_k R_{51k}(\omega) V_k w(k) + 2 \sum_k R_{61k}(\omega) V_k w(k) \right] \\
 &= \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \left[R_{11}(\omega) + \left(2 \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle - 1 + 2 \frac{V_k^2}{\omega + i\delta - \epsilon_k} w(k) - 2 \sum_k \frac{V_k^2}{\omega + i\delta + \epsilon_k - 2\tilde{\epsilon}} w(k) \right) R_{12}(\omega) \right] \\
 &= \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \left[R_{11}(\omega) + R_{12}(\omega)(2 \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle - 1 + 2H(\omega) + 2H^*(-\omega + 2\tilde{\epsilon})) \right] \\
 &= \frac{1 + \frac{2}{U} \Sigma(\omega)(2 \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle - 1 + 2H(\omega) + 2H^*(-\omega + 2\tilde{\epsilon}))}{\omega - \tilde{\epsilon} + \gamma i - \Sigma(\omega)}
 \end{aligned} \tag{4.28}$$

mit der Funktion

$$\begin{aligned}
 H(x) &= \sum_k \frac{V_k}{x + i\delta - \epsilon_k} \langle f_\sigma^\dagger c_{k,\sigma} \rangle^* = \frac{V^2}{N} \sum_k \frac{w(k)}{x + i\delta - \epsilon_k} \\
 -H^*(-x) &= \sum_k \frac{V_k}{x + i\delta + \epsilon_k} \langle f_\sigma^\dagger c_{k,\sigma} \rangle = \frac{V^2}{N} \sum_k \frac{w(k)}{x + i\delta + \epsilon_k}.
 \end{aligned} \tag{4.29}$$

Nach Gleichung (4.5) lässt sich die Spektraldichte der f-Elektronen berechnen zu

$$\begin{aligned}
 A_{f_\sigma f_\sigma^\dagger}(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left(G_{f_\sigma f_\sigma^\dagger}^{\text{ret}}(\omega) \right) \\
 &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left(\frac{1 + \frac{2}{U} \Sigma(\omega)(2 \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle - 1 + 2H(\omega) + 2H^*(-\omega + 2\tilde{\epsilon}))}{\omega - \tilde{\epsilon} + \gamma i - \Sigma(\omega)} \right).
 \end{aligned} \tag{4.30}$$

4.2 Berechnung der Funktion $w(k)$

Als nächstes wird die Funktion $w(k)$ bestimmt, welche nach den Gleichungen

$$\begin{aligned}
 \langle c_{k\sigma}^\dagger f_\sigma \rangle &= -\langle f_\sigma c_{k\sigma}^\dagger \rangle = V_k w(k) \in \mathbb{R} \\
 \langle c_{k\sigma} f_\sigma^\dagger \rangle &= -\langle f_\sigma^\dagger c_{k\sigma} \rangle = -\langle c_{k\sigma}^\dagger f_\sigma \rangle^* = -V_k w(k)
 \end{aligned} \tag{4.31}$$

berechnet werden kann. Dafür wird zuerst überprüft, ob es einen Unterschied macht, ob die Zeitabhängigkeit der Greenfunktion in dem Operator $f_\sigma^{(\dagger)}$ oder in $c_{k,\sigma}^{(\dagger)}$ berücksichtigt wird. Dazu werden die Greenfunktionen der Erwartungswerte $\langle f_\sigma^\dagger c_{k\sigma} \rangle$ und $\langle c_{k\sigma}^\dagger f_\sigma \rangle$ berechnet. Da $\langle f_\sigma^\dagger c_{k\sigma} \rangle = \langle c_{k\sigma}^\dagger f_\sigma \rangle$ gilt, sollten auch die beiden Greenfunktionen bis auf ein Vorzeichen übereinstimmen. Anschließend wird überprüft, ob die Relation $\langle c_{k,\sigma} f_\sigma^\dagger \rangle = -\langle c_{k\sigma}^\dagger f_\sigma \rangle$ stimmt.

4.2.1 Berechnung der Greenfunktion zu $f^\dagger c$

Die Greenfunktion zum Erwartungswert $\langle f_\sigma^\dagger c_{k,\sigma} \rangle$ lautet nach Gleichung (4.6)

$$\begin{aligned} G_{c_{k,\sigma} f_\sigma^\dagger}^{\text{ret}}(t) &= -i \langle \{ c_{k,\sigma}(t), f_\sigma^\dagger \} \rangle \Theta(t) \\ &= -i \vec{p}_{c_{k,\sigma} f_\sigma^\dagger}^T e^{i\mathbf{M}t} \vec{e}_{c_{k,\sigma}} \Theta(t). \end{aligned} \quad (4.32)$$

Es gilt $\vec{e}_{c_{k,\sigma}} = \vec{e}_{3_k}$. Es ist zu beachten, dass die Matrix \mathbf{M} in (3.23) nicht 6x6-dimensional ist, sondern $(2 + 4N) \times (2 + 4N)$ -dimensional, siehe (A.28). Damit sind auch die Vektoren $(2 + 4N)$ -dimensional. Der Index k besagt also, dass der Einheitsvektor nur einen Eintrag beim k -ten Element des 3. Vektors besitzt, also gilt

$$\vec{e}_{3_k} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vec{e}_k \\ \vec{0} \\ \vec{0} \\ \vec{0} \end{pmatrix}, \quad (\vec{e}_k)_i = \begin{cases} 1, & i = k \\ 0, & i \neq k \end{cases}. \quad (4.33)$$

Der Vektor $\vec{p}_{c_{k,\sigma} f_\sigma^\dagger}^T$ lässt sich mit den Berechnungen in Anhang B bestimmen zu

$$\begin{aligned} \vec{p}_{c_{k,\sigma} f_\sigma^\dagger}^T &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \{ \vec{W}^T, f_\sigma^\dagger \} \rangle \\ &= (1, 2 \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle - 1, 0, 0, 2 \langle f_{\bar{\sigma}}^\dagger c_{q,\bar{\sigma}} \rangle, 2 \langle c_{q,\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} \rangle) \\ &= (1, 2 \langle n \rangle - 1, 0, 0, 2V_q w(q), 2V_q w(q)). \end{aligned} \quad (4.34)$$

Der Vektor $\vec{p}_{c_{k,\sigma} f_\sigma^\dagger}^T$ entspricht dem Vektor $\vec{p}_{f_\sigma f_\sigma^\dagger}^T$ in Gleichung (4.18) und ist, ebenso wie die zugehörige Greenfunktion, abhängig von $w(k)$ bzw. von den Erwartungswerten $\langle f_{\bar{\sigma}}^\dagger c_{k,\bar{\sigma}} \rangle$ und $\langle c_{k,\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} \rangle$. Für die Berechnung von $w(k)$ liegt ein Selbstkonsistenzproblem vor.

Mit einer Fouriertransformation lässt sich die retardierte Greenfunktion im Impulsraum bestimmen

$$\begin{aligned}
 G_{c_k, \sigma f_\sigma^\dagger}^{\text{ret}}(\omega) &= \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} G_{c_k, \sigma f_\sigma^\dagger}^{\text{ret}}(t) e^{i(\omega + i\delta)t} dt \\
 &= \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \vec{p}_{c_k, \sigma f_\sigma^\dagger}^T \frac{1}{\omega + i\delta + \mathbf{M}} \vec{e}_{3_k} \\
 &= \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \vec{p}_{c_k, \sigma f_\sigma^\dagger}^T \mathbf{R}(\omega) \vec{e}_{3_k}.
 \end{aligned} \tag{4.35}$$

Dabei entspricht $\mathbf{R}(\omega)$ der Resolvente, deren Inverses in Gleichung (4.10) dargestellt ist. Ausgeschrieben lautet die Greenfunktion

$$\begin{aligned}
 G_{c_k, \sigma f_\sigma^\dagger}^{\text{ret}}(\omega) &= \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \left(R_{13k}(\omega) + R_{23k}(\omega)(2\langle n \rangle - 1) \right. \\
 &\quad \left. + 2 \sum_q R_{53qk}(\omega) V_q w(q) + 2 \sum_q R_{63qk}(\omega) V_q w(q) \right).
 \end{aligned} \tag{4.36}$$

Auch hier werden nur einzelne Elemente der Resolvente benötigt, nämlich $R_{13k}(\omega)$, $R_{23k}(\omega)$, $R_{53qk}(\omega)$ und $R_{63qk}(\omega)$. Diese lassen sich ebenfalls unter Ausnutzung der Relation $R(\omega)R^{-1}(\omega) = \mathbb{1}$ bestimmen. Die Rechnungen sind im Anhang C zu finden. Die benötigten Elemente der Resolvente lauten

$$R_{13k}(\omega) = -\frac{V_k}{\omega + i\delta - \epsilon_k} R_{11}(\omega) \tag{4.37a}$$

$$R_{23k}(\omega) = -\frac{V_k}{\omega + i\delta - \epsilon_k} R_{21}(\omega) \tag{4.37b}$$

$$R_{53qk}(\omega) = -\frac{V_q}{\omega + i\delta - \epsilon_q} R_{23k}(\omega) = \frac{V_k}{\omega + i\delta - \epsilon_k} R_{51q}(\omega) \tag{4.37c}$$

$$R_{63qk}(\omega) = -\frac{V_q}{\omega + i\delta + \epsilon_q - 2\tilde{\epsilon}} R_{23k}(\omega) = -\frac{V_k}{\omega + i\delta - \epsilon_k} R_{61q}(\omega). \tag{4.37d}$$

Dabei wurden $R_{11}(\omega)$ und $R_{21}(\omega)$ bereits berechnet und sind in den Gleichungen (4.22a) und (4.22b) dargestellt. Eingesetzt in die Greenfunktion ergibt sich

$$\begin{aligned}
 G_{c_k, \sigma f_\sigma^\dagger}^{\text{ret}}(\omega) &= R_{13k}(\omega) + (2\langle n \rangle - 1) R_{23k}(\omega) \\
 &\quad + 2 \sum_q \left(\frac{-V_q^2 w(q)}{\omega + i\delta - \epsilon_q} + \frac{V_q^2 w(q)}{\omega + i\delta + \epsilon_q - 2\tilde{\epsilon}} \right) R_{23k}(\omega)
 \end{aligned} \tag{4.38}$$

oder verglichen mit der Greenfunktion der f-Elektronen in Gleichung (4.21)

$$\begin{aligned} G_{c_{k,\sigma}^\dagger f_\sigma}^{\text{ret}}(\omega) &= -\frac{V_k}{\omega + i\delta - \epsilon_k} \left(R_{11}(\omega) + (2\langle n \rangle - 1)R_{21}(\omega) \right. \\ &\quad \left. + 2 \sum_q V_q w(q) R_{51q}(\omega) + 2 \sum_q V_q w(q) R_{61q}(\omega) \right) \\ &= -\frac{V_k}{\omega + i\delta - \epsilon_k} G_{f_\sigma f_\sigma^\dagger}^{\text{ret}}(\omega). \end{aligned} \quad (4.39)$$

4.2.2 Berechnung der Greenfunktion zu $c^\dagger f$

Die zeitabhängige retardierte Greenfunktion zu dem Erwartungswert $\langle c_{k\sigma}^\dagger f_\sigma \rangle$ lautet

$$\begin{aligned} G_{f_\sigma c_{k,\sigma}^\dagger}^{\text{ret}}(t) &= -i \langle \{ f_\sigma(t), c_{k,\sigma}^\dagger \} \rangle \Theta(t) \\ &= -i \vec{p}_{f_\sigma c_{k,\sigma}^\dagger}^T e^{i\mathbf{M}t} \vec{e}_{f_\sigma} \Theta(t) \end{aligned} \quad (4.40)$$

und nach einer Fouriertransformation im Impulsraum

$$G_{f_\sigma c_{k,\sigma}^\dagger}^{\text{ret}}(\omega) = \vec{p}_{f_\sigma c_{k,\sigma}^\dagger}^T \mathbf{R}(\omega) \vec{e}_1. \quad (4.41)$$

Die Berechnung des Vektors $\vec{p}_{f_\sigma c_{k,\sigma}^\dagger}^T$ ist in Anhang B zu finden. Der Vektor lautet

$$\vec{p}_{f_\sigma c_{k,\sigma}^\dagger}^T = (0, 0, 1, 2\langle n \rangle - 1, 0, 0). \quad (4.42)$$

Hier fällt ein Unterschied zu dem Vektor $\vec{p}_{f_\sigma^\dagger c_{k,\sigma}}^T$ auf. Im Vektor $\vec{p}_{f_\sigma c_{k,\sigma}^\dagger}^T$ liegt keine Abhängigkeit von $w(k)$ und daher auch kein Selbstkonsistenzproblem für die Berechnung von $w(k)$ vor.

Für die Berechnung der Greenfunktion werden die Resolventenelemente $R_{31k}(\omega)$ und $R_{41k}(\omega)$ benötigt (Berechnungen siehe Anhang C)

$$R_{31k}(\omega) = \frac{V_k}{\omega + i\delta - \epsilon_k} R_{11}(\omega) \quad (4.43a)$$

$$R_{41k}(\omega) = \frac{V_k}{\omega + i\delta - \epsilon_k} R_{21}(\omega). \quad (4.43b)$$

Damit lässt sich die Greenfunktion bestimmen zu

$$\begin{aligned} G_{f_\sigma c_{k,\sigma}^\dagger}^{\text{ret}}(\omega) &= \lim_{\delta \rightarrow 0^+} [R_{31k} + R_{41k}(2\langle n \rangle - 1)] \\ &= \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \frac{V_k}{\omega + i\delta - \epsilon_k} [R_{11}(\omega) + R_{21}(\omega)(2\langle n \rangle - 1)]. \end{aligned} \quad (4.44)$$

4.2.3 Vergleich beider Methoden

Bei dem Vergleich beider Wege fällt auf, dass die Relation $\langle f_\sigma^\dagger c_{k,\sigma} \rangle = -\langle c_{k\sigma}^\dagger f_\sigma \rangle$ und damit $G_{c_{k,\sigma} f_\sigma^\dagger}^{\text{ret}}(\omega) \approx -G_{f_\sigma c_{k,\sigma}^\dagger}^{\text{ret}}(\omega)$ nicht erfüllt ist. Schon bei dem Vergleich der Vektoren $\vec{p}_{c_{k,\sigma} f_\sigma^\dagger}^T$ und $\vec{p}_{f_\sigma c_{k,\sigma}^\dagger}^T$ in Gleichung (4.34) und (4.42) fällt auf, dass der Vektor aus der Rechnung, in der die Zeitabhängigkeit im c -Operator steckt, mehr Komponenten enthält als der aus den Berechnungen mit der Zeitabhängigkeit im f -Operator. Für die Greenfunktion $G_{c_{k,\sigma} f_\sigma^\dagger}^{\text{ret}}(\omega)$ liegt ein Selbstkonsistenzproblem vor, für die Greenfunktion $G_{f_\sigma c_{k,\sigma}^\dagger}^{\text{ret}}(\omega)$ jedoch nicht.

Der Grund für diesen Unterschied liegt in der hier genutzten Basis. Sie wurde mit dem f -Operator als Ausgangspunkt erstellt. Da hier mit einer trunktierten Basis gerechnet wird, also Teile der Basis vernachlässigt werden, beschreibt die Basis die Zeitabhängigkeit der f -Operatoren besser als die der c -Operatoren. Betrachtet man beispielsweise den Austauschprozess eines f -Elektrons an der Störstelle mit einem Badelektron, so lässt sich dieser Vorgang durch Anwendung des Liouville Operators $\mathcal{L}_{\text{Hybr}}(\cdot)$ auf den Operator $f_\sigma^{(\dagger)}$ beschreiben

$$f_\sigma^{(\dagger)} \xrightarrow{\mathcal{L}_{\text{Hybr}}(f_\sigma)} c_{k,\sigma}^{(\dagger)}. \quad (4.45)$$

Für den Austauschprozess eines c -Elektrons an der Störstelle mit einem f -Elektron muss der Operator $\mathcal{L}_{\text{Hybr}}(\cdot)$ jedoch zweimal auf $f_\sigma^{(\dagger)}$ angewendet werden

$$f_\sigma^{(\dagger)} \xrightarrow{\mathcal{L}_{\text{Hybr}}(f_\sigma^{(\dagger)})} c_{k,\sigma}^{(\dagger)} \xrightarrow{\mathcal{L}_{\text{Hybr}}(c_{k,\sigma}^{(\dagger)})} f_\sigma^{(\dagger)}. \quad (4.46)$$

Daraus resultieren die zusätzlichen Terme bei Betrachtung der Zeitabhängigkeit in den c -Operatoren.

Da die Basis mit dem f -Operator als Ausgangspunkt aufgebaut wird, wird im Folgenden nur noch die Zeitabhängigkeit im f -Operator betrachtet. Es werden also nur die Erwartungswerte $\langle c_{k\sigma}^\dagger f_\sigma \rangle = V_k w(k) = -\langle c_{k\sigma} f_\sigma^\dagger \rangle$ genutzt. In den nächsten beiden Abschnitten wird aus beiden Erwartungswerten die Funktion $w(k)$ berechnet und die Ergebnisse werden miteinander verglichen.

4.2.4 Erwartungswert von $c^\dagger f$

Die für die Berechnung des Erwartungswertes

$$\langle c_{k\sigma}^\dagger f_\sigma \rangle = V_k w(k) = \int_{-\infty}^0 A_{f_\sigma c_{k,\sigma}^\dagger}(\omega) d\omega \quad (4.47)$$

bei $T = 0$ benötigte Greenfunktion wurde bereits bestimmt und ist in Gleichung (4.44) dargestellt. Daraus lässt sich die Spektralfunktion nach Gleichung (4.5) berechnen zu

$$\begin{aligned} A_{f_\sigma c_{k,\sigma}^\dagger}(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left(\lim_{\delta \rightarrow 0^+} \frac{V_k}{\omega + i\delta - \epsilon_k} [R_{11}(\omega) + R_{21}(\omega)(2\langle n \rangle - 1)] \right) \\ &= -\frac{1}{\pi} \text{P} \left[\frac{V_k}{\omega - \epsilon_k} \right] \text{Im}[R_{11}(\omega) + R_{21}(\omega)(2\langle n \rangle - 1)] \\ &\quad + V_k \delta(\omega - \epsilon_k) \text{Re}[R_{11}(\omega) + R_{21}(\omega)(2\langle n \rangle - 1)]. \end{aligned} \quad (4.48)$$

Hier wurde die Relation

$$\lim_{\delta \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \mp i\delta} = \text{P} \left[\frac{1}{x} \right] \pm i\pi\delta(x) \quad (4.49)$$

genutzt, wobei P für den Hauptwert steht (engl.: principal value). Damit ergibt sich für den Erwartungswert $\langle c_{k\sigma}^\dagger f_\sigma \rangle$ bei $T = 0$

$$\begin{aligned} \langle c_{k\sigma}^\dagger f_\sigma \rangle &= -\frac{1}{\pi} \text{v.p.} \int_{-\infty}^0 \frac{V_k}{\omega - \epsilon_k} \text{Im}[R_{11}(\omega) + R_{21}(\omega)(2\langle n \rangle - 1)] d\omega \\ &\quad + V_k \text{Re}[R_{11}(\epsilon_k) + R_{21}(\epsilon_k)(2\langle n \rangle - 1)] \Theta(-\epsilon_k) \end{aligned} \quad (4.50)$$

mit dem Hauptwertintegral v.p. $\int \frac{1}{x-x_0} \dots dx$, wobei v.p. für "principal value" steht.

Daraus lässt sich die Funktion $w_{f_\sigma c_{k,\sigma}^\dagger}(k)$ nach $\langle c_{k\sigma}^\dagger f_\sigma \rangle = V_k w_{f_\sigma c_{k,\sigma}^\dagger}(k)$ ablesen

$$\begin{aligned} w_{f_\sigma c_{k,\sigma}^\dagger}(k) &= -\frac{1}{\pi} \text{v.p.} \int_{-\infty}^0 \frac{1}{\omega - \epsilon_k} \text{Im}[R_{11}(\omega) + R_{21}(\omega)(2\langle n \rangle - 1)] d\omega \\ &\quad + \text{Re}[R_{11}(\epsilon_k) + R_{21}(\epsilon_k)(2\langle n \rangle - 1)] \Theta(-\epsilon_k). \end{aligned} \quad (4.51)$$

4.2.5 Erwartungswert von cf^\dagger

Um zu überprüfen, ob die Relation $\langle c_{k,\sigma}^\dagger f_\sigma \rangle = -\langle c_{k\sigma} f_\sigma^\dagger \rangle$ in der hier gewählten Basis stimmt, wird auch der Erwartungswert $\langle c_{k\sigma} f_\sigma^\dagger \rangle$ für $T = 0$ berechnet

$$\langle c_{k\sigma} f_\sigma^\dagger \rangle = -V_k w(k) = \int_{-\infty}^0 A_{f_\sigma^\dagger c_{k,\sigma}}(\omega) d\omega. \quad (4.52)$$

Die benötigte Greenfunktion lautet

$$\begin{aligned} G_{f_\sigma^\dagger c_{k,\sigma}}^{\text{ret}}(t) &= -i \langle \{ f_\sigma^\dagger(t), c_{k,\sigma} \} \rangle \Theta(t) \\ &= -i \vec{e}_1^T e^{-iMt} \vec{p}_{f_\sigma^\dagger c_{k,\sigma}} \Theta(t). \end{aligned} \quad (4.53)$$

Nach Gleichung (4.7) und den Nebenrechnungen in B.4 lässt sich der Vektor $\vec{p}_{f_\sigma^\dagger c_{k,\sigma}}$ berechnen zu

$$\vec{p}_{f_\sigma^\dagger c_{k,\sigma}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \langle n \rangle - 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.54)$$

Hier fällt direkt auf, dass der Vektor mit dem in Gleichung (4.42) übereinstimmt nach $\vec{p}_{f_\sigma^\dagger c_{k,\sigma}} = \vec{p}_{f_\sigma c_{k,\sigma}^\dagger}$. Nach einer Fouriertransformation lautet die retardierte Greenfunktion im Impulsraum

$$G_{f_\sigma^\dagger c_{k,\sigma}}^{\text{ret}}(\omega) = \vec{e}_1^T R'(\omega) \vec{p}_{f_\sigma^\dagger c_{k,\sigma}}. \quad (4.55)$$

Es werden also die Elemente $R'_{13k}(\omega)$ und $R'_{14k}(\omega)$ benötigt. Diese können nach der Relation $R'^{-1}(\omega)R'(\omega) = \mathbb{1}$ oder nach Gleichung (4.15) aus den Elementen $R_{13k}(\omega)$ und $R_{14k}(\omega)$ bestimmt werden zu

$$R'_{13k}(\omega) = -\frac{V_k}{\omega + i\delta + \epsilon_k} R'_{11}(\omega) = R'_{31k}(\omega) = -R_{31k}^*(-\omega) \quad (4.56a)$$

$$R'_{14k}(\omega) = -\frac{V_k}{\omega + i\delta + \epsilon_k} R'_{12}(\omega) = R'_{41k}(\omega) = -R_{41k}^*(-\omega). \quad (4.56b)$$

Jetzt lässt sich die Greenfunktion berechnen zu

$$\begin{aligned} G_{f_\sigma^\dagger c_{k,\sigma}}^{\text{ret}}(\omega) &= \lim_{\delta \rightarrow 0^+} [R'_{13k}(\omega) + R'_{14k}(\omega)(2 \langle n \rangle - 1)] \\ &= -\lim_{\delta \rightarrow 0^+} \frac{V_k}{\omega + i\delta + \epsilon_k} [R_{11}^*(-\omega) + R_{21}^*(-\omega)(2 \langle n \rangle - 1)] \\ &= -G_{f_\sigma c_{k,\sigma}^\dagger}^{*,\text{ret}}(-\omega). \end{aligned} \quad (4.57)$$

Die Spektralfunktion $A_{f_{\sigma}^{\dagger}c_{k,\sigma}}(\omega)$ kann mit Hilfe von Gleichung (4.49) nach

$$\begin{aligned}
 A_{f_{\sigma}^{\dagger}c_{k,\sigma}}(\omega) &= -\frac{1}{\pi}\text{Im}(-G_{f_{\sigma}^{\dagger}c_{k,\sigma}}^{*,\text{ret}}(-\omega)) \\
 &= -\frac{1}{\pi}\text{Im}(G_{f_{\sigma}^{\dagger}c_{k,\sigma}}^{\text{ret}}(-\omega)) \\
 &= A_{f_{\sigma}c_{k,\sigma}^{\dagger}}(-\omega) \\
 &= \frac{1}{\pi}\text{P}\left[\frac{V_k}{\omega + \epsilon_k}\right]\text{Im}[R_{11}(-\omega) + R_{21}(-\omega)(2\langle n \rangle - 1)] \\
 &\quad + V_k\delta(\omega + \epsilon_k)\text{Re}[R_{11}(-\omega) + R_{21}(-\omega)(2\langle n \rangle - 1)].
 \end{aligned} \tag{4.58}$$

berechnet werden. Der Erwartungswert bei $T = 0$ lautet

$$\begin{aligned}
 \langle c_{k\sigma}f_{\sigma}^{\dagger} \rangle &= \int_{-\infty}^0 A_{f_{\sigma}^{\dagger}c_{k,\sigma}}(\omega)d\omega = -V_k w_{f_{\sigma}^{\dagger}c_{k,\sigma}}(k) \\
 &= \frac{1}{\pi}\text{v.p.} \int_{-\infty}^0 \frac{V_k}{\omega + \epsilon_k} \text{Im}[R_{11}(-\omega) + R_{21}(-\omega)(2\langle n \rangle - 1)]d\omega \\
 &\quad + V_k \text{Re}[R_{11}(\epsilon_k) + R_{21}(\epsilon_k)(2\langle n \rangle - 1)]\Theta(\epsilon_k)
 \end{aligned} \tag{4.59}$$

mit dem Hauptwertintegral v.p. $\int \frac{1}{x-x_0} \dots dx$, wobei v.p. für "principal value" steht. Damit folgt für $w_{f_{\sigma}^{\dagger}c_{k,\sigma}}(k)$

$$\begin{aligned}
 w_{f_{\sigma}^{\dagger}c_{k,\sigma}}(k) &= -\frac{1}{\pi}\text{v.p.} \int_{-\infty}^0 \frac{1}{\omega + \epsilon_k} \text{Im}[R_{11}(-\omega) + R_{21}(-\omega)(2\langle n \rangle - 1)]d\omega \\
 &\quad - \text{Re}[R_{11}(\epsilon_k) + R_{21}(\epsilon_k)(2\langle n \rangle - 1)]\Theta(\epsilon_k).
 \end{aligned} \tag{4.60}$$

4.2.6 Vergleich der Erwartungswerte

In den Abbildungen 4.3 und 4.4 werden die Ergebnisse beider Rechenwege verglichen. Dabei sind die Werte für $w_{f_{\sigma}c_{k,\sigma}^{\dagger}}(k)$ mit einer durchgezogenen Linie, die für $w_{f_{\sigma}^{\dagger}c_{k,\sigma}}(k)$ mit einer gestrichelten Linie gekennzeichnet. In Abbildung 4.3 werden Parameter für ein symmetrisches System betrachtet, in Abbildung 4.4 die Abhängigkeit einer Abweichung von μ vom symmetrischen Fall sowie $n \neq 0,5$. In allen Fällen stimmen die beiden Lösungen überein. Es gilt also

$$w_{f_{\sigma}c_{k,\sigma}^{\dagger}}(k) = w_{f_{\sigma}^{\dagger}c_{k,\sigma}}(k) = w(k). \tag{4.61}$$

Dieses Ergebnis war aufgrund der Relation $\langle c_{k,\sigma}^{\dagger}f_{\sigma} \rangle = V_k w(k) = -\langle c_{k,\sigma}f_{\sigma}^{\dagger} \rangle \in \mathbb{R}$, die bereits zu Beginn des Kapitels 4.2 dargestellt wurde, zu erwarten.

4 Erwartungswerte

Für das symmetrische SIAM ist die Funktion $w(k)$ achsensymmetrisch zur y -Achse. Diese Symmetrie wird für das asymmetrische SIAM gebrochen. Die Funktion $w(k)$ divergiert bei $k = 0$.

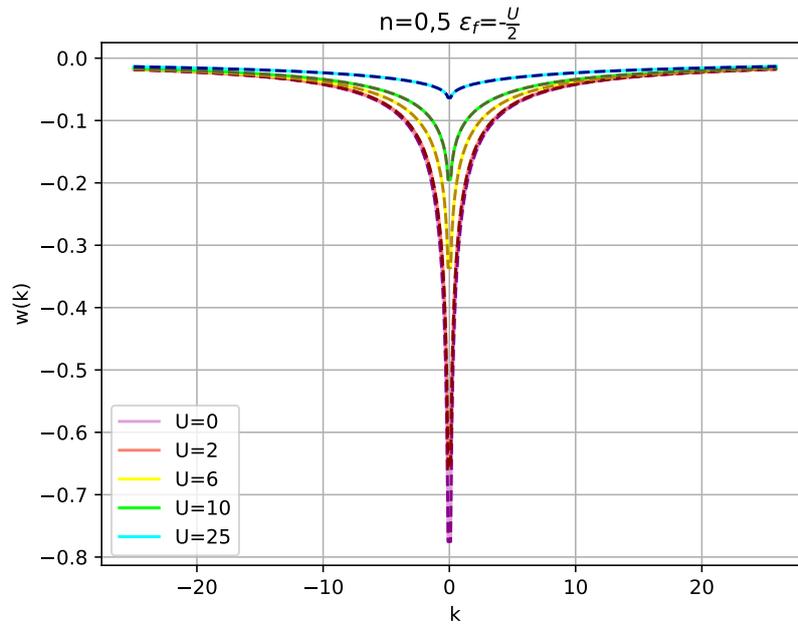


Abbildung 4.3: Vergleich der Ergebnisse für $w_{f_\sigma c_{k,\sigma}^\dagger}(k)$ (durchgezogene Linie) und $w_{f_\sigma^\dagger c_{k,\sigma}}(k)$ (gestrichelte Linie) für verschiedene Werte für U und den Parameter $n = 0,5$ und $\epsilon_f = -\frac{U}{2}$.

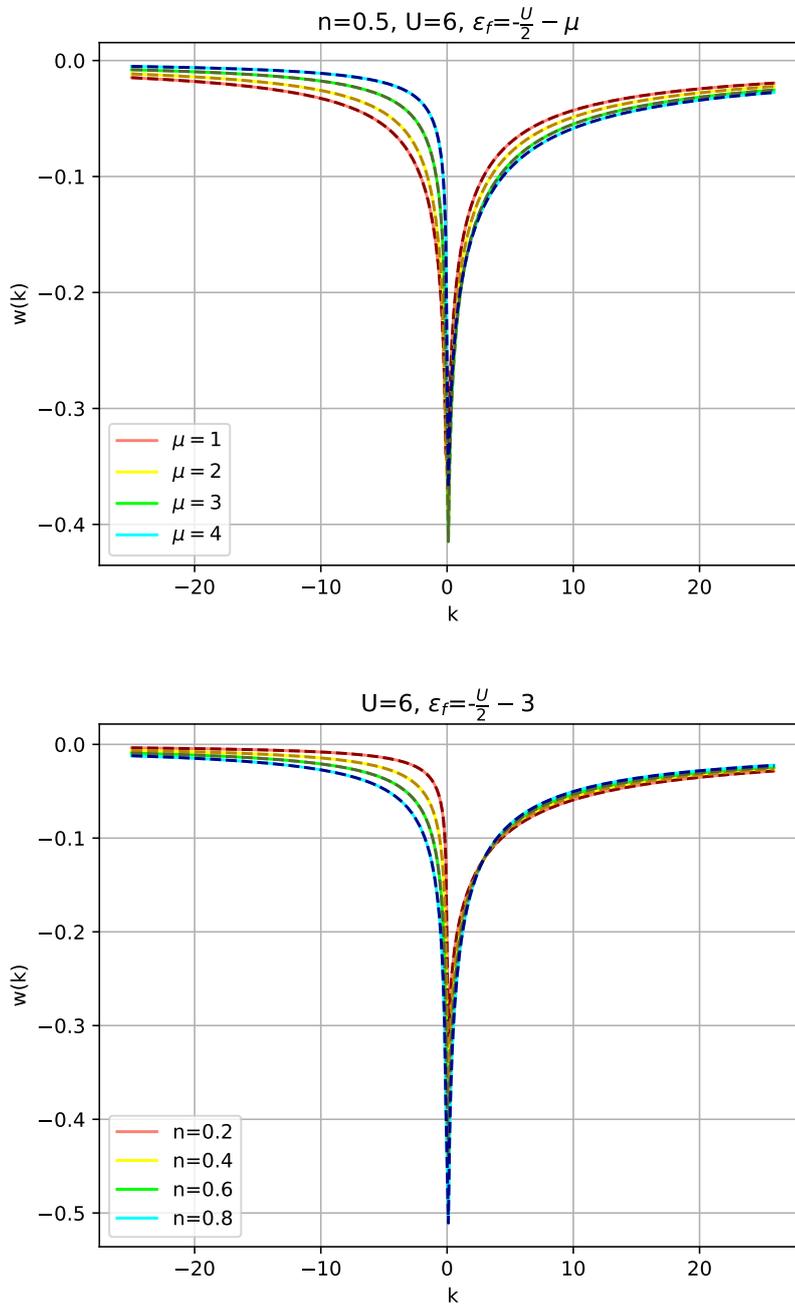


Abbildung 4.4: Vergleich der Ergebnisse für $w_{f_{\sigma}c_{k,\sigma}^{\dagger}}(k)$ (durchgezogene Linie) und $w_{f_{\sigma}^{\dagger}c_{k,\sigma}}(k)$ (gestrichelte Linie) mit den Parameter $U = 6$, $n = 0,5$ und $\epsilon_f = -\frac{U}{2} - \mu$ für verschiedene Werte für μ (oben) und mit den Parameter $U = 6$, $\mu = 3$ und $\epsilon_f = -\frac{U}{2} - \mu$ von verschiedene Werte für n (unten).

4.3 Überlegungen zur Funktion $H(x)$

Da die Funktion $w(k)$ jetzt bekannt ist, lassen sich einige Überlegungen zur Funktion $H(x)$ aufstellen. Mit den Gleichungen

$$\langle f_{\sigma}^{\dagger} c_{k,\sigma} \rangle = V_k w(k) \in \mathbb{R} \quad (4.62)$$

und

$$V_k = \frac{V}{\sqrt{N}} \quad (4.63)$$

lässt sich die Funktion $H(x)$ schreiben als

$$H(x) = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \sum_k \frac{V_k}{x + i\delta - \epsilon_k} \langle f_{\sigma}^{\dagger} c_{k,\sigma} \rangle = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \frac{V^2}{N} \sum_k \frac{w(k)}{x + i\delta - \epsilon_k}. \quad (4.64)$$

Im Limes $\delta \rightarrow 0^+$ kann die Funktion nach Gleichung (4.49) in Real- und Imaginärteil aufgeteilt werden

$$H(x) = \frac{V^2}{N} \sum_k \left(\frac{1}{x - \epsilon_k} - i\pi\delta(x - \epsilon_k) \right) w(k). \quad (4.65)$$

Um $H(x)$ im Breitbandlimes zu berechnen, wird zunächst eine kontinuierliche Beschreibung gewählt, um die Summe in ein Integral umschreiben zu können. Hierbei geht der Abstand zwischen zwei Energieniveaus der Badelektronen gegen Null, also $\Delta\epsilon \rightarrow 0$. Damit folgt für die Funktion $H(x)$

$$\begin{aligned} H(x) &= \lim_{\Delta\epsilon \rightarrow 0} \frac{V^2}{N} \sum_k \left(\frac{1}{x - \epsilon_k} - i\pi\delta(x - \epsilon_k) \right) w(k) \\ &= \frac{V^2}{N} \frac{N}{2D} \int_{-D}^D \left(\frac{1}{x - \epsilon} - i\pi\delta(x - \epsilon) \right) w(\epsilon) d\epsilon \\ &= \frac{\gamma}{\pi} \int_{-D}^D \left(\frac{1}{x - \epsilon} - i\pi\delta(x - \epsilon) \right) w(\epsilon) d\epsilon \\ &= \frac{\gamma}{\pi} \int_{-D}^D \frac{w(\epsilon)}{x - \epsilon} d\epsilon - i\gamma w(x) \Theta(x + D) \Theta(-x + D). \end{aligned} \quad (4.66)$$

Auch hier gilt $\gamma = \frac{\pi}{2} \frac{V^2}{N} = \text{konst.}$ und Θ ist die Heaviside Funktion. Im Breitbandlimes, also für $D \rightarrow \infty$, ergibt sich

$$H(x) = \frac{\gamma}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{w(\epsilon)}{x - \epsilon} d\epsilon - i\gamma w(x). \quad (4.67)$$

Der einfachste Fall ist das symmetrische SIAM. Für dieses System gilt $n = 0,5$ und $\epsilon_f = -U/2$, also $\tilde{\epsilon} = 0$. Für diesen Fall wird der Term $H(\omega) + H^*(-\omega + 2\tilde{\epsilon})$ betrachtet, der in der Spektraldichte der f-Elektronen in Gleichung (4.30) auftaucht

$$\begin{aligned}
 H(\omega) + H^*(-\omega) &= \frac{\gamma}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{w(\epsilon)}{\omega - \epsilon} d\epsilon - i\gamma w(\omega) + \frac{\gamma}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{w(\epsilon)}{-\omega - \epsilon} d\epsilon + i\gamma w(-\omega) \\
 &= \frac{\gamma}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{w(\epsilon)}{\omega - \epsilon} d\epsilon - \frac{\gamma}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{w(\epsilon)}{\omega + \epsilon} d\epsilon \\
 &= \frac{\gamma}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{w(\epsilon)}{\omega - \epsilon} d\epsilon - \frac{\gamma}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{w(-\epsilon)}{\omega - \epsilon} d\epsilon \\
 &= 0.
 \end{aligned} \tag{4.68}$$

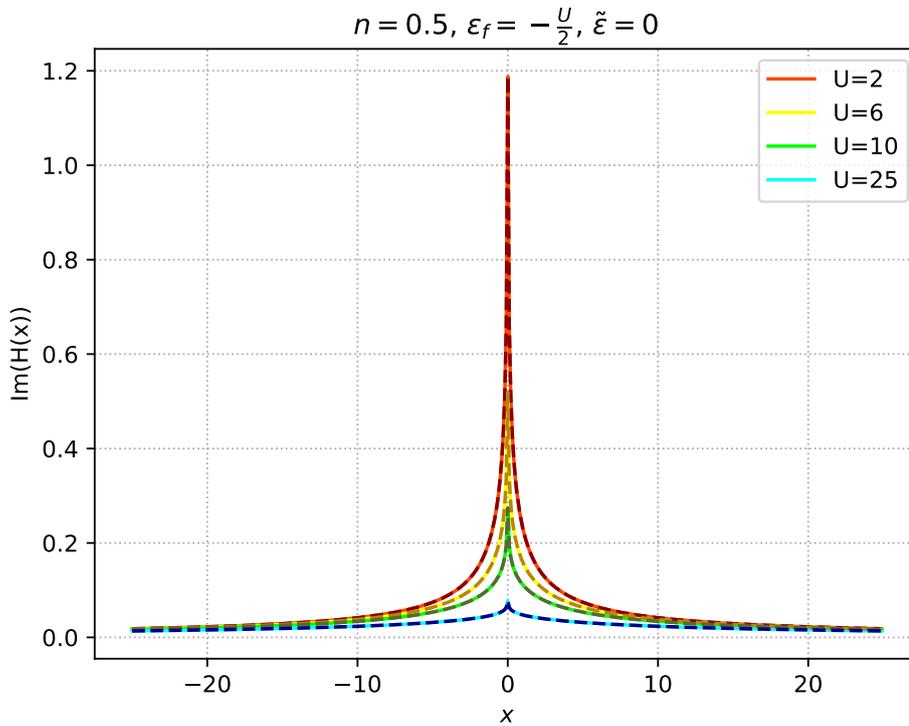


Abbildung 4.5: Imaginärteil der Funktionen $H(x)$ (helle Farbtöne) und $H(-x)$ (dunkle Farbtöne) für das symmetrische SIAM für verschiedene U .

Dabei wird ausgenutzt, dass die Funktion $w(k)$ für das symmetrische SIAM symmetrisch ist, es gilt $w(x) = w(-x)$. Der Term $H(\omega) + H^*(-\omega + 2\tilde{\epsilon})$ kürzt sich im

symmetrischen Fall also weg und die Spektraldichte ist nicht mehr abhängig von der Funktion $H(x)$. In den Abbildungen 4.5 und 4.6 sind der Imaginärteil und der Realteil der Funktion $H(x)$ und $H^*(-x)$ für das symmetrische SIAM für verschiedene U dargestellt. Dabei ist zu erkennen, dass $\text{Im}(H(x) - H(-x)) = 0$ und $\text{Re}(H(-x) + H(x)) = 0$ ist. Des Weiteren ist in den Abbildungen zu erkennen, dass der Imaginärteil von $H(x)$ bei $x = 0$ eine Divergenz aufweist, da $\text{Im}(H(x)) = -\gamma w(x)$ ist und $w(x)$ ebenfalls bei $x = 0$ divergiert. Der Realteil von $H(x)$ hat bei $x = 0$ einen Sprung.

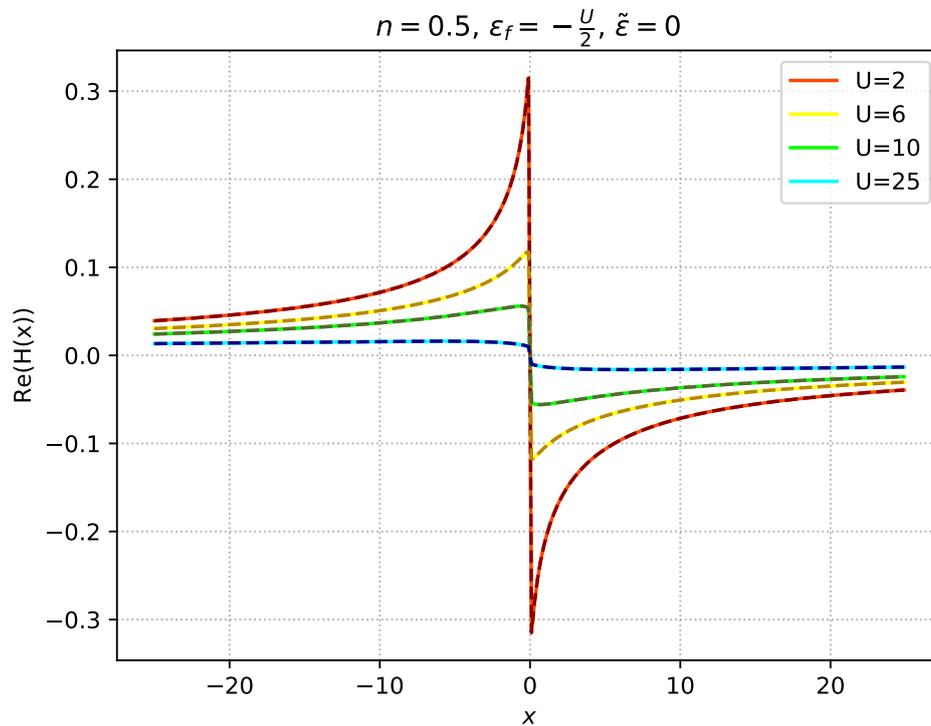


Abbildung 4.6: Realteil der Funktionen $H(x)$ (helle Farbtöne) und $-H(-x)$ (dunkle Farbtöne) für das symmetrische SIAM für verschiedene U .

5 Berechnungen der Integrale

Um die Erwartungswerte $\langle n \rangle$ und $w(k)$ berechnen zu können, müssen einige Integrale gelöst werden. Diese sind, bis auf die Hybridisierungsfunktion, analytisch nicht lösbar und müssen daher numerisch betrachtet werden. In diesem Kapitel werden die Methoden, mit denen die Integrale berechnet werden, dargelegt.

5.1 Analytische Betrachtung der Hybridisierungsfunktion

Die Hybridisierungsfunktion

$$\Gamma(x) = \sum_k \frac{V_k^2}{x + i\delta - \epsilon_k}, \quad \delta > 0 \quad (5.1)$$

lässt sich im Breitbandlimes analytisch berechnen. Mit der Relation $V_k = \frac{V}{\sqrt{N}}$ und der Gleichung (4.49) kann die Funktion in einen Real- und einen Imaginärteil aufgeteilt werden

$$\Gamma(x) = \frac{V^2}{N} \sum_k P \left[\frac{1}{x - \epsilon_k} \right] - i\pi\delta(x - \epsilon_k). \quad (5.2)$$

Im Breitbandlimes, also für $D \rightarrow \infty$ mit $\frac{V^2}{D} = \text{konst.}$, lässt sich mit einer kontinuierlichen Betrachtung, das heißt $\Delta\epsilon \rightarrow 0$, der Imaginärteil der Hybridisierungsfunktion berechnen zu

$$\begin{aligned} \text{Im}(\Gamma(x)) &= -\pi \lim_{\Delta\epsilon \rightarrow 0} \sum_k \frac{V^2}{N} \delta(\omega - \epsilon_k) \\ &= -\pi \frac{V^2}{N} \frac{N}{2D} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\omega - \epsilon) d\epsilon \\ &= -\pi \frac{V^2}{2D} := -\gamma = \text{konst.} \end{aligned} \quad (5.3)$$

und der Realteil zu

$$\begin{aligned}
 \operatorname{Re}(\Gamma(\omega)) &= \lim_{\Delta\epsilon \rightarrow 0} \sum_k \frac{V^2}{N} P\left[\frac{1}{\omega - \epsilon_k}\right] \\
 &= \frac{V^2}{N} \frac{N}{2D} \text{v.p.} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\omega - \epsilon} d\epsilon \\
 &= \frac{V^2}{2D} \ln \left| \frac{\omega + D}{\omega - D} \right| \\
 &\rightarrow 0.
 \end{aligned} \tag{5.4}$$

Somit gilt im Breitbandlimes für die Hybridisierungsfunktion

$$\Gamma(\omega) = -i\gamma. \tag{5.5}$$

5.2 Numerische Berechnungen von Integralen

Die Integrale, die sich nicht analytisch berechnen lassen, müssen numerisch bestimmt werden. Die genutzte Programmiersprache ist C++. Für die Integrale wird das Paket *GSL* [29] genutzt. Bei allen Funktionen aus diesem Paket lassen sich die folgenden Parameter einstellen:

- epsabs: gewünschte absolute Fehlergrenze
- epsrel: gewünschte relative Fehlergrenze
- limit: maximale Anzahl an Subintervallen
- ws: Speicherplatz für die Subintervalle

5.2.1 Integrale mit unendlichen Grenzen

Für Integrale mit unendlichen Grenzen wird die Funktion QAGI (engl.: Q: quadrature routine, A:adaptive integration, G:general integrand, I: infinite range of integration) genutzt. Dabei werden die Integrale, die über ein unendliches Intervall gehen, auf ein semi-offenes Intervall verschoben [29].

Für ein Integral mit unterer Grenze $-\infty$ wird die Funktion QAGII genutzt. Das Intervall $(-\infty, b)$ wird mit der Transformation $x = b - \frac{1-t}{t}$ auf das Intervall $(0, 1]$ projiziert nach

$$\int_{-\infty}^b f(x) dx = \int_0^1 \frac{b - f\left(\frac{1-t}{t}\right)}{t^2} dt. \tag{5.6}$$

Bei einem Integral mit oberer Intervallgrenze $-\infty$ wird das Intervall $[a, \infty)$ mit der Funktion QAGlu nach $x = a + \frac{1-t}{t}$ auf das Intervall $(0, 1]$ transformiert [29].

$$\int_a^\infty f(x)dx = \int_0^1 \frac{a + f\left(\frac{1-t}{t}\right)}{t^2} dt \quad (5.7)$$

Bei diesen Funktionen müssen zusätzlich zu den bereits genannten Parametern noch der Parameter a beziehungsweise b an die Funktion übergeben werden.

5.2.2 Integrale mit Singulärwerten

Ein Integral mit einem Singulärwert lässt sich mit der Funktion QAWC (engl.: Q: quadrature routine, A: adaptive integration, W: weight function with integrand, C: Cauchy principal value) aus dem Paket *GSL* [29] mithilfe des Cauchy Hauptwert Prinzips berechnen.

$$I = \int_a^b \frac{f(x)}{x-c} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\int_a^{c-\epsilon} \frac{f(x)}{x-c} + \int_{c+\epsilon}^b \frac{f(x)}{x-c} \right) \quad (5.8)$$

Als Parameter müssen zusätzlich zu den am Anfang aufgezählten noch die Intervallgrenzen a und b sowie die Polstelle c angegeben werden, wobei $a < c < b$ gelten muss.

5.2.3 Aufteilung von Integralen

Integrale, die sowohl Singulärwerte als auch unendliche Grenzen haben, werden aufgeteilt. Für ein Integral mit zwei unendlichen Grenzen gilt

$$\int_{-\infty}^\infty \frac{f(x)}{x-x_0} dx = \int_{-\infty}^{x_0-1} \frac{f(x)}{x-x_0} dx + \int_{x_0-1}^{x_0+1} \frac{f(x)}{x-x_0} dx + \int_{x_0+1}^\infty \frac{f(x)}{x-x_0} dx. \quad (5.9)$$

Für ein Integral mit nur einer unendlichen Integrationsgrenze, bei dem die Polstelle im Integralgebiet liegt ($-\infty < x_0 < b$), gilt

$$\int_{-\infty}^b \frac{f(x)}{x-x_0} dx = \int_{-\infty}^{x_0-1} \frac{f(x)}{x-x_0} dx + \int_{x_0-1}^{x_0+1} \frac{f(x)}{x-x_0} dx + \int_{x_0+1}^b \frac{f(x)}{x-x_0} dx. \quad (5.10)$$

Damit die Integrale aufgeteilt werden können, muss die Funktion $\frac{f(x)}{x-x_0}$ an den Stellen $x = x_0 - 1$ und $x = x_0 + 1$ stetig sein.

6 Ergebnisse

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse für die Besetzungszahl der Störstelle n_f sowie einige Spektraldichten der f-Elektronen für verschiedene Parameter dargestellt. Diese Werte werden mit Literaturwerten verglichen, um zu untersuchen, inwieweit die hier genutzte Methode der iEoM geeignet ist, um das SIAM zu beschreiben.

Die Besetzungszahl an der Störstelle entspricht der Summe über die spinabhängigen Besetzungszahlen der Störstelle

$$n_f = \sum_{\sigma} \langle n_{\sigma} \rangle = \langle n_{\uparrow} \rangle + \langle n_{\downarrow} \rangle = 2\langle n \rangle. \quad (6.1)$$

Da für die Berechnung des Erwartungswertes $\langle n \rangle$ ein Selbstkonsistenzproblem vorliegt, muss zur Berechnung von $\langle n \rangle$ und zur Berechnung der Spektraldichte $A_{f_{\sigma}f_{\sigma}^{\dagger}}(\omega)$ iteriert werden. Das Schema der Iteration wird wie folgt gewählt:

- 0) Wähle einen Startwert $\langle n_i \rangle = \langle n_0 \rangle$
- 1) Berechne $w_i(k)$ mit $\langle n_i \rangle$
- 2) Berechne $A_{ff^{\dagger},i}(\omega)$ mit $\langle n_i \rangle$ und $w_i(k)$
- 3) Berechne $\langle n_{i+1} \rangle$ aus $A_{ff^{\dagger},i}(\omega)$
- 4) $i+1 \rightarrow i$ und beginne mit 1), bis $|\langle n_i \rangle - \langle n_{i+1} \rangle| < \text{err}$, wobei err der gewünschten Genauigkeit entspricht

Im Folgenden wird als Startwert zunächst Halbfüllung gewählt, d.h. $\langle n_0 \rangle = 0,5$ und es werden verschiedene Fälle betrachtet. Zuerst wird der Fall $U = 0$ und das symmetrische SIAM untersucht. Anschließend wird für die Betrachtung des asymmetrischen SIAMs zunächst die Näherung $w(k) = \text{konst.}$ für $U = 2, 6, 25$ und 1000 genutzt. Danach werden diese Fälle mit der nicht genäherten Funktion $w(k)$ berechnet. Zuletzt wird der Limes $U \rightarrow \infty$ betrachtet.

6.1 Verschwindende Coulomb Wechselwirkung

Für den Fall $U = 0$ gibt es keine Coulomb Wechselwirkung zwischen den Störstellenelektronen. In der Greenfunktion in Gleichung (4.28) fallen alle Terme bis auf $R_{11}(\omega)$ weg und sie vereinfacht sich zu

$$G_{f_\sigma f_\sigma^\dagger}^{\text{ret}}(\omega) = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} [R_{11}(\omega)]. \quad (6.2)$$

Damit lässt sich die Spektraldichte für $U = 0$ berechnen nach

$$A_{f_\sigma f_\sigma^\dagger}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\lim_{\delta \rightarrow 0^+} R_{11}(\omega) \right]. \quad (6.3)$$

Hier liegt kein Selbstkonsistenzproblem vor, da $A_{f_\sigma f_\sigma^\dagger}(\omega)$ nicht mehr von $\langle n \rangle$ abhängig ist. Die Besetzungszahl lässt sich ohne Iteration berechnen zu $\langle n \rangle = 0,5$ bzw. $n_f = 1$. Für $U = 0$ liegt Halbfüllung vor. Die Spektraldichte für $U = 0$ ist in Abbildung 6.1 dargestellt. Wie zu erwarten, ist eine Lorentzkurve um $\omega = 0$ zu erkennen. Der Fit einer Lorentzkurve nach

$$f(\omega) = \frac{\gamma}{\pi} \frac{1}{\omega^2 + \gamma_{\text{fit}}^2} \quad (6.4)$$

an die berechneten Daten mit der Funktion "scipy.optimize.curve_fit" in Python [30] ergibt eine Halbwertsbreite von

$$\gamma_{\text{fit}} = 1,000001 \pm 5,4 \cdot 10^{-8}, \quad (6.5)$$

was dem erwarteten Wert von $\gamma = 1$ entspricht. Für $U = 0$ liefert die hier gewählte Methode also gut Ergebnisse.

6.2 Symmetrischer Fall

Im symmetrischen Fall befindet sich das System in Halbfüllung, also $\langle n \rangle = 0,5$ bzw. $n_f = 1$, und es gilt $\epsilon_f = -\frac{U}{2}$ und damit $\tilde{\epsilon} = 0$. Da für diesen Fall

$$H^*(-\omega) + H(\omega) = 0 \quad (6.6)$$

gilt, siehe Gleichung (4.68), vereinfacht sich die Spektraldichte zu

$$A_{f_\sigma f_\sigma^\dagger}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\lim_{\delta \rightarrow 0^+} R_{11}(\omega) \right]. \quad (6.7)$$

Sie ist für verschiedene U in Abbildung 6.1 dargestellt.

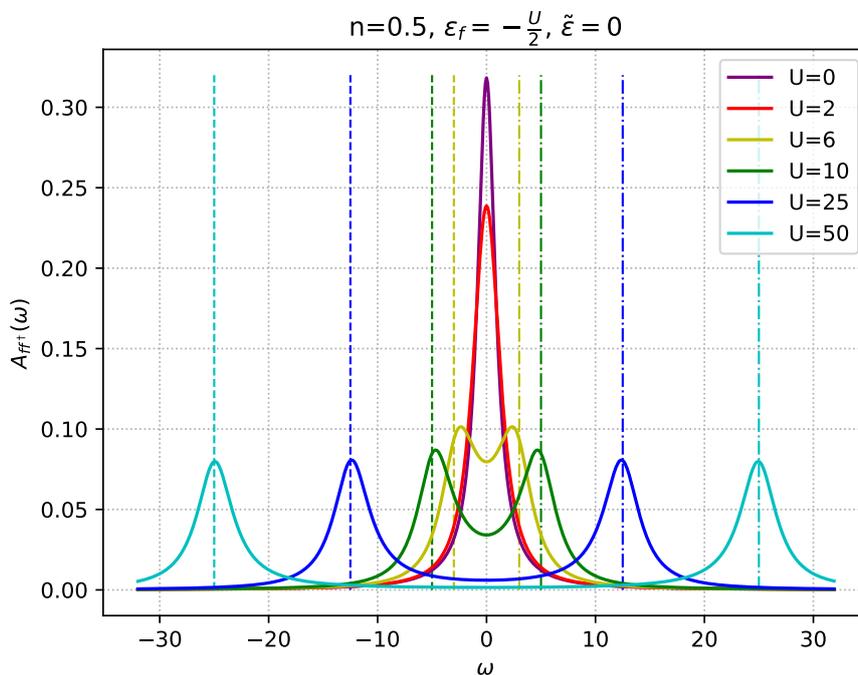


Abbildung 6.1: Spektraldichte der f-Elektronen des symmetrischen SIAMs für verschiedene U . Die gestrichelten Linien zeigen die Werte für $\omega = \epsilon_f = -\frac{U}{2}$ farblich passend zu den U Werten an, die Linie mit abwechselnden Punkten und Strichen die Werte bei $\omega = \epsilon_f + U = \frac{U}{2}$.

Wie zu erwarten, zeichnen sich für größere U die Hubbard Satelliten bei $\omega = \epsilon_f = -\frac{U}{2}$ (gestrichelte Linien) und $\omega = \epsilon_f + U = \frac{U}{2}$ (Linie mit abwechselnd Punkten und Strichen) ab. Bei Temperaturen, die kleiner als die Kondo Temperatur sind, sollte der Kondo Peak bei $\omega = 0$ erkennbar sein. In der Abbildung ist er jedoch nicht zu erkennen, obwohl hier $T = 0$ betrachtet wird. Dies liegt unter anderem an der trunkeierten Basis, bei der in dieser Arbeit nur 6 Basisoperatoren berücksichtigt wurden.

Mit der hier genutzten Methode der iEoM lassen sich also für das symmetrische SIAM die Hubbard Satelliten in der Spektraldichte der f-Elektronen bestimmen. Der Kondo Peak lässt sich jedoch nicht berechnen.

6.3 Näherung der Funktion $w(k)$ als konstant

Im asymmetrischen Bereich des SIAMs verschiebt sich die Energie ϵ_f nach Gleichung (2.5) um ein chemisches Potential μ . Um eine erste Abschätzung in diesem Bereich zu erhalten, wird zunächst $w(k) = \text{konst.} = w_{\text{konst}}$ angenommen. Im Breitbandlimes lässt sich mit dieser Näherung die Funktion $H(x)$ genauer berechnen

$$\begin{aligned}
 H(x) &= \lim_{\Delta\epsilon \rightarrow 0} \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \sum_k \frac{V_k^2}{x + i\delta - \epsilon_k} w_{\text{konst}} \\
 &= w_{\text{konst}} \lim_{\Delta\epsilon \rightarrow 0} \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \sum_k \frac{V_k^2}{x + i\delta - \epsilon_k} \\
 &= w_{\text{konst}} \lim_{\Delta\epsilon \rightarrow 0} \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \Gamma(x) \\
 &= -iw_{\text{konst}}\gamma.
 \end{aligned} \tag{6.8}$$

Damit wird die Spektraldichte zu

$$\begin{aligned}
 A_{ff^\dagger}(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left(\lim_{\delta \rightarrow 0^+} [R_{11} + R_{12} (2\langle n \rangle - 1 + 2H(\omega) + 2H^*(-\omega + 2\tilde{\epsilon}))] \right) \\
 &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left(\lim_{\delta \rightarrow 0^+} [R_{11} + R_{12} (2\langle n \rangle - 1 - 2iw_{\text{konst}}\gamma + 2iw_{\text{konst}}\gamma)] \right) \\
 &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left(\lim_{\delta \rightarrow 0^+} [R_{11} + R_{12} (2\langle n \rangle - 1)] \right).
 \end{aligned} \tag{6.9}$$

Sie ist nicht mehr von der Funktion $H(x)$ abhängig und pro Iteration muss nur noch das Integral über die Spektraldichte berechnet werden. Für dieses Integral wird die Funktion QAGII mit den Parametern $\text{ws} = 1000$, $\text{limit} = 1000$, $\text{epsabs} = 0$ und $\text{epsrel} = 10^{-10}$ genutzt, siehe Kapitel 5.2.1. Bei der Iteration wird eine Genauigkeit von $\text{err} = 10^{-10}$ gewählt.

Die Besetzungszahl der Störstelle n_f wird für $U = 2, 6, 25$ und 1000 berechnet. In den Abbildungen 6.2 und 6.3 sind die Ergebnisse im Vergleich mit den Werten für allgemeine U aus [13] und bei $U = 1000$ auch mit denen für $U = \infty$ aus [12] dargestellt. Die berechneten Daten sind durch die blauen Linien gekennzeichnet, die Literaturwerte durch schwarz bzw. grau gestrichelte Linien.

Für die Daten mit $U = 2, 6$ und 25 wird eine Spiegelung im Punkt $\epsilon_f = -\frac{U}{2}$ und $n_f = 1$ durchgeführt (gelb gestrichelte Linie). Dieser Punkt entspricht dem symmetrischen SIAM. Durch die Spiegelungen ist zu erkennen, dass die Graphen punktsymmetrisch in diesem Punkt sind. Für einen Vergleich mit den Literaturwerten für den Bereich $n_f > 1$ bzw. $\epsilon_f < -\frac{U}{2}$ werden auch die Werte von Wiegmann in diesem Punkt gespiegelt.

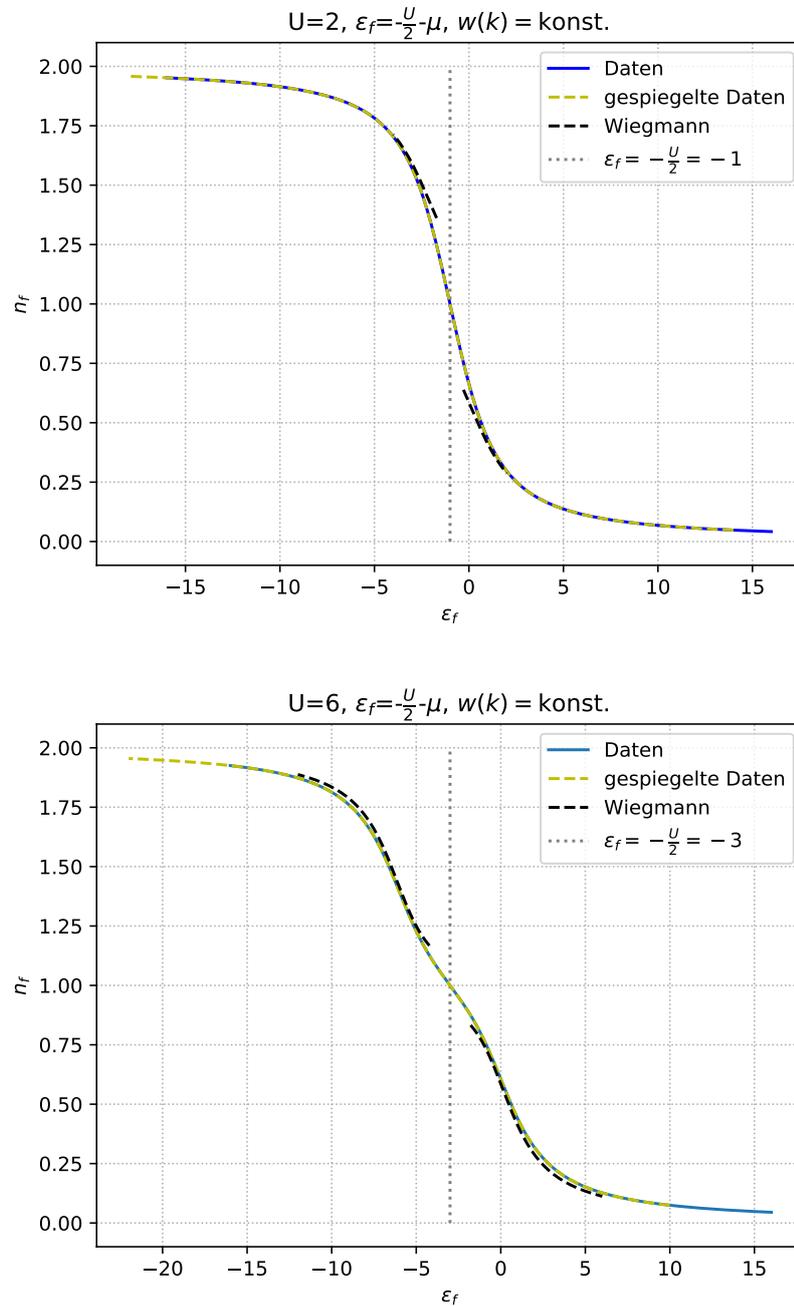


Abbildung 6.2: n_f in Abhängigkeit von ϵ_f im Breitbandlimes für $w(k) = \text{konst.}$ und $U = 2, 6$. Die untere schwarz gestrichelte Linie entspricht dem Ergebnis des Bethe Ansatzes aus [13], die obere gestrichelte schwarze Linie entspricht der Spiegelung der Werte um $\epsilon_f = -\frac{U}{2}$. Die grau gepunktete Linie kennzeichnet den Wert $\epsilon_f = -\frac{U}{2}$.

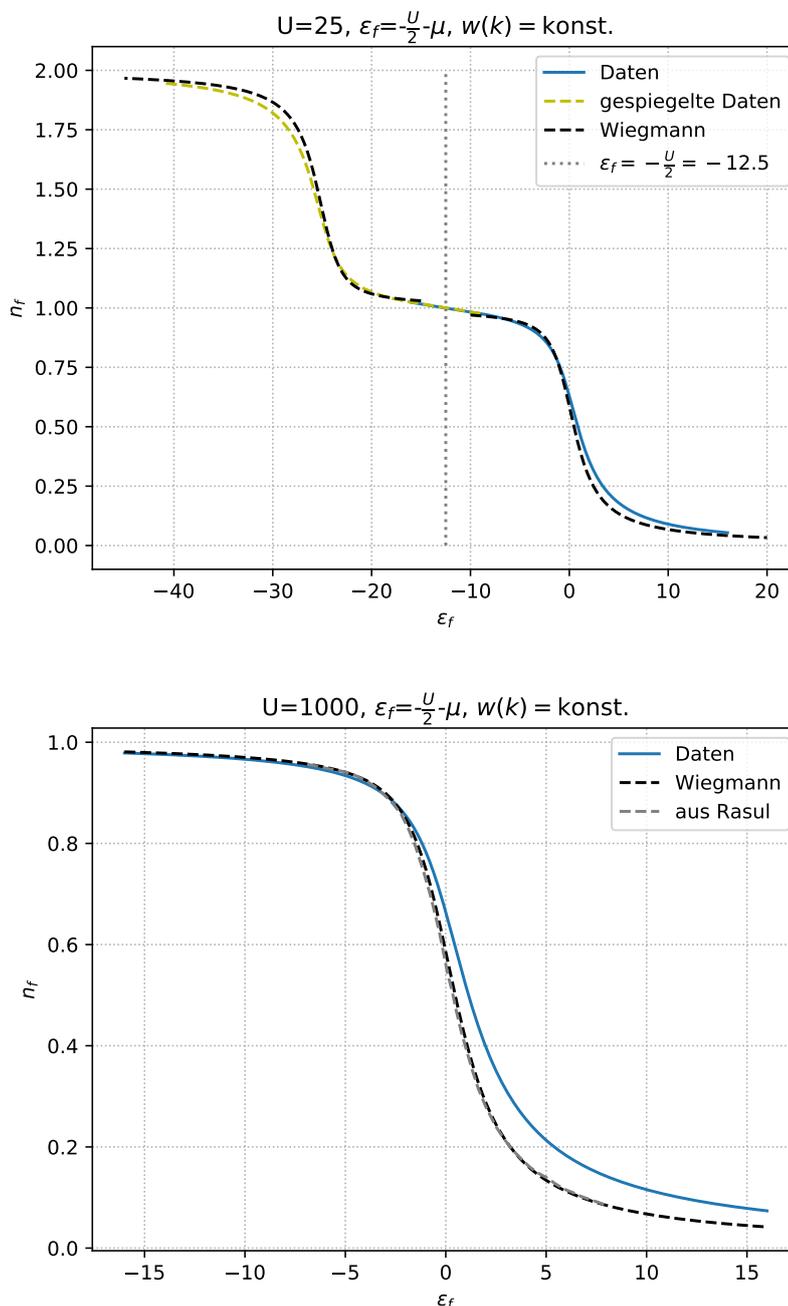


Abbildung 6.3: n_f in Abhängigkeit von ϵ_f im Breitbandlimes für $w(k) = \text{konst.}$ und $U = 25, 1000$. Die untere schwarz gestrichelte Linie entspricht dem Ergebnis des Bethe Ansatzes aus [13], die obere gestrichelte schwarze Linie entspricht der Spiegelung der Werte um $\epsilon_f = -\frac{U}{2}$. Die grau gepunktete Linie kennzeichnet den Wert $\epsilon_f = -\frac{U}{2}$. Für $U = 1000$ wird keine Spiegelung vorgenommen. Da dieser U -Wert sehr hoch ist, wird er zusätzlich noch mit den exakten Ergebnissen für $U = \infty$ aus [12] verglichen.

Die Ergebnisse von Wiegmann sind nur für bestimmte Bereiche gültig, wie in Gleichung (2.2) beschrieben ist. Die Gültigkeitsbereiche für die hier genutzten U -Werte sind in Tabelle 6.1 aufgeführt. In den Abbildungen 6.2 und 6.3 sind nur diese Ausschnitte der Werte von Wiegmann dargestellt. Aufgrund der Gültigkeitsbedingung $U \gg \gamma$ liefern die Werte von Wiegmann für kleine U nur einen sehr groben Vergleichswert.

U	Gültigkeitsbereich
2	$-0,2929 \ll \epsilon_f \ll 2$
6	$-1,7753 \ll \epsilon_f \ll 6$
25	$-10 \ll \epsilon_f \ll 25$
1000	$-484,19 \ll \epsilon_f \ll 1000$

Tabelle 6.1: Gültigkeitsbereiche der Werte von Wiegmann [13] für die hier betrachtete U .

Obwohl die Basis auf nur 6 Basisoperatoren trunkiert wurde und trotz der Näherung $w(k) = \text{konst.}$ passen die hier berechneten Werte gut zu den Literaturwerten. Diese Näherung ist für kleinere U im Bereich schwacher Besetzung besser als für größere U . Die Kurven schneiden alle den Symmetriepunkt ($n_f = 1$ und $\epsilon_f = -\frac{U}{2}$) und sind punktsymmetrisch in diesem Punkt. Die hier berechneten Werte geben eine grobe Näherung für n_f an.

Die Spektraldichte der f-Elektronen im Breitbandlimes für $U = 25$ und $w(k) = \text{konst.}$ ist in Abbildung 6.4 für verschiedene μ dargestellt. In der Spektraldichte sind die Hubbard Satelliten bei ca $\omega = \epsilon_f$ und $\omega = \epsilon_f + U$ erkennbar. Die senkrechten, gestrichelten (abwechselnd gestrichelt und gepunkteten) Linien kennzeichnen jeweils die Orte der linken (rechten) Satelliten farblich passend zum betrachteten U -Wert. Der Kondo Peak ist nicht erkennbar. Dies entspricht der Erwartung, da er auch für den symmetrischen Fall mit der hier gewählten Basis nicht berechnet werden kann.

Die in dieser Arbeit genutzten Methode liefert also trotz der Näherung $w(k) = \text{konst.}$ eine grobe Näherung für die Besetzungszahl n_f bei endliche U . Die Hubbard Satelliten in der Spektraldichte lassen sich ebenfalls bestimmen. Der Kondo Peak lässt sich wie im symmetrischen Fall nicht berechnen.

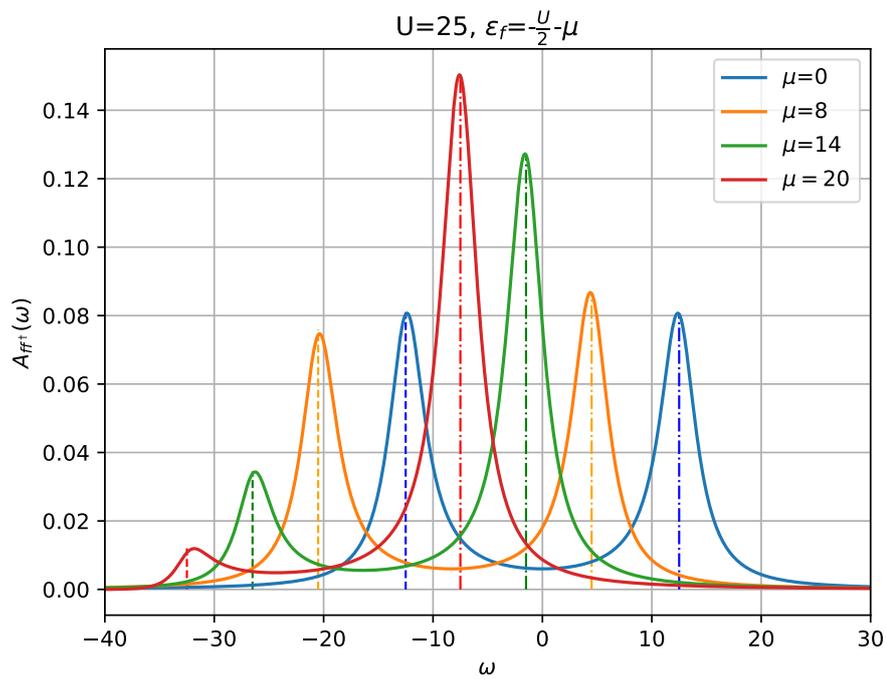


Abbildung 6.4: Spektraldichte der f-Elektronen für $U = 25$, $w(k) = \text{konst.}$ und verschiedene μ . Die vertikalen gestrichelten Linien kennzeichnen $\omega = \epsilon_f$, die abwechselnd gepunktet und gestrichelte Linien kennzeichnen $\omega = \epsilon_f + U$.

6.4 Endliche Coulomb Wechselwirkung

Als nächstes wird $w(k)$ ohne Näherung, also wie in Gleichung (4.51), betrachtet. Hier kürzt sich die Funktion $H(x)$ im asymmetrischen Fall nicht mehr heraus, wodurch mehr Integrale numerisch berechnet werden müssen als im letzten Unterkapitel. Diese Integrale werden mit den in Kapitel 5 dargestellten Funktionen berechnet. Das Integral in $w(k)$ wird nach Gleichung (5.10) aufgeteilt und mit den Funktionen QAGI und QAWC berechnet. Das Integral in $H(x)$ wird nach Gleichung (5.9) aufgeteilt und mit den Funktionen QAGI und QAWC berechnet. Für das Integral über $A_{f_{\sigma}f_{\sigma}^{\dagger}}(\omega)$ wird die Funktion QAGI genutzt. Die Parameter der Funktionen sind in Tabelle 6.2 dargestellt. Die gewünschte Genauigkeit err der Iterationen wird an die relative Fehlergrenze epsrel bei der Integration über $A_{f_{\sigma}f_{\sigma}^{\dagger}}(\omega)$ angepasst.

	$w(k)$	$H(x)$	$A_{f_{\sigma}f_{\sigma}^{\dagger}}(\omega)$
Funktion	QAGI, QAWC	QAGI, QAWC	QAGI
epsabs	10^{-10}	10^{-8}	10^{-7}
epsrel	10^{-8}	10^{-7}	10^{-5}
limit	10000	1000	1000
ws	1000	1000	1000

Tabelle 6.2: Parameter für die Berechnungen der Integrale mit den in Kapitel 5 beschriebenen Funktionen. Dabei wird das Integral in $w(k)$ nach Gleichung (5.10) aufgeteilt, dass in $H(x)$ nach (5.9).

Mit diesen Parametern wird die Besetzungszahl der Störstelle n_f für verschiedene Werte von U berechnet.

6.4.1 $U = 2$

Zuerst wird die Besetzungszahl der Störstelle n_f für $U = 2$ berechnet. In Abbildung 6.5 ist n_f gegen ϵ_f zusammen mit den exakten Werten von Wiegmann [13] dargestellt, wobei die Daten für $n_f \in (1, 2)$ von Wiegmann durch Spiegelung in dem Punkt $n_f = 1$ und $\epsilon_f = -U/2 = -1$ aus den eigentlichen Werten gewonnen wurden. Die vertikale, grau gepunktete Linie kennzeichnet $\epsilon_f = -1$. Der Graph schneidet die Linie bei $n_f = 1$, was dem symmetrischen Fall entspricht, und ist punktsymmetrisch in diesem Punkt. Dies wird durch die Spiegelung der eigentlichen Daten im Symmetriepunkt bestätigt (gelbe Linie), da diese Werte exakt auf den blauen Datenpunkten liegen. Um den Symmetriepunkt herum ist ein leichter Knick in der Kurve zu erkennen. Bei dem Vergleich mit den Literaturwerten von Wiegmann muss hier wieder auf die Gültigkeitsbereiche der Werte geachtet werden, siehe Tabelle 6.1. Wegen der

Bedingung $U \gg \gamma$ kann für $U = 2$ nur ein grober Vergleich gezogen werden. In dem Bereich schwacher Besetzung stimmen die berechneten Daten besser mit den Literaturwerten überein als in dem Bereich näher am Symmetriepunkt der Kurve.

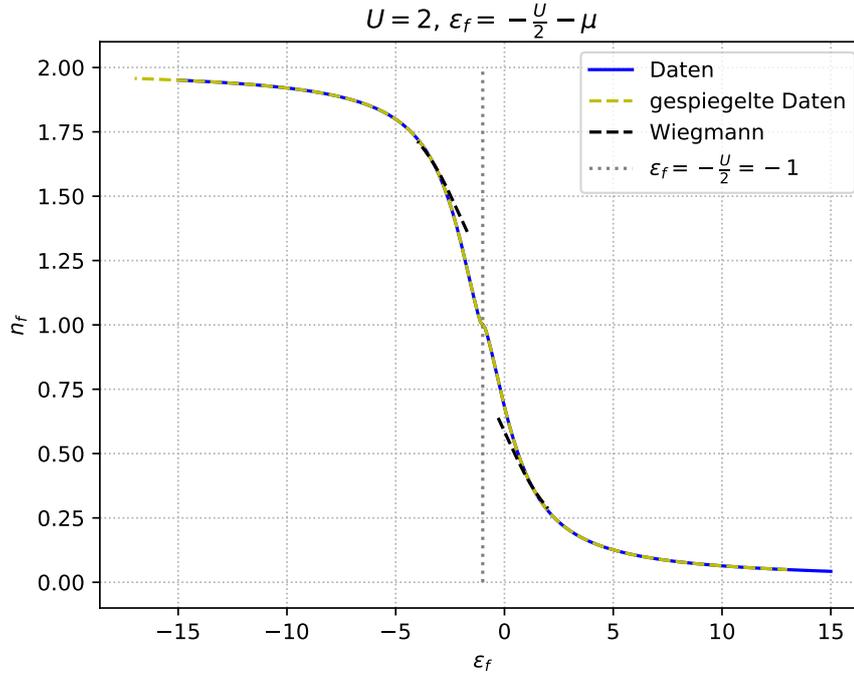


Abbildung 6.5: Die Besetzungszahl der Störstelle n_f in Abhängigkeit von ϵ_f für $U = 2$ und im Vergleich mit den Daten aus dem Paper von Wiegmann [13]. Der Bereich aus $n_f \in (1, 2)$ wurde durch Spiegelung im Punkt $n_f = 1$ und $\epsilon_f = -1$ aus den eigentlichen Werten gewonnen. Die grau gepunktete Linie liegt bei $\epsilon_f = -U/2 = -1$.

In Abbildung 6.6 sind einige Spektraldichten für $U = 2$ und verschiedene μ dargestellt. Die Kurven haben die Form einzelner Lorentzkurven und sind um den Punkt $\omega = -\mu$ zentriert. Die Kurven mit positiven μ sind nach links verschoben. Ihr Maximum ist größer als das des symmetrischen SIAMs, es nimmt aber mit zunehmenden μ ab. Die Kurve mit $\mu = -2$ ist eine Spiegelung der Kurve von $\mu = 2$ an $\omega = 0$. Die Kurven des asymmetrischen SIAMs haben Ausreißer um die Punkte $\omega = 0$ und $\omega = 2\tilde{\epsilon} = -2\mu$. Das liegt an den Funktionen $H(\omega)$ und $H^*(-\omega + 2\tilde{\epsilon})$ in der Spektraldichte aus Gleichung (4.30). Für $\omega = 0$ muss $H(0)$ und für $\omega = 2\tilde{\epsilon}$ muss $H^*(0)$ ausgewertet werden, was im Realteil der Funktion einen Sprung und im Imaginärteil eine Divergenz mit sich bringt, siehe Abbildungen 4.5 und 4.6. Da sich

für das symmetrische SIAM beide Terme gegenseitig wegheben, entstehen für $\mu = 0$ keine Ausreißer. Der gesamte Flächeninhalt unter den einzelnen Spektraldichten ist trotz der Ausreißer gleich eins.

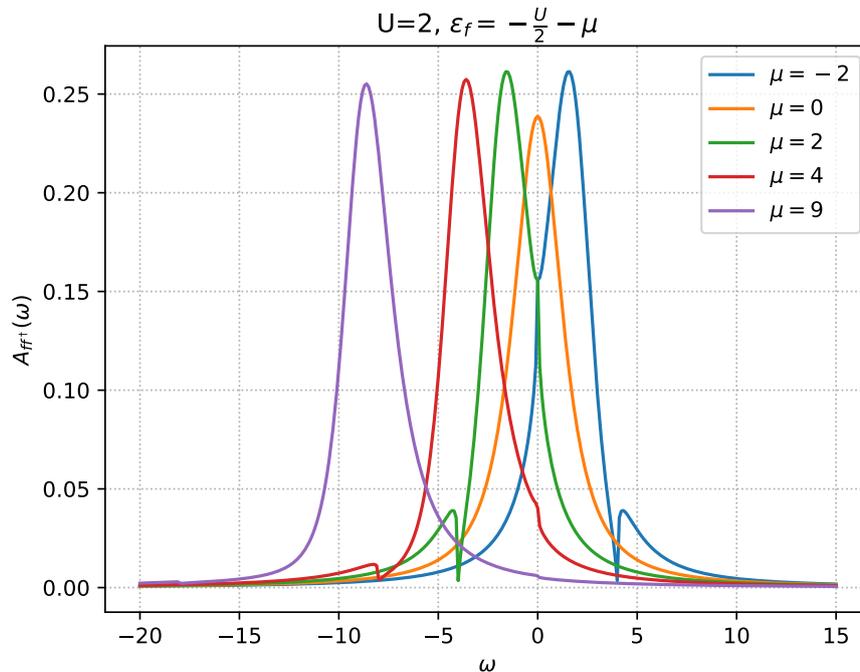


Abbildung 6.6: Die Spektraldichte für $U = 2$ und unterschiedliche μ .

In Abbildung 6.7 ist die Iterationsanzahl aus der Berechnung der Besetzungszahl in Abhängigkeit von ϵ_f für $U = 2$ dargestellt. Bei der durchgezogenen, blauen Linie wurde der Startwert für jede Berechnung zu $\langle n \rangle = 0,5$ gewählt. Bei der gestrichelten, orangenen Linie wird ausgehend von $\epsilon_f = -\frac{U}{2} - \mu_0$ mit $\mu_0 = 0$ die Besetzungszahl berechnet und das Ergebnis der letzten Berechnung nach $\langle n_0 \rangle_{\mu_j} = \langle n \rangle_{\mu_{j-1}}$ als Startwert für die nächste Rechnung genutzt. Diese Berechnungen benötigen eine geringere Iterationsanzahl als die, bei denen als Startwert $\langle n \rangle = 0,5$ gewählt wird. Dies war zu erwarten, da $\langle n \rangle_{\mu_{j-1}}$ mindestens so nah an dem zu erwartenden Erwartungswert liegt wie $\langle n_0 \rangle = 0,5$. Die Anzahl benötigter Iterationen ist symmetrisch um $\epsilon_f = -\frac{U}{2}$, also um den Symmetriepunkt, verteilt. Dies war zu erwarten, da auch die Besetzungszahl n_f um diesen Punkt eine Symmetrie aufweist. Die Anzahl an Iterationen verringert sich, je weiter ϵ_f vom Symmetriepunkt entfernt ist. Am Symmetriepunkt selbst wird nur eine Iteration benötigt, da dort Halfüllung vorliegt und der dort gewählte

Startwert bei $\langle n_0 \rangle = 0,5$ liegt.

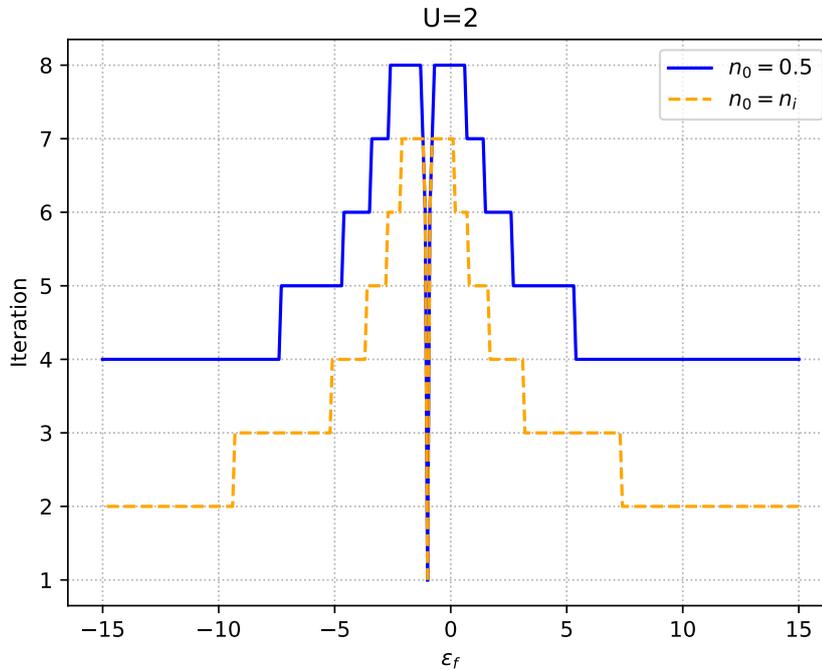


Abbildung 6.7: Iterationsanzahl bei Berechnung der Besetzungszahl in Abhängigkeit von ϵ_f für $U = 2$. Bei der durchgezogenen Linie wurde der Startwert für jede Berechnung gleich 0,5 gewählt, bei der gestrichelten Linie wird als Startwert das Ergebnis der vorherigen Berechnung genutzt (die Berechnungen starten bei $\epsilon_f = -U/2$).

Obwohl die Anzahl der benötigten Iterationen symmetrisch um den Symmetriepunkt verteilt ist, dauern die Berechnungen in dem Bereich $\epsilon_f < -\frac{U}{2}$ länger als in dem Bereich $\epsilon_f > -\frac{U}{2}$. Die Zeit, die für die Berechnung $\langle n \rangle$ benötigt wird, ist in Abbildung 6.8 in Abhängigkeit von ϵ_f dargestellt. Die Zeit ist abhängig vom für die Berechnungen genutzten Computer. Der Grund der unterschiedlichen Berechnungsgeschwindigkeit liegt in der Berechnung der Integrale, welche in dem Bereich $\epsilon_f < -\frac{U}{2}$ schwerer zu lösen sind. Der Peak bei kleinen U ist um $\omega = -\mu$ zentriert bzw. die Hubbard Satelliten bei größeren U um $\omega = \epsilon_f$ und $\omega = \epsilon_f + U$. Je kleiner ϵ_f wird, desto mehr verschieben sich der Peak bzw. die Satelliten in den negativen Bereich, also in den Bereich, über den integriert wird. Für kleinere ϵ_f ist die Struktur der Spektraldichte, über die integriert wird, komplizierter und es werden mehr Stützstellen zur Berechnung benötigt.

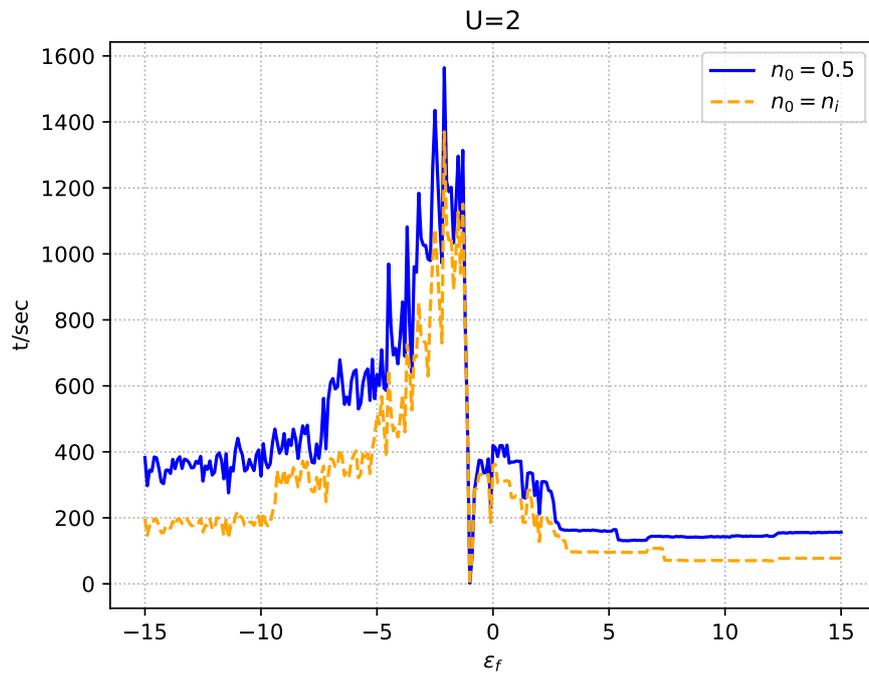


Abbildung 6.8: Zeit für Berechnung der Besetzungszahl in Abhängigkeit von ϵ_f für $U = 2$. Bei der durchgezogenen Linie wurde der Startwert für jede Berechnung gleich 0,5 gewählt, bei der gestrichelten Linie wurde als Startwert das Ergebnis der vorherigen Berechnung genutzt (die Berechnungen starten bei $\epsilon_f = -U/2$).

Die in dieser Arbeit genutzte Methode der iEoM gibt für $U = 2$ eine Näherung der Besetzungszahl n_f an. Die Spektraldichten in Form von Lorenzkurven lassen sich mit der Methode berechnen, es treten aber Ausreißer auf, deren Ursprünge in den analytischen Rechnungen liegen. Des Weiteren sind die Berechnungen der Besetzungszahlen aufgrund der Integrale im Bereich $\epsilon_f < -\frac{U}{2}$ zeitaufwändiger als im Bereich $\epsilon_f > -\frac{U}{2}$. Für die folgenden Berechnungen wird für den Startwert das Schema $\langle n_0 \rangle_{\mu_j} = \langle n \rangle_{\mu_{j-1}}$ mit dem Startpunkt $\mu_0 = 0$ genutzt, da die benötigte Iterationsanzahl so kleiner ist als mit $\langle n_0 \rangle = 0,5$.

6.4.2 $U = 6$

In Abbildung 6.9 ist n_f gegen ϵ_f für $U = 6$ dargestellt. Auch hier werden die Literaturwerte aus [13] zum Vergleich genutzt und im Symmetriepunkt gespiegelt, um Vergleichswerte im Bereich $n_f \in (1, 2)$ zu erhalten. Im Gegensatz zu den Berechnungen von $U = 2$ lassen sich die Integrale für $U = 6$ im Bereich $\epsilon_f < -\frac{U}{2}$ nicht mehr für alle ϵ_f Werte mit den hier genutzten Funktionen berechnen. Daher wurden hier die Werte aus dem Bereich $\epsilon_f > -\frac{U}{2}$ (blaue Kurve) im Symmetriepunkt gespiegelt (gelbe Linie) und mit einzelnen, im Bereich $\epsilon_f < -\frac{U}{2}$ berechneten Punkten (grüne Kreuze) verglichen. Diese Werte liegen auf der gespiegelten Linie, was die Symmetrie der Kurve bestätigt. Auch für $U = 6$ liegen die berechneten Werte im Bereich kleiner und großer Besetzung gut auf den exakten Werten und auch hier weichen die Ergebnisse nahe des Symmetriepunktes stärker ab. Des Weiteren ist die Ausbildung eines Plateaus um den Symmetriepunkt zu erkennen. Im Fall $U = 2$ war nur ein leichter Knick am Symmetriepunkt vorhanden. Dies lässt sich anhand der Spektralfunktion der f-Elektronen erklären, welche für den symmetrischen Fall in Abbildung 6.1 dargestellt ist. Für $U = 2$ ist nur eine um $\omega = 0$ zentrierte Lorentzkurve zu erkennen, welche für $U = 6$ bereits anfängt, sich in zwei Hubbard Satelliten aufzuteilen. Dies spiegelt sich in der Ausbildung eines Plateaus im Graphen der Besetzungszahl wider.

Die Methode der iEoM eignet sich also, um für $U = 6$ eine Näherung der Besetzungszahl n_f zu berechnen.

6.4.3 $U = 25$

Das Plateau wird für größer werdende U ebenfalls größer. In Abbildung 6.10 ist die Besetzungszahl n_f gegen ϵ_f für $U = 25$ dargestellt und es ist ein deutlich größeres Plateau um den Symmetriepunkt bei $n_f = 1$ und $\epsilon_f = -12,5$ zu erkennen. Auch hier werden die berechneten Daten (blaue Kurven) mit denen von Wiegmann [13]

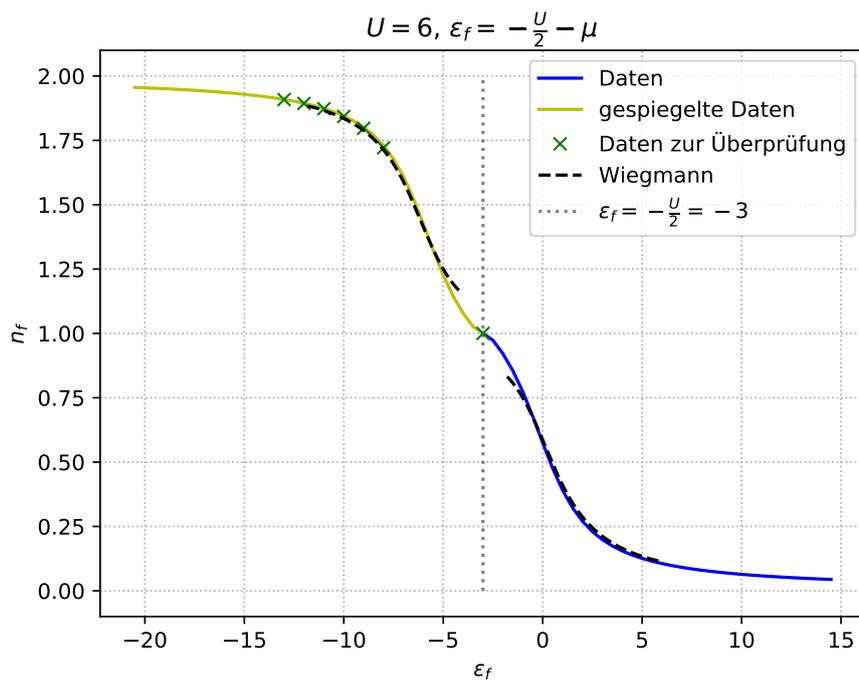


Abbildung 6.9: Besetzungszahl der Störstelle n_f in Abhängigkeit von ϵ_f für $U = 6$ (blaue Linie). Die Werte werden im Symmetriepunkt $n_f = 1$ und $\epsilon_f = -3$ gespiegelt (gelbe Linie) und mit einzelnen, berechneten Werten im Bereich $\epsilon_f < -3$ (grüne Kreuze) verglichen. Die grau gepunktete Linie kennzeichnet $\epsilon_f = -U/2 = -3$. Die schwarz gestrichelte Linie gibt die Daten aus dem Paper von Wiegmann [13] an, wobei die Werte im Bereich $n_f \in (1, 2)$ durch Spiegelung im Symmetriepunkt aus den Werten in $n_f \in (0, 1)$ gewonnen wurden.

verglichen. Diese werden für den Bereich $\epsilon_f < -\frac{U}{2}$ im Symmetriepunkt gespiegelt, ebenso wie die berechneten Werte (gelbe Kurve). Um die gelbe Kurve zu überprüfen, wurden auch hier einzelne Werte im Bereich $\epsilon_f < -\frac{U}{2}$ berechnet (grüne Kreuze), welche auf der gelben Linie liegen und die Symmetrie der Kurve bestätigen. Die berechneten Werte liegen im Bereich schwacher und starker Besetzung gut auf den Literaturwerten und weichen näher am Symmetriepunkt etwas stärker von den Literaturwerten ab.

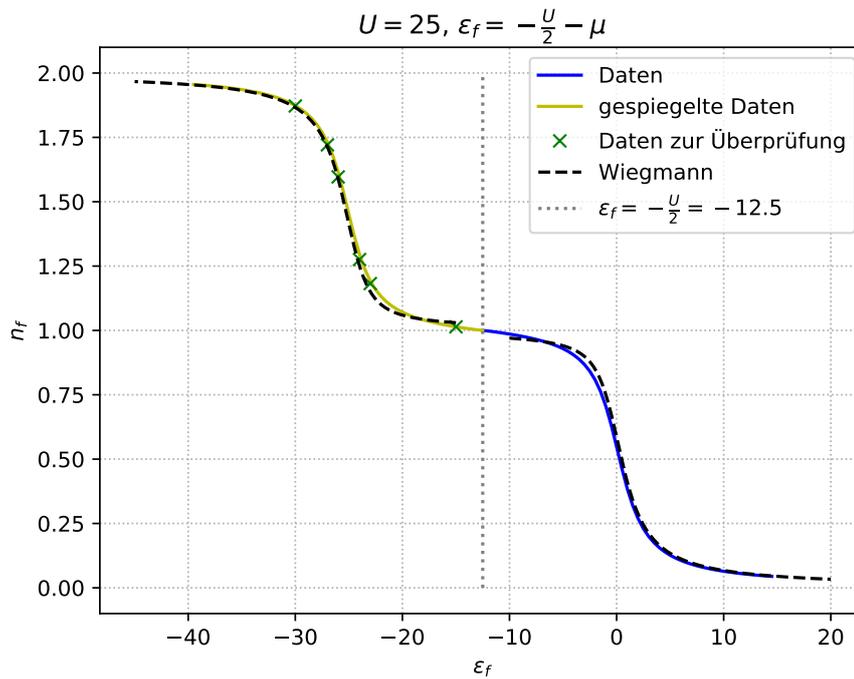


Abbildung 6.10: n_f gegen ϵ_f für $U = 25$ im Vergleich mit den Daten aus der Quelle [13], wobei der Bereich aus $n_f \in (1, 2)$ durch Spiegelung aus den eigentlichen Werten gewonnen wurde. Die gestrichelte schwarze Linie liegt bei $\epsilon_f = -U/2 = -12.5$.

In Abbildung 6.11 sind einige Spektraldichten der f-Elektronen für $U = 25$ dargestellt. Durch die gestrichelte (abwechselnd gestrichelt und gepunktete) Linie wird die Position des linken (rechten) Hubbard Satelliten markiert, also $\omega = \epsilon_f$ ($\omega = \epsilon_f + U$). Die berechneten Spektraldichten geben diese Hubbard Satelliten gut wieder. Wie auch in den Spektraldichten für $U = 2$ in Abbildung 6.6 sind hier bei den asymmetrischen Fällen Ausreißer um $\omega = 0$ und $\omega = 2\tilde{\epsilon} = -2\mu$ herum zu erkennen. In der Näherung $w(k) = \text{konst.}$ tauchen diese Ausreißer in der Spektraldichte für

$U = 25$ nicht auf, siehe Abbildung 6.4, da sich die Funktion $H(x)$ in dieser Näherung wegekürzt. Die Ausreißer sind vermutlich ein Resultat der Trunkierung der Basis auf sechs Basisoperatoren, da ihre Ursache bereits in den analytischen Rechnungen auftritt und vermutlich keinem numerischen Problem zugrunde liegt.

Der Kondo Peak ist wie auch im symmetrischen Fall für das asymmetrische SIAM nicht zu erkennen. Dass die berechnete Besetzungszahl trotzdem gut zu den Literaturwerten passt, liegt daran, dass der Kondo Peak sehr schmal ist und somit nur einen geringen Beitrag zu dem Flächeninhalt unter der Spektraldichte gibt.

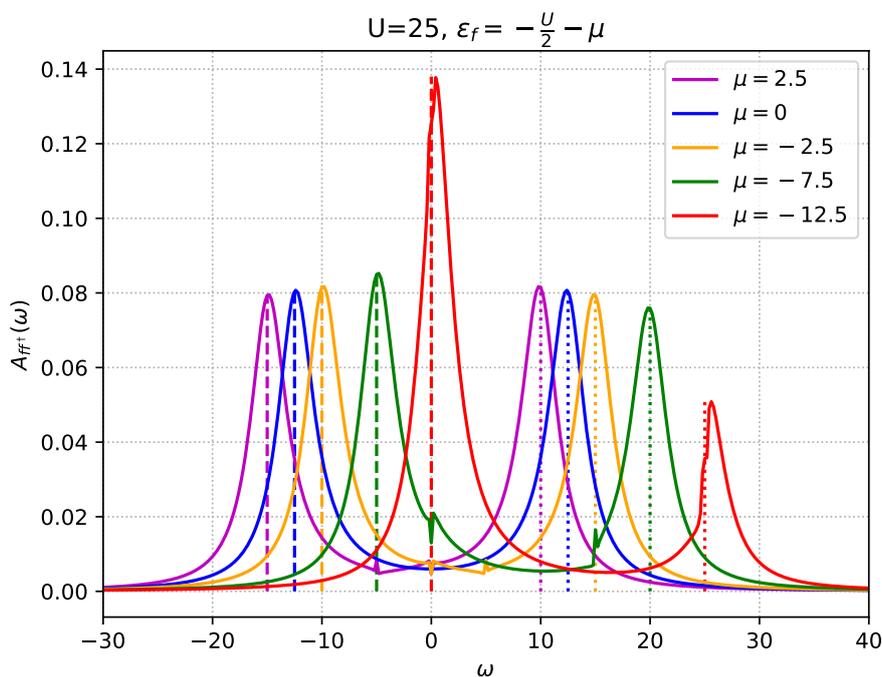


Abbildung 6.11: Die Spektraldichte der f-Elektronen ist für $U = 25$ für verschiedene μ dargestellt. Die gestrichelten Linien kennzeichnen $\omega = \epsilon_f + U$ und die gepunkteten Linien kennzeichnen $\omega = \epsilon_f$, also die Hubbard Satelliten farblich passend zur jeweiligen Spektraldichte.

Somit lässt sich auch für $U = 25$ mit der hier genutzten Methode der iEoM die Besetzungszahl n_f näherungsweise berechnen. Die Spektraldichte lässt sich mit der Methode nur teilweise bestimmen. Die Hubbard Satelliten können berechnet werden, der Kondo Peak wiederum nicht. Auch tauchen Ausreißer mit analytischem Ursprung in der Spektraldichte auf.

6.4.4 $U = 1000$ und 5000

Die Besetzungszahl n_f für $U = 1000$ ist in Abbildung 6.12 in Abhängigkeit von ϵ_f dargestellt. Einzelne Werte wurden auch für $U = 5000$ berechnet, für diese Berechnungen mussten die oben erwähnten Parameter der Berechnung des Integrals über $A_{f_\sigma f_\sigma^\dagger}(\omega)$ auf $\text{epsrel} = 10^{-3}$ angepasst werden, da die Berechnungen mit einer höheren Genauigkeit für viele ϵ_f Datenpunkte nicht möglich war. Als Vergleich mit den berechneten Werten werden sowohl die Werte aus dem Paper von Wiegmann [13], als auch die Werte aus dem Paper von Rasul [12] genutzt, da die gewählten U recht groß sind und die berechneten Werte somit auch mit den Werten für $U = \infty$ verglichen werden können. Da der Symmetriepunkt des Graphen bei $n_f = 1$ und $\omega = -500$ (bzw $\omega = -2500$) liegt, wird hier nur der Bereich $n_f < 1$ betrachtet. Für $\epsilon_f > 0$ liegen die berechneten Werte für $U = 1000$ nah bei den exakten Werten, für $\epsilon_f < 0$ weichen die berechneten Werte stärker von den Literaturwerten ab. Die Werte für $U = 5000$ liegen nah bei den Werten für $U = 1000$. Somit scheint sich die Besetzungszahl für größere U nicht mehr signifikant zu verändern.

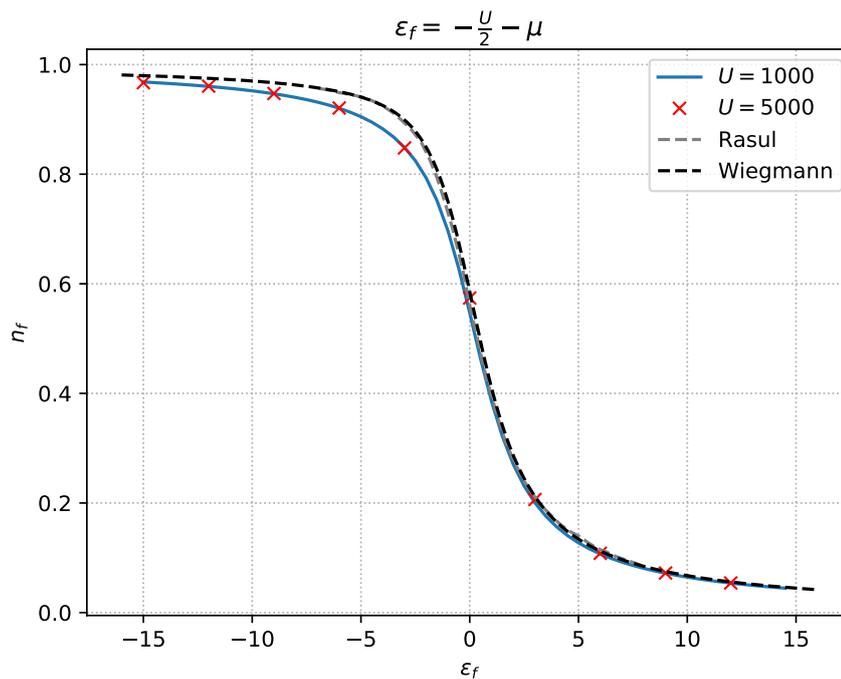


Abbildung 6.12: Besetzungszahl n_f gegen ϵ_f für $U = 1000$ und $U = 5000$, verglichen mit den Daten aus dem Paper von Wiegmann [13] und für $U = \infty$ aus dem Paper von Rasul [12].

Die Methode liefert also für $U = 1000$ und $U = 5000$ gute Näherungen für die Besetzungszahl. Die Berechnungen werden für größere U fehleranfälliger und Ergebnisse können nur mit geringerer Genauigkeit berechnet werden.

6.4.5 Iterations- und Zeitvergleiche

In Abbildung 6.13 ist die Anzahl an Iterationen bzw. die Dauer der Berechnungen für verschiedene U gegen n_f dargestellt. Für kleinere n_f liegen die Iterationsanzahlen und auch die Berechnungsdauer für die unterschiedlichen U -Werte noch recht nah beieinander. Für $n_f \rightarrow 1$ steigen beide für größere U deutlich stärker an, sinken sehr nah bei $n_f = 1$ wieder und sind bei $n_f = 1$ am niedrigsten. Hier wird erneut deutlich, dass die Berechnung nahe des Symmetriepunktes komplizierter ist als im Bereich schwacher Besetzung, da in diesem Bereich auch die Spektraldichte der f-Elektronen komplizierter ist. Der Fall $n_f = 1$ ist am einfachsten zu berechnen, da hier Halbfüllung vorliegt und in diesem Punkt der Startwert der Iteration dem Endergebnis entspricht. Die Zeitangaben in Abbildung 6.13 sind nur relative Vergleichswerte, da sie abhängig vom Rechner und seiner Rechenleistung sind.

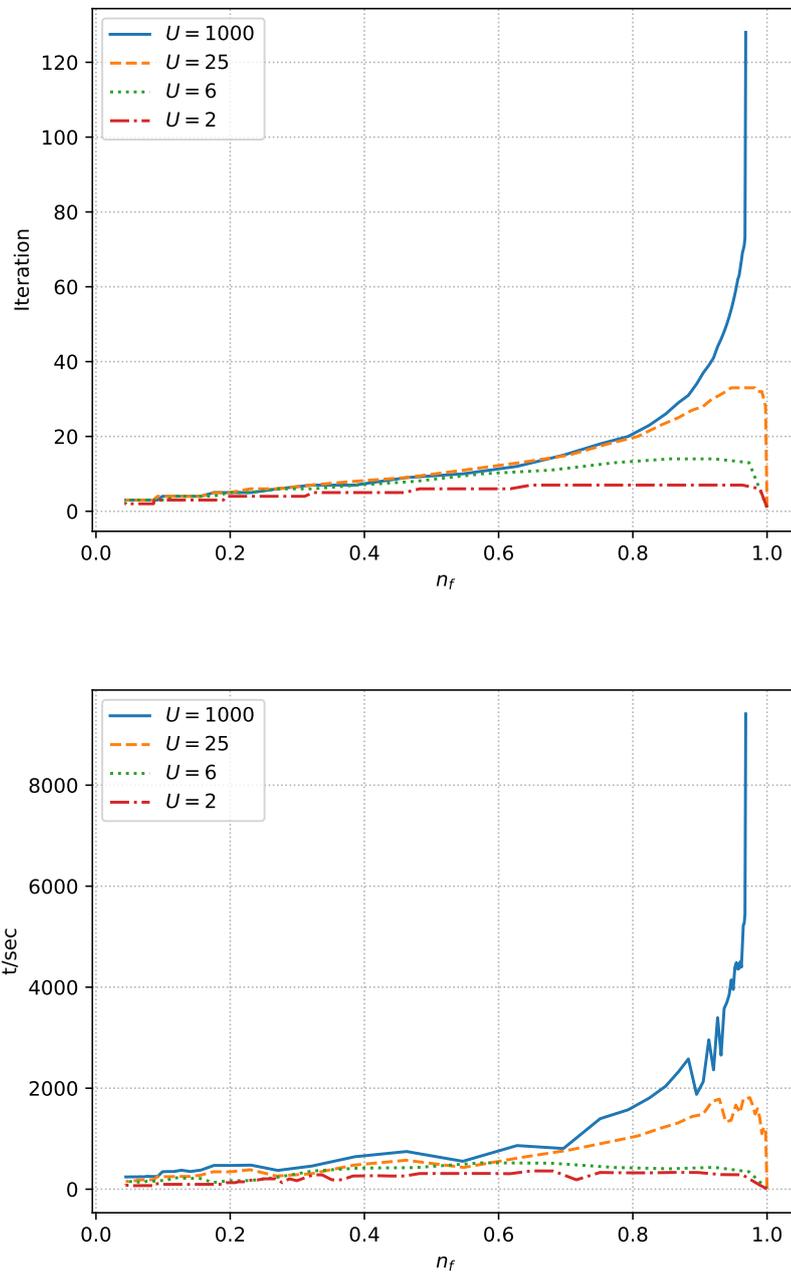


Abbildung 6.13: Vergleich der Anzahl an Iterationen bis zur gewünschten Genauigkeit für verschiedene U in Abhängigkeit des berechneten n_f -Wertes (oben). Vergleich der Rechendauer der Berechnung von n_f für verschiedene U in Abhängigkeit von n_f (unten).

6.5 Grenzwert bei unendlicher Coulomb Wechselwirkung

Als letztes wird der Limes einer unendlichen Coulomb Abstoßung $U \rightarrow \infty$ betrachtet. Die einzelnen Terme zur Berechnung der Spektraldichte der f-Elektronen bzw. zur Berechnung der Greenfunktion vereinfachen sich im Limes $U \rightarrow \infty$ folgendermaßen

$$\lim_{U \rightarrow \infty} R_{11}(\omega) = \frac{1}{2} \frac{1}{2\gamma i + \omega - \epsilon_f} = \frac{1}{2} \frac{\omega - \epsilon_f - 2\gamma i}{4\gamma^2 + (\omega - \epsilon_f)^2} \quad (6.10)$$

$$\lim_{U \rightarrow \infty} R_{21}(\omega) = -\frac{1}{4\gamma i + 2\omega - 2\epsilon_f} = -\lim_{U \rightarrow \infty} R_{11}(\omega) \quad (6.11)$$

$$\lim_{U \rightarrow \infty} H^*(-x + 2\tilde{\epsilon}) = \lim_{U \rightarrow \infty} H^*(-x + 2\epsilon_f + U) = 0. \quad (6.12)$$

Die Greenfunktion lautet nun

$$\lim_{U \rightarrow \infty} G_{ff^\dagger}^{\text{ret}}(\omega) = \frac{1 - (2\langle n \rangle - 1 + 2\lim_{U \rightarrow \infty} H(\omega))}{4\gamma i + 2\omega - 2\epsilon_f}. \quad (6.13)$$

Es muss also noch der Limes

$$\lim_{U \rightarrow \infty} H(x) = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \sum_k \frac{V_k^2}{x + i\delta - \epsilon_k} \lim_{U \rightarrow \infty} w(k) \quad (6.14)$$

berechnet werden. Die Abhängigkeit von U steckt hier in der Funktion $w(k)$ aus Gleichung (4.51), also muss nur $w(k)$ im Limes $U \rightarrow \infty$ betrachtet werden

$$\begin{aligned} \lim_{U \rightarrow \infty} w(k) &= -\frac{1}{\pi} \lim_{U \rightarrow \infty} \text{v.p.} \int_{-\infty}^0 \frac{1}{\omega - \epsilon_k} \text{Im}[R_{11}(\omega) + R_{21}(\omega)(2\langle n \rangle - 1)] d\omega \\ &\quad + \lim_{U \rightarrow \infty} \text{Re}[R_{11}(\epsilon_k) + R_{21}(\epsilon_k)(2\langle n \rangle - 1)] \Theta(-\epsilon_k) \\ &= \frac{2\gamma(1 - \langle n \rangle)}{\pi} \text{v.p.} \int_{-\infty}^0 \frac{1}{\omega - \epsilon_k} \frac{1}{4\gamma^2 + (\omega - \epsilon_f)^2} d\omega \\ &\quad + \frac{\epsilon_k - \epsilon_f}{4\gamma^2 + (\epsilon_k - \epsilon_f)^2} (1 - \langle n \rangle) \Theta(-\epsilon_k). \end{aligned} \quad (6.15)$$

Das Integral in $w(k)$ hat sich in dem Limes deutlich vereinfacht und kann mithilfe des Computeralgebrasystems MAXIMA [31] allgemein gelöst werden. Dadurch muss bei der Berechnung von n_f pro Iteration ein Integral weniger berechnet werden, was die Rechenzeit verringert.

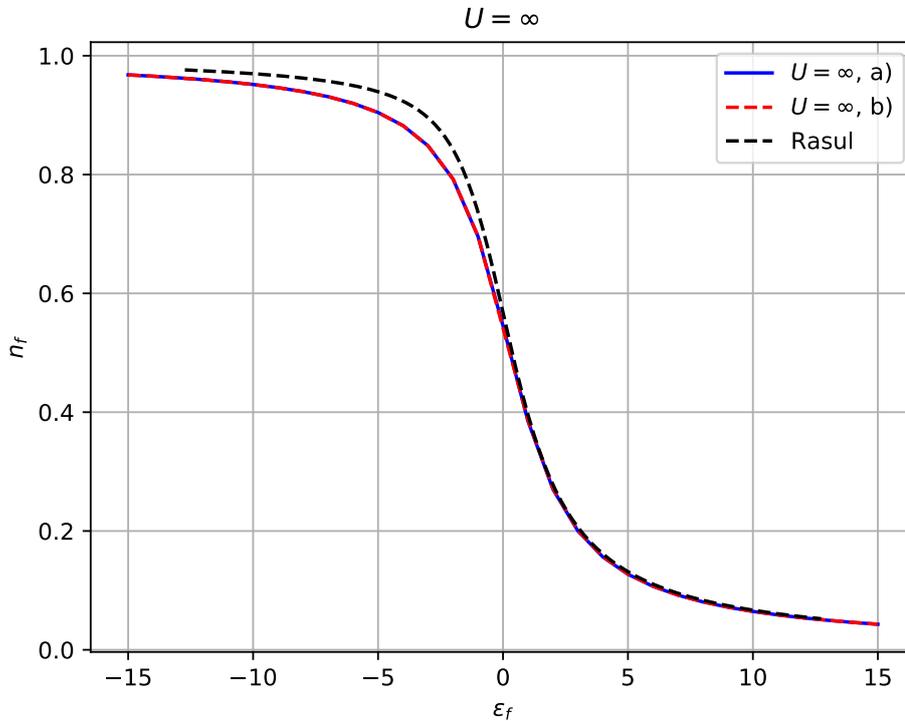


Abbildung 6.14: Ergebnisse n_f gegen ϵ_f für $U = \infty$. Dabei wurden bei a) das Integral in (6.15) mithilfe von Maxima allgemein gelöst, in b) wurde das Integral mit QAWC-Funktionen berechnet.

Nach den Gleichungen (4.16) und (6.1) lässt sich nun die Besetzungszahl n_f der f -Elektronen berechnen. In Abbildung 6.14 ist n_f für $U = \infty$ gegen ϵ_f aufgetragen, ebenso wie die Literaturwerte aus [12]. Bei der Berechnung der Kurve a) wurde das Integral in (6.15) mit MAXIMA berechnet. Bei den Punkten b) wurde das Integral mithilfe des Paketes *GSL* berechnet, siehe Kapitel 5. Die Parameter dazu stehen in Tabelle 6.3. Das Integral in $H(x)$ und das Integral über $A_{ff^\dagger}(\omega)$ werden in beiden Fällen mithilfe des Paketes *GSL* bestimmt. Die Parameter dazu stehen ebenfalls in Tabelle 6.3. Die gewünschte Genauigkeit der Iterationen wurde bei den Berechnungen der Werte a) zu $\text{err} = 10^{-9}$ gewählt, bei b) zu $\text{err} = 10^{-4}$.

Die Kurve a) stimmt gut mit Kurve b) überein, beide Rechenwege liefern also das gleiche Ergebnis. Die Berechnung der Werte b) ist deutlich zeitaufwendiger und störanfälliger, da pro Iteration drei Integrale gelöst werden müssen, bei der Berechnung der Werte a) nur zwei. Die berechneten Daten stimmen im Bereich

Funktion	a)		$w(k)$	b)	
	$H(x)$	$A_{ff^\dagger}(\omega)$		$H(x)$	$A_{ff^\dagger}(\omega)$
	QAGI, QAWC	QAGI	QAGI, QAWC	QAGI, QAWC	QAGI
epsabs	10^{-10}	10^{-10}	10^{-10}	10^{-8}	10^{-7}
epsrel	10^{-10}	10^{-10}	10^{-8}	10^{-7}	10^{-5}
limit	10000	1000	1000	1000	1000
ws	1000	1000	1000	1000	1000

Tabelle 6.3: Parameter für die Berechnungen der Integrale für $U = \infty$ mit den in Kapitel 5 beschriebenen Funktionen. Dabei wird das Integral in $w(k)$ nach Gleichung (5.10) aufgeteilt, dass in $H(x)$ nach (5.9).

schwacher Besetzung besser mit dem Werten von Rasul [12] überein, als im Bereich $\epsilon_f < 0$. Insgesamt liefert die hier genutzte Methode aber eine gute Näherung für die Besetzungszahl n_f .

In Abbildung 6.15 sind die Kurven n_f gegen ϵ_f für die hier berechneten Fälle im Vergleich dargestellt. Die Kurven der endlichen U nähern sich mit steigendem U dem Fall $U = \infty$ an, da sich der Symmetriepunkt für $U \rightarrow \infty$ ebenfalls nach $\epsilon_f \rightarrow \infty$ verschiebt. Die hier angewendeten Methode der iEoM liefert in sich schlüssige Ergebnisse für n_f .

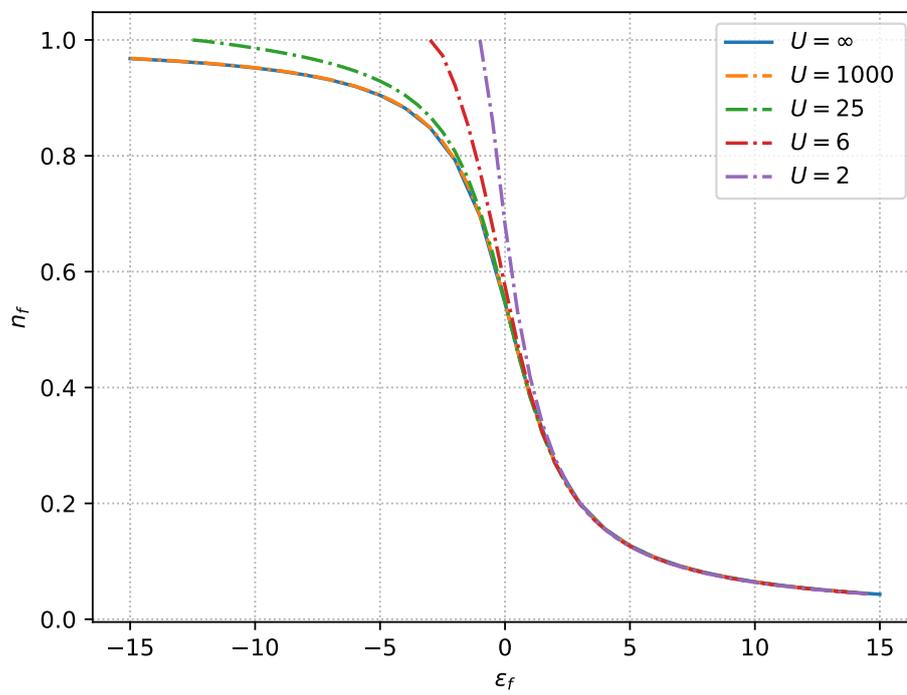


Abbildung 6.15: Besetzungszahl n_f gegen ϵ_f für verschiedene U .

7 Zusammenfassung und Ausblick

Das SIAM beschreibt eine Störstelle in einem Metall und wird häufig für Untersuchungen Kondo-effektartiger Phänomene und stark korrelierter Systeme wie schwere Fermionen genutzt. In dieser Arbeit wurde untersucht, inwieweit die hier genutzte Methode der iEoM geeignet ist, um das SIAM zu beschreiben. Dazu wird die Spektraldichte und die Besetzungszahl der Störstellenelektronen berechnet. Im Unterschied zu anderen Untersuchungen mit der Methode der iEoM wird hier eine trunkierte Operatorbasis genutzt, die orthonormal unter dem Frobenius Skalarprodukt ist. Die Orthonormalität gewährleistet, dass die Liouville Matrix diagonalisierbar ist und reellen Eigenwerten hat. Dadurch sind die Ergebnisse der Zeitentwicklung auch im Heisenberg-Bild Superpositionen von Oszillationen, deren Frequenzen die Eigenenergien dieser Matrix sind. Die Operatorbasis wurde auf 6 Basisoperatoren trunkiert. Die mit dieser Methode berechneten Ergebnisse werden mit Ergebnissen von anderen Methoden verglichen, um die Genauigkeit der hier genutzten Methode zu untersuchen.

In den Ergebnissen lässt sich der Kondo Peak in der Spektraldichte der f-Elektronen mit der hier gewählten Methode nicht beschreiben, was mit hoher Wahrscheinlichkeit an der Trunkierung der Basis liegt. Für $U = 0$ bildet die Spektraldichte wie zu erwarten eine Lorentzkurve mit der Breite $\gamma = 1$ ab. Auch die Hubbard Satelliten bei größeren U sind für das symmetrische SIAM und auch für kleine μ gut zu erkennen. An den Stellen $\omega = 0$ bzw. $\omega = 2\tilde{\epsilon}$ wird die Funktion $H(\omega)$ bzw. $H^*(-\omega + 2\tilde{\epsilon})$ in der Spektraldichte bei Null ausgewertet. Der Realteil von $H(\omega)$ hat einen Sprung bei $\omega = 0$ und der Imaginärteil divergiert an dieser Stelle. Um diese Stellen herum sind für die Spektraldichten des asymmetrischen SIAMs Ausreißer zu erkennen. Für den symmetrischen Fall gibt es keine Ausreißer, da sich für diesen Fall die Funktionen $H(\omega)$ und $H^*(-\omega)$ wegekürzen.

Die Besetzungszahl der f-Elektronen kann trotz der Trunkierung der Basis mit der vorgestellten Methode gut berechnet werden. Sowohl für $U = \infty$ als auch für kleinere U passen die hier berechneten Kurven gut zu denen, die mit dem Bethe Ansatz exakt berechnet wurden und die berechneten Werte sind in sich schlüssig.

Die Berechnung der Besetzungszahl n_f ist um den Bereich des Symmetriepunktes ($n_f = 1$ und $\epsilon_f = -\frac{U}{2}$) zeitaufwändiger als weiter von diesem Punkt entfernt. Ein Vergleich der Rechendauer und der Anzahl der benötigten Iterationen zeigt, dass die Berechnungen im Bereich schwacher Besetzung weniger aufwändig sind als im

Bereich starker Besetzung. Daher bietet es sich an, die Symmetrie des Systems zu nutzen und die Besetzungszahlen nur im Bereich $\epsilon_f > -\frac{U}{2}$ zu berechnen. Da der Zeitaufwand der Berechnungen für größere U höher wird, wurde dies in dieser Arbeit bereits genutzt.

Um das Modell bei tiefen Temperaturen gut beschreiben zu können, sind Basisoperatoren notwendig, die viele Operatoren beinhalten. Kleine Energieskalen werden erst auf höheren Zeitskalen relevant. Um mit der Methode der iEoM große Zeitskalen betrachten zu können, müssen mehr und damit auch „längere“ Basisoperatoren berücksichtigt werden. Die Kondo Energie ist eine kleine Energieskala und demnach werden auch im Frequenzbereich mehr Operatoren benötigt, um den Kondo Peak berechnen zu können. In der hier gewählten Trunkierung bestehen die Basisoperatoren aus Produkten von maximal drei Operatoren. Daher ist es nicht überraschend, dass der Kondo Peak mit der in dieser Arbeit genutzten Basis nicht berechnet werden kann. Bei Berücksichtigung von mehr Basisoperatoren werden diese größer und daher sollte eine größere Basis auch die Tieftemperaturbetrachtung verbessern.

Die Problematik, dass die Erwartungswerte $\langle f_{\sigma}^{\dagger} c_{k,\sigma} \rangle$ und $\langle c_{k\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} \rangle$ nicht bis auf ein Minuszeichen übereinstimmen, liegt ebenfalls an der Trunkierung der Basis. Auch hier kann eine größere Basis zu besseren Ergebnissen führen oder das Problem komplett beheben, da für die Beschreibung der Zeitabhängigkeit in den $c^{(\dagger)}$ -Operatoren mehr Basisoperatoren zur Verfügung stehen und mit mehr Basisoperatoren die Prozesse des Systems besser beschrieben werden können.

Da die Ausreißer in der Spektraldichte aus der analytisch berechneten Funktion $H(\omega)$ resultieren, könnte eine größere Basis auch hier zu besseren Ergebnissen führen.

Die Besetzungszahlen stimmen im Bereich schwacher Besetzung gut mit den exakten Ergebnissen des Bethe Ansatzes überein, im Bereich um den Symmetriepunkt herum weichen sie noch von diesen ab. Eine größere Basis kann hier noch genauere Werte liefern.

Als nächster Schritt kann demnach die Basis erweitert werden und die Auswirkung der größeren Basis auf die Ergebnisse untersucht werden. Da eine größere Basis auch den Rechenaufwand erhöht, das Aufstellen der Liouville Matrix schwieriger und die Berechnung der Resolvente komplizierter wird, ist eine weitere Fragestellung, inwieweit diese Methode bei größerer Basis bessere Ergebnisse auf Kosten des Rechenaufwandes liefert und ab wann der Rechenaufwand den Nutzen einer Erweiterung der Basis überwiegt.

A Berechnung der Liouville Matrix

Die Liouville Matrix wird nach Gleichung (3.11) bestimmt. Dazu werden zunächst die Terme

$$\mathcal{L}(W_i) = [H, W_i] \quad (\text{A.1})$$

berechnet. Dabei wird die Eigenschaft des Kommutators

$$[a, bc] = \{a, b\}c - b\{a, c\} \quad (\text{A.2})$$

genutzt.

$$\begin{aligned} [H, W_1] &= [H, \sqrt{2}f_\sigma] \\ &= \epsilon_f \sum_\sigma [f_\sigma^\dagger f_\sigma, \sqrt{2}f_\sigma] + \sum_{\sigma, k} V_k [c_{\sigma, k}^\dagger f_\sigma + f_\sigma^\dagger c_{\sigma, k}, \sqrt{2}f_\sigma] + U [f_\sigma^\dagger f_\sigma f_{\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}}, \sqrt{2}f_\sigma] \\ &= -\epsilon_f \sqrt{2}f_\sigma - \sum_k V_k \sqrt{2}c_{\sigma, k} - \sqrt{2}U f_\sigma f_{\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} \\ &= -(\epsilon_f + U/2)\sqrt{2}f_\sigma - \sum_k V_k \sqrt{2}c_{\sigma, k} - \frac{U}{2}(\sqrt{2})^3 f_\sigma (n_{\bar{\sigma}} - \frac{1}{2}) \\ &= -(\epsilon_f + U/2)W_1 - \sum_k V_k W_3(k) - \frac{U}{2}W_2 \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

NR:

$$[H, \hat{n}_{\bar{\sigma}}] = \sum_{k\sigma} V_k (c_{k, \bar{\sigma}}^\dagger [f_\sigma, \hat{n}_{\bar{\sigma}}] + [f_\sigma^\dagger, \hat{n}_{\bar{\sigma}}] c_{k, \bar{\sigma}}) = \sum_k V_k (c_{k, \bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} - f_{\bar{\sigma}}^\dagger c_{k, \bar{\sigma}}) \quad (\text{A.4})$$

$$\begin{aligned}
[H, W_2] &= [H, (\sqrt{2})^3 f_\sigma (\hat{n}_{\bar{\sigma}} - \frac{1}{2})] \\
&= - [H, \sqrt{2} f_\sigma] + [H, (\sqrt{2})^3 f_\sigma \hat{n}_{\bar{\sigma}}] \\
&= - [H, \sqrt{2} f_\sigma] + [H, (\sqrt{2})^3 f_\sigma] \hat{n}_{\bar{\sigma}} + (\sqrt{2})^3 f_\sigma [H, \hat{n}_{\bar{\sigma}}] \\
&= - (\epsilon_f + U/2) \sqrt{2} f_\sigma - \sum_k V_k \sqrt{2} c_{\sigma, k} - \frac{U}{2} (\sqrt{2})^3 f_\sigma (n_{\bar{\sigma}} - \frac{1}{2}) \\
&\quad - \epsilon_f \sqrt{2}^3 f_\sigma \hat{n}_{\bar{\sigma}} - \sum_k V_k \sqrt{2}^3 c_{\sigma, k} \hat{n}_{\bar{\sigma}} - \sqrt{2}^3 U f_\sigma f_{\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} \hat{n}_{\bar{\sigma}} \\
&\quad + (\sqrt{2})^3 f_\sigma \sum_{k, \sigma} V_k (c_{k, \bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} - f_{\bar{\sigma}}^\dagger c_{k, \bar{\sigma}}) \\
&= - \frac{U}{2} \sqrt{2} f_\sigma - (\epsilon_f + \frac{U}{2}) \sqrt{2}^3 f_\sigma (n_{\bar{\sigma}} - \frac{1}{2}) - \sum_k V_k \sqrt{2}^3 c_{k\sigma} (n_{\bar{\sigma}} - \frac{1}{2}) \\
&\quad + \sqrt{2}^3 \sum_{k, \sigma} V_k (c_{k, \bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma - f_{\bar{\sigma}}^\dagger c_{k, \bar{\sigma}} f_\sigma) \\
&= - \frac{U}{2} W_1 - (\epsilon_f + \frac{U}{2}) W_2 - \sum_k V_k W_4(k) + \sum_{k, \sigma} V_k (W_6(k) - W_5(k))
\end{aligned} \tag{A.5}$$

$$[H, W_3(k)] = [H, \sqrt{2} c_{k, \sigma}] = -\epsilon_k \sqrt{2} c_{k, \sigma} - V_k \sqrt{2} f_\sigma = -\epsilon_k W_3(k) - V_k W_1 \tag{A.6}$$

$$\begin{aligned}
[H, W_4(k)] &= [H, (\sqrt{2})^3 c_{k\sigma} (\hat{n}_{\bar{\sigma}} - \frac{1}{2})] \\
&= - [H, \sqrt{2} c_{k\sigma}] + [H, (\sqrt{2})^3 c_{k\sigma}] \hat{n}_{\bar{\sigma}} + (\sqrt{2})^3 c_{k\sigma} [H, \hat{n}_{\bar{\sigma}}] \\
&= \epsilon_k \sqrt{2} c_{k, \sigma} + V_k \sqrt{2} f_\sigma - \epsilon_k (\sqrt{2})^3 c_{k, \sigma} \hat{n}_{\bar{\sigma}} - V_k \sqrt{2} f_\sigma \hat{n}_{\bar{\sigma}} \\
&\quad + (\sqrt{2})^3 c_{k\sigma} \sum_{k, \sigma} V_k (c_{k, \bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} - f_{\bar{\sigma}}^\dagger c_{k, \bar{\sigma}}) \\
&= - \epsilon_k (\sqrt{2})^3 c_{k, \sigma} (n_{\bar{\sigma}} - \frac{1}{2}) - V_k (\sqrt{2})^3 f_\sigma (n_{\bar{\sigma}} - \frac{1}{2}) \\
&\quad + (\sqrt{2})^3 \sum_{k, \sigma} V_k (c_{k, \sigma} c_{k\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} - c_{k, \sigma} f_{\bar{\sigma}}^\dagger c_{k, \bar{\sigma}}) \\
&= - \epsilon_k W_4(k) - V_k W_2 - \sqrt{2}^3 \sum_{k, \sigma} V_k (f_{\bar{\sigma}} c_{k\bar{\sigma}}^\dagger c_{k, \sigma} + f_{\bar{\sigma}}^\dagger c_{k, \bar{\sigma}} c_{k, \sigma})
\end{aligned} \tag{A.7}$$

$$\begin{aligned}
[H, W_5(k)] &= [H, (\sqrt{2})^3 f_{\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} f_\sigma] \\
&= f_{\bar{\sigma}}^\dagger [H, (\sqrt{2})^3 c_{k\bar{\sigma}}] f_\sigma + [H, (\sqrt{2})^3 f_{\bar{\sigma}}^\dagger] c_{k\bar{\sigma}} f_\sigma + f_{\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} [H, (\sqrt{2})^3 f_\sigma] \\
&= -2f_{\bar{\sigma}}^\dagger (\epsilon_k \sqrt{2} c_{k,\bar{\sigma}} + V_k \sqrt{2} f_{\bar{\sigma}}) f_\sigma \\
&\quad + 2 \left(\epsilon_f \sqrt{2} f_{\bar{\sigma}}^\dagger + U \sqrt{2} f_{\bar{\sigma}}^\dagger n_\sigma + \sum_q V_q \sqrt{2} c_{q,\bar{\sigma}}^\dagger \right) c_{k\bar{\sigma}} f_\sigma \\
&\quad - 2f_{\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} \left(\epsilon_f \sqrt{2} f_\sigma + \sum_q V_q \sqrt{2} c_{\sigma,q} + U \sqrt{2} f_\sigma n_{\bar{\sigma}} \right) \\
&= -2 (\epsilon_k \sqrt{2} f_{\bar{\sigma}}^\dagger c_{k,\bar{\sigma}} f_\sigma + V_k \sqrt{2} f_{\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma) \\
&\quad + 2 \left(\sum_q V_q \sqrt{2} c_{q,\bar{\sigma}}^\dagger \right) c_{k\bar{\sigma}} f_\sigma - 2f_{\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} \left(\sum_q V_q \sqrt{2} c_{\sigma,q} \right) \\
&= -\epsilon_k \sqrt{2}^3 f_{\bar{\sigma}}^\dagger c_{k,\bar{\sigma}} f_\sigma - V_k \sqrt{2}^3 f_{\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma \\
&\quad + \sum_q V_q \sqrt{2}^3 c_{q,\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} f_\sigma - \sum_q V_q \sqrt{2}^3 f_{\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} c_{\sigma,q} \\
&= -\epsilon_k W_5(k) - V_k \sqrt{2}^3 f_{\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma \\
&\quad + \sum_q V_q \sqrt{2}^3 c_{q,\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} f_\sigma - \sum_q V_q \sqrt{2}^3 f_{\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} c_{\sigma,q}
\end{aligned} \tag{A.8}$$

$$\begin{aligned}
[H, W_6(k)] &= [H, (\sqrt{2})^3 c_{k\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma] \\
&= [H, \sqrt{2}^3 c_{k\bar{\sigma}}^\dagger] f_{\bar{\sigma}} f_\sigma + c_{k\bar{\sigma}}^\dagger [H, \sqrt{2}^3 f_{\bar{\sigma}}] f_\sigma + c_{k\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} [H, (\sqrt{2})^3 f_\sigma] \\
&= \epsilon_k \sqrt{2}^3 c_{k\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma + V_k \sqrt{2}^3 f_{\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma \\
&\quad - \epsilon_f \sqrt{2}^3 c_{k\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma - \sum_q V_q \sqrt{2}^3 c_{k\bar{\sigma}}^\dagger c_{q\bar{\sigma}} f_\sigma - U \sqrt{2}^3 c_{k\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} n_\sigma f_\sigma \\
&\quad - \epsilon_f \sqrt{2}^3 c_{k\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma - \sum_q V_q \sqrt{2}^3 c_{k\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} c_{q\sigma} - U \sqrt{2}^3 c_{k\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma n_{\bar{\sigma}} \\
&= (\epsilon_k - 2\epsilon_f - U) \sqrt{2}^3 c_{k\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma + V_k \sqrt{2}^3 f_{\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma \\
&\quad - \sum_q V_q \sqrt{2}^3 c_{k\bar{\sigma}}^\dagger c_{q\bar{\sigma}} f_\sigma + \sum_q V_q \sqrt{2}^3 c_{k\bar{\sigma}}^\dagger c_{q\sigma} f_{\bar{\sigma}} \\
&= (\epsilon_k - 2\epsilon_f - U) W_6(k) + V_k \sqrt{2}^3 f_{\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma \\
&\quad - \sum_q V_q \sqrt{2}^3 c_{k\bar{\sigma}}^\dagger c_{q\bar{\sigma}} f_\sigma + \sum_q V_q \sqrt{2}^3 c_{k\bar{\sigma}}^\dagger c_{q\sigma} f_{\bar{\sigma}}
\end{aligned} \tag{A.9}$$

Nun lassen sich die Matrixelemente der Resolvente nach

$$M_{ij} = (W_j | \mathcal{L}(W_i))_{\text{Fr}}. \tag{A.10}$$

berechnen.

Die Terme aus den Kommutationen von H , die proportional zu Basisoperatoren sind, lassen sich mithilfe der Relation

$$(W_i|W_j)_{\text{Fr}} = \delta_{ij} \quad (\text{A.11})$$

berechnen.

Die Terme aus den Kommutationen von H mit den Basisoperatoren, die nicht proportional zu Basisoperatoren sind, lauten für die Kommutation mit $W_4(k)$

$$-\sqrt{2}^3 \sum_{k,\sigma} V_k f_\sigma c_{k\bar{\sigma}}^\dagger c_{k,\sigma}, \quad -\sqrt{2}^3 \sum_{k,\sigma} V_k f_\sigma^\dagger c_{k,\bar{\sigma}} c_{k,\sigma}, \quad (\text{A.12})$$

für die Kommutation mit $W_5(k)$

$$-V_k \sqrt{2}^3 f_\sigma^\dagger f_\sigma f_\sigma, \quad \sum_q V_q \sqrt{2}^3 c_{q,\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} f_\sigma, \quad -\sum_q V_q \sqrt{2}^3 f_\sigma^\dagger c_{k\bar{\sigma}} c_{\sigma,q}, \quad (\text{A.13})$$

und für die Kommutation mit $W_6(k)$

$$V_k \sqrt{2}^3 f_\sigma^\dagger f_\sigma f_\sigma, \quad -\sum_q V_q \sqrt{2}^3 c_{k\bar{\sigma}}^\dagger c_{q\bar{\sigma}} f_\sigma, \quad +\sum_q V_q \sqrt{2}^3 c_{k\bar{\sigma}}^\dagger c_{q\sigma} f_\sigma. \quad (\text{A.14})$$

Damit müssen die Überlappungen der Operatoren

$$A = -V_k \sqrt{2}^3 f_\sigma^\dagger f_\sigma f_\sigma \quad (\text{A.15})$$

$$B = V_k \sqrt{2}^3 c_{k\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} f_\sigma \quad (\text{A.16})$$

$$C = V_k \sqrt{2}^3 f_\sigma^\dagger f_\sigma f_\sigma \quad (\text{A.17})$$

$$D = -V_k \sqrt{2}^3 c_{k\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} f_\sigma \quad (\text{A.18})$$

mit den Basisoperatoren nach Gleichung (3.10)

$$(W_i, x)_{\text{Fr}}, \quad \text{mit } x \in [A, B, C, D], \quad (\text{A.19})$$

bestimmt werden. Produkte mit einer ungeraden Anzahl an Erzeuger- oder Vernichtoperatoren in der Spur verschwinden (f und c Operatoren einzeln betrachtet) und müssen daher nicht berücksichtigt werden. Hier werden also nur Produkte mit W_1 und W_2 berechnet.

$$\begin{aligned} (W_1, A)_{\text{Fr}} &= (\sqrt{2} f_\sigma, A)_{\text{Fr}} \\ &= -4V_k \frac{1}{N} \text{Tr} (f_\sigma^\dagger f_\sigma^\dagger f_\sigma f_\sigma) = -V_k \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

$$\begin{aligned}
(W_2, A)_{\text{Fr}} &= \left(\sqrt{2}^3 f_\sigma (\hat{n}_{\bar{\sigma}} - \frac{1}{2}), A \right)_{\text{Fr}} \\
&= -8V_k \frac{1}{N} \text{Tr} \left(f_\sigma^\dagger (\hat{n}_{\bar{\sigma}} - \frac{1}{2}) f_\sigma^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma \right) \\
&= -8V_k \frac{1}{N} \text{Tr} (f_\sigma^\dagger f_{\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma) + 4V_k \frac{1}{N} \text{Tr} (f_\sigma^\dagger f_{\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma) \\
&= -8V_k \frac{1}{N} \text{Tr} (f_\sigma^\dagger (1 - f_{\bar{\sigma}} f_{\bar{\sigma}}^\dagger) f_\sigma^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma) + V_k \\
&= -8V_k \frac{1}{N} \text{Tr} (f_\sigma^\dagger f_{\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma) + V_k \\
&= -2V_k + V_k = -V_k
\end{aligned} \tag{A.21}$$

$$\begin{aligned}
(W_1, B)_{\text{Fr}} &= (\sqrt{2} f_\sigma, B)_{\text{Fr}} \\
&= 4V_k \frac{1}{N} \text{Tr} (f_\sigma^\dagger c_{k\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} f_\sigma) = 4V_k \frac{1}{N} \text{Tr} (f_\sigma f_\sigma^\dagger c_{k\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}}) = V_k
\end{aligned} \tag{A.22}$$

$$\begin{aligned}
(W_2, B)_{\text{Fr}} &= \left(\sqrt{2}^3 f_\sigma (\hat{n}_{\bar{\sigma}} - \frac{1}{2}), B \right)_{\text{Fr}} \\
&= 8V_k \frac{1}{N} \text{Tr} \left(f_\sigma^\dagger (\hat{n}_{\bar{\sigma}} - \frac{1}{2}) c_{k\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} f_\sigma \right) \\
&= 8V_k \frac{1}{N} \text{Tr} (f_\sigma^\dagger \hat{n}_{\bar{\sigma}} c_{k\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} f_\sigma) - 4V_k \frac{1}{N} \text{Tr} (f_\sigma^\dagger c_{k\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} f_\sigma) \\
&= V_k - V_k = 0
\end{aligned} \tag{A.23}$$

$$\begin{aligned}
(W_1, C)_{\text{Fr}} &= (\sqrt{2} f_\sigma, C)_{\text{Fr}} \\
&= 4V_k \frac{1}{N} \text{Tr} (f_\sigma^\dagger f_{\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma) = V_k
\end{aligned} \tag{A.24}$$

$$\begin{aligned}
(W_2, C)_{\text{Fr}} &= \left(\sqrt{2}^3 f_\sigma (\hat{n}_{\bar{\sigma}} - \frac{1}{2}), C \right)_{\text{Fr}} \\
&= 8V_k \frac{1}{N} \text{Tr} \left(f_\sigma^\dagger (\hat{n}_{\bar{\sigma}} - \frac{1}{2}) f_\sigma^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma \right) \\
&= 8V_k \frac{1}{N} \text{Tr} (f_\sigma^\dagger f_{\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma) - 4V_k \frac{1}{N} \text{Tr} (f_\sigma^\dagger f_{\bar{\sigma}}^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma) \\
&= 8V_k \frac{1}{N} \text{Tr} (f_\sigma^\dagger (1 - f_{\bar{\sigma}} f_{\bar{\sigma}}^\dagger) f_\sigma^\dagger f_{\bar{\sigma}} f_\sigma) - V_k \\
&= 2V_k - V_k = V_k
\end{aligned} \tag{A.25}$$

$$\begin{aligned}
(W_1, D)_{\text{Fr}} &= (\sqrt{2}f_\sigma, D)_{\text{Fr}} = -4V_k \frac{1}{N} \text{Tr} \left(f_\sigma^\dagger c_{k\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} f_\sigma \right) \\
&= -4V_k \frac{1}{N} \text{Tr} \left(f_\sigma f_\sigma^\dagger c_{k\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} \right) = -V_k
\end{aligned} \tag{A.26}$$

$$\begin{aligned}
(W_2, D)_{\text{Fr}} &= \left(\sqrt{2}^3 f_\sigma \left(\hat{n}_{\bar{\sigma}} - \frac{1}{2} \right), D \right)_{\text{Fr}} \\
&= -8V_k \frac{1}{N} \text{Tr} \left(f_\sigma^\dagger \left(\hat{n}_{\bar{\sigma}} - \frac{1}{2} \right) c_{k\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} f_\sigma \right) \\
&= -8V_k \frac{1}{N} \text{Tr} \left(f_\sigma^\dagger \hat{n}_{\bar{\sigma}} c_{k\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} f_\sigma \right) + 4V_k \frac{1}{N} \text{Tr} \left(f_\sigma^\dagger c_{k\bar{\sigma}}^\dagger c_{k\bar{\sigma}} f_\sigma \right) \\
&= -V_k + V_k \\
&= 0
\end{aligned} \tag{A.27}$$

Damit folgt für M

$$M = \left(\begin{array}{cc|cccccccccccc}
-\tilde{\epsilon} & -\frac{U}{2} & -V_1 & \dots & -V_N & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\
-\frac{U}{2} & -\tilde{\epsilon} & 0 & \dots & 0 & -V_1 & \dots & -V_N & -V_1 & \dots & -V_N & V_1 & \dots & V_N \\
\hline
-V_1 & 0 & -\epsilon_1 & & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\
\vdots & \vdots & & \ddots & & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
-V_N & 0 & 0 & & -\epsilon_N & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\
\hline
0 & -V_1 & 0 & \dots & 0 & -\epsilon_1 & & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & -V_N & 0 & \dots & 0 & 0 & & -\epsilon_N & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\
\hline
0 & -V_1 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & -\epsilon_1 & & 0 & 0 & \dots & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & -V_N & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & & -\epsilon_N & 0 & \dots & 0 \\
\hline
0 & V_1 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & \epsilon_1 - 2\tilde{\epsilon} & & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \ddots & \\
0 & V_N & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & & \epsilon_N - 2\tilde{\epsilon}
\end{array} \right) \tag{A.28}$$

mit $\tilde{\epsilon} = \epsilon_f + \frac{U}{2}$.

B Berechnung der Vektoren \vec{p}

Für die Berechnung der Erwartungswerte müssen die entsprechenden Vektoren nach Gleichung (4.7) bzw. Gleichung (4.12) bestimmt werden.

Berechnungen für $\vec{p}_{f_\sigma f_\sigma^\dagger}^T = \frac{1}{2} \langle \{ \vec{W}^T, W_1^\dagger \} \rangle$:

$$\begin{aligned}
 \langle \{ W_1, W_1^\dagger \} \rangle &= 2 \langle \{ f_\sigma, f_\sigma^\dagger \} \rangle = 2 \\
 \langle \{ W_2, W_1^\dagger \} \rangle &= 4 \langle \{ f_\sigma (\hat{n}_\sigma - \frac{1}{2}), f_\sigma^\dagger \} \rangle = 4n_\sigma - 2 \\
 \langle \{ W_3(k), W_1^\dagger \} \rangle &= 2 \langle \{ c_{k,\sigma}, f_\sigma^\dagger \} \rangle = 0 \\
 \langle \{ W_4(k), W_1^\dagger \} \rangle &= 4 \langle \{ c_{k\sigma} (\hat{n}_\sigma - \frac{1}{2}), f_\sigma^\dagger \} \rangle = 0 \\
 \langle \{ W_5(k), W_1^\dagger \} \rangle &= 4 \langle \{ f_\sigma^\dagger c_{k\bar{\sigma}} f_\sigma, f_\sigma^\dagger \} \rangle = 4 \langle f_\sigma^\dagger c_{k\bar{\sigma}} \rangle \\
 \langle \{ W_6(k), W_1^\dagger \} \rangle &= 4 \langle \{ c_{k\bar{\sigma}}^\dagger f_\sigma f_\sigma, f_\sigma^\dagger \} \rangle = 4 \langle c_{k\bar{\sigma}}^\dagger f_\sigma \rangle
 \end{aligned} \tag{B.1}$$

Berechnungen für $\vec{p}_{c_{k,\sigma} f_\sigma^\dagger}^T = \frac{1}{2} \langle \{ \vec{W}^T, W_1^\dagger \} \rangle$ siehe Gleichung (B.2):

$$\begin{aligned}
 \langle \{ W_1, W_1^\dagger \} \rangle &= 2 \\
 \langle \{ W_2, W_1^\dagger \} \rangle &= 4n_\sigma - 2 \\
 \langle \{ W_3(q), W_1^\dagger \} \rangle &= 0 \\
 \langle \{ W_4(q), W_1^\dagger \} \rangle &= 0 \\
 \langle \{ W_5(q), W_1^\dagger \} \rangle &= 4 \langle f_\sigma^\dagger c_{q\bar{\sigma}} \rangle \\
 \langle \{ W_6(q), W_1^\dagger \} \rangle &= 4 \langle c_{q\bar{\sigma}}^\dagger f_\sigma \rangle
 \end{aligned} \tag{B.2}$$

Berechnungen für $\vec{p}_{f_\sigma c_{k,\sigma}^\dagger} = \frac{1}{2} \langle \{ \vec{W}^T, W_3^\dagger(k) \} \rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle \{ W_1, W_3^\dagger(k) \} \rangle &= 2 \langle \{ f_\sigma, c_{k,\sigma}^\dagger \} \rangle = 0 \\
\langle \{ W_2, W_3^\dagger(k) \} \rangle &= 4 \langle \{ f_\sigma (\hat{n}_{\bar{\sigma}} - \frac{1}{2}), c_{k,\sigma}^\dagger \} \rangle = 0 \\
\langle \{ W_3(k), W_3^\dagger(k) \} \rangle &= 2 \langle \{ c_{k,\sigma}, c_{k,\sigma}^\dagger \} \rangle = 2 \\
\langle \{ W_4(k), W_3^\dagger(k) \} \rangle &= 4 \langle \{ c_{k\sigma} (\hat{n}_{\bar{\sigma}} - \frac{1}{2}), c_{k,\sigma}^\dagger \} \rangle = 4 (\langle \hat{n}_{\bar{\sigma}} \rangle - \frac{1}{2}) \\
\langle \{ W_5(k), W_3^\dagger(k) \} \rangle &= 4 \langle \{ f_\sigma^\dagger c_{k\bar{\sigma}} f_\sigma, c_{k,\sigma}^\dagger \} \rangle = 4 \langle f_\sigma^\dagger f_\sigma \rangle = 0 \\
\langle \{ W_6(k), W_3^\dagger(k) \} \rangle &= 4 \langle \{ c_{k\bar{\sigma}}^\dagger f_\sigma f_\sigma, c_{k,\sigma}^\dagger \} \rangle = 0
\end{aligned} \tag{B.3}$$

Die Terme für $\langle \{ W_i(q), W_3^\dagger(k) \} \rangle$ mit $i > 2$, in denen $q \neq k$ ist, ergeben alle Null. Das gilt auch für $\langle \{ W_i^\dagger(q), W_3(k) \} \rangle$.

Berechnungen für $\vec{p}_{f_\sigma^\dagger c_{k,\sigma}} = \frac{1}{2} \langle \{ (\vec{W}^T)^\dagger, W_3(k) \} \rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle \{ W_1^\dagger, W_3(k) \} \rangle &= 2 \langle \{ f_\sigma^\dagger, c_{k,\sigma} \} \rangle = 0 \\
\langle \{ W_2^\dagger, W_3(k) \} \rangle &= 4 \langle \{ f_\sigma^\dagger (\hat{n}_{\bar{\sigma}} - \frac{1}{2}), c_{k,\sigma} \} \rangle = 0 \\
\langle \{ W_3^\dagger(k), W_3(k) \} \rangle &= 2 \langle \{ c_{k,\sigma}^\dagger, c_{k,\sigma} \} \rangle = 2 \\
\langle \{ W_4^\dagger(k), W_3(k) \} \rangle &= 4 \langle \{ c_{k\sigma}^\dagger (\hat{n}_{\bar{\sigma}} - \frac{1}{2}), c_{k,\sigma} \} \rangle = 4 (\langle \hat{n}_{\bar{\sigma}} \rangle - \frac{1}{2}) \\
\langle \{ W_5^\dagger(k), W_3(k) \} \rangle &= 4 \langle \{ f_\sigma^\dagger c_{k\bar{\sigma}}^\dagger f_\sigma, c_{k,\sigma} \} \rangle = 4 \langle f_\sigma^\dagger f_\sigma \rangle = 0 \\
\langle \{ W_6^\dagger(k), W_3(k) \} \rangle &= 4 \langle \{ f_\sigma^\dagger f_\sigma^\dagger c_{k\bar{\sigma}}, c_{k,\sigma} \} \rangle = 0
\end{aligned} \tag{B.4}$$

C Berechnung der benötigten Elemente der Resolvente

Im Folgenden werden die Elemente $R_{11}(\omega)$, $R_{21}(\omega)$, $R_{31k}(\omega)$, $R_{41k}(\omega)$, $R_{51k}(\omega)$ und $R_{61k}(\omega)$ der Resolvente berechnet. Die Inverse der Resolvente ist in Gleichung (4.10) zu finden. Betrachte dazu

$$R^{-1} \cdot \begin{pmatrix} R_{11}(\omega) \\ R_{21}(\omega) \\ R_{31k}(\omega) \\ R_{41k}(\omega) \\ R_{51k}(\omega) \\ R_{61k}(\omega) \end{pmatrix} = \mathbb{1}. \quad (\text{C.1})$$

$$\begin{aligned} 1 &= (\omega - \tilde{\epsilon})R_{11}(\omega) - \frac{U}{2}R_{21}(\omega) - \sum_k V_k R_{31k}(\omega) \\ 0 &= -\frac{U}{2}R_{11}(\omega) + (\omega - \tilde{\epsilon})R_{21}(\omega) - \sum_k V_k R_{41k}(\omega) - \sum_k V_k R_{51k}(\omega) + \sum_k V_k R_{61k}(\omega) \\ 0 &= -V_k R_{11}(\omega) + (\omega - \epsilon_k)R_{31k}(\omega) \\ 0 &= -V_k R_{21}(\omega) + (\omega - \epsilon_k)R_{41k}(\omega) \\ 0 &= -V_k R_{21}(\omega) + (\omega - \epsilon_k)R_{51k}(\omega) \\ 0 &= V_k R_{21}(\omega) + (\omega + \epsilon_k - 2\tilde{\epsilon})R_{61k}(\omega) \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

$$R_{31k}(\omega) = \frac{V_k}{\omega - \epsilon_k} R_{11}(\omega) \quad (\text{C.3})$$

$$R_{41k}(\omega) = \frac{V_k}{\omega - \epsilon_k} R_{21}(\omega) \quad (\text{C.4})$$

$$R_{51k}(\omega) = \frac{V_k}{\omega - \epsilon_k} R_{21}(\omega) \quad (\text{C.5})$$

$$R_{61k}(\omega) = -\frac{V_k}{\omega + \epsilon_k - 2\tilde{\epsilon}} R_{21}(\omega) \quad (\text{C.6})$$

$$\begin{aligned}
0 &= -\frac{U}{2}R_{11}(\omega) + (\omega - \tilde{\epsilon})R_{21}(\omega) - \sum_k V_k R_{41k}(\omega) \\
&\quad - \sum_k V_k R_{51k}(\omega) + \sum_k V_k R_{61k}(\omega) \\
\Leftrightarrow 0 &= -\frac{U}{2}R_{11}(\omega) + (\omega - \tilde{\epsilon})R_{21}(\omega) - \sum_k \frac{V_k^2}{\omega - \epsilon_k} R_{12}(\omega) \\
&\quad - \sum_k \frac{V_k^2}{\omega - \epsilon_k} R_{12}(\omega) - \sum_k \frac{V_k^2}{\omega + \epsilon_k - 2\tilde{\epsilon}} R_{12}(\omega) \\
\Leftrightarrow 0 &= -\frac{U}{2}R_{11}(\omega) + (\omega - \tilde{\epsilon})R_{12}(\omega) - 2\Gamma(\omega)R_{12}(\omega) + \Gamma^*(-\omega + 2\tilde{\epsilon})R_{12}(\omega) \\
\Leftrightarrow \frac{U}{2}R_{11}(\omega) &= (\omega - \tilde{\epsilon} - 2\Gamma(\omega) + \Gamma^*(-\omega + 2\tilde{\epsilon})) R_{12}(\omega) \\
\Leftrightarrow R_{12}(\omega) &= \frac{U}{2} \frac{1}{\omega - \tilde{\epsilon} - 2\Gamma(\omega) + \Gamma^*(-\omega + 2\tilde{\epsilon})} R_{11}(\omega)
\end{aligned} \tag{C.7}$$

Dabei ist $\Gamma(x)$ die Hybridisierungsfunktion:

$$\begin{aligned}
\Gamma(x) &= \sum_k \frac{V_k^2}{x + i\delta - \epsilon_k}, \quad \delta > 0 \\
-\Gamma^*(-x) &= \sum_k \frac{V_k^2}{x + i\delta + \epsilon_k}
\end{aligned} \tag{C.8}$$

$$\begin{aligned}
1 &= (\omega - \tilde{\epsilon})R_{11}(\omega) - \frac{U}{2}R_{12}(\omega) - \sum_k V_k R_{13k}(\omega) \\
\Leftrightarrow 1 &= (\omega - \tilde{\epsilon})R_{11}(\omega) - \frac{U}{2}R_{12}(\omega) - \sum_k \frac{V_k^2}{\omega - \epsilon_k} R_{11} \\
\Leftrightarrow 1 &= (\omega - \tilde{\epsilon})R_{11}(\omega) - \frac{U}{2}R_{12}(\omega) - \Gamma(\omega)R_{11} \\
\Leftrightarrow 1 &= (\omega - \tilde{\epsilon} - \Gamma(\omega))R_{11}(\omega) - \frac{U}{2}R_{12}(\omega) \\
\Leftrightarrow 1 &= (\omega - \tilde{\epsilon} - \Gamma(\omega))R_{11}(\omega) - \frac{U^2}{4} \frac{1}{\omega - \tilde{\epsilon} - 2\Gamma(\omega) + \Gamma^*(-\omega + 2\tilde{\epsilon})} R_{11}(\omega) \\
\Leftrightarrow R_{11}(\omega) &= \frac{1}{\omega - \tilde{\epsilon} - \Gamma(\omega) - \frac{U^2}{4} \frac{1}{\omega - \tilde{\epsilon} - 2\Gamma(\omega) + \Gamma^*(-\omega + 2\tilde{\epsilon})}}
\end{aligned} \tag{C.9}$$

Definiere eine Selbstenergie

$$\Sigma(\omega) = \frac{U^2}{4} \frac{1}{\omega - \tilde{\epsilon} - 2\Gamma(\omega) + \Gamma^*(-\omega + 2\tilde{\epsilon})}. \quad (\text{C.10})$$

Die berechneten Elemente der Resolvente lauten unter Betrachtung von $\omega \rightarrow \omega + i\delta$ und der Symmetrie der Resolvente

$$R_{11}(\omega) = \frac{1}{\omega + i\delta - \tilde{\epsilon} - \Gamma(\omega) - \Sigma(\omega)} \quad (\text{C.11})$$

$$R_{12}(\omega) = \frac{2}{U} \Sigma(\omega) R_{11}(\omega) = R_{21}(\omega) \quad (\text{C.12})$$

$$R_{13k}(\omega) = \frac{V_k}{\omega + i\delta - \epsilon_k} R_{11}(\omega) = R_{31k}(\omega) \quad (\text{C.13})$$

$$R_{14k}(\omega) = \frac{V_k}{\omega + i\delta - \epsilon_k} R_{12}(\omega) = R_{41k}(\omega) \quad (\text{C.14})$$

$$R_{15k}(\omega) = \frac{V_k}{\omega + i\delta - \epsilon_k} R_{12}(\omega) = R_{51k}(\omega) \quad (\text{C.15})$$

$$R_{16k}(\omega) = -\frac{V_k}{\omega + i\delta + \epsilon_k - 2\tilde{\epsilon}} R_{12}(\omega) = R_{51k}(\omega) \quad (\text{C.16})$$

Äquivalent oder nach Gleichung (4.15) lassen sich die Elemente der gestrichenen Resolvente mit der Selbstenergie

$$\Sigma'(\omega) = \frac{U^2}{4} \frac{1}{\omega + \tilde{\epsilon} + 2\Gamma(-\omega)^* - \Gamma(\omega + 2\tilde{\epsilon})} = -\Sigma^*(-\omega) \quad (\text{C.17})$$

berechnen zu

$$R'_{11}(\omega) = \frac{1}{\omega + i\delta + \tilde{\epsilon} + \Gamma(-\omega)^* - \Sigma'(\omega)} \quad (\text{C.18})$$

$$R'_{12}(\omega) = -\frac{2}{U} \Sigma'(\omega) R'_{11}(\omega) \quad (\text{C.19})$$

$$R'_{13k}(\omega) = -\frac{V_k}{\omega + i\delta + \epsilon_k} R'_{11}(\omega) \quad (\text{C.20})$$

$$R'_{14k}(\omega) = -\frac{V_k}{\omega + i\delta + \epsilon_k} R'_{12}(\omega) \quad (\text{C.21})$$

$$R'_{15k}(\omega) = -\frac{V_k}{\omega + i\delta + \epsilon_k} R'_{12}(\omega) \quad (\text{C.22})$$

$$R'_{16k}(\omega) = \frac{V_k}{\omega + i\delta - \epsilon_k + 2\tilde{\epsilon}} R'_{12}(\omega). \quad (\text{C.23})$$

Im Limes $\delta \rightarrow 0^+$ und im Breitbandlimes lässt sich die Hybridisierungsfunktion berechnen zu

$$\begin{aligned} \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \Gamma(x) &\rightarrow -\gamma i \\ \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \Gamma^*(-x) &\rightarrow \gamma i \end{aligned} \quad (\text{C.24})$$

und die Selbstenergie zu

$$\lim_{\delta \rightarrow 0^+} \Sigma(\omega) = \frac{U^2}{4} \frac{1}{\omega - \tilde{\epsilon} + 2\gamma i + \gamma i} = \frac{U^2}{4} \frac{1}{\omega - \tilde{\epsilon} + 3\gamma i}. \quad (\text{C.25})$$

Damit lautet $R_{11}(\omega)$ im Breitbandlimes

$$\lim_{\delta \rightarrow 0^+} R_{11}(\omega) = \frac{1}{\omega - \tilde{\epsilon} + i\gamma - \frac{U^2}{4} \frac{1}{\omega - \tilde{\epsilon} + 3\gamma i}}. \quad (\text{C.26})$$

Desweiteren werden in dieser Arbeit in Kapitel 4.2.1 noch die Elemente $R_{13k}(\omega)$, $R_{23k}(\omega)$, $R_{53kq}(\omega)$ und $R_{63kq}(\omega)$ benötigt. $R_{13k}(\omega)$ ist aus vorherigen Rechnungen bekannt. Um die anderen Elemente zu berechnen, wird die Relation $\mathbf{R}^{-1}(\omega)\mathbf{R}(\omega) = \mathbb{1}$ genutzt. Die Indizes k und m geben die Zeilen bzw Spalten der Vektor- und Matrixelemente der inversen Resolvente an. Die Indizes l und q geben die Zeilen bzw Spalten der Vektor- und Matrixelemente der Resolvente an. Die Indizes k und q werden fest gewählt, während die Indizes l und m die Zahlen von 1 bis N durchlaufen. Der Ausdruck x_m entspricht hier einem $(1 \times N)$ -Vektor, der mit dem Wert x gefüllt ist.

Zur Berechnung von $R_{23k}(\omega) = R_{32k}(\omega)$ wird die Relation

$$(\mathbf{R}^{-1}(\omega))_{3ik} (\mathbf{R}(\omega))_{i2l} = 0 \quad (\text{C.27})$$

genutzt.

$$\begin{aligned} (-V_q, 0, (\omega - \epsilon_q)_m \delta_{qm}, 0_m, 0_m, 0_m) \cdot \begin{pmatrix} R_{12}(\omega) \\ R_{22}(\omega) \\ R_{32l}(\omega) \\ R_{42l}(\omega) \\ R_{52l}(\omega) \\ R_{62l}(\omega) \end{pmatrix} &= 0 \\ -V_q R_{12}(\omega) + \sum_l (\omega - \epsilon_q) \delta_{lq} R_{32l}(\omega) &= 0 \\ -V_q R_{12}(\omega) + (\omega - \epsilon_q) R_{32q}(\omega) &= 0 \\ \frac{V_q}{\omega - \epsilon_q} R_{12}(\omega) &= R_{32q}(\omega) \end{aligned} \quad (\text{C.28})$$

Zur Berechnung von $R_{53kq}(\omega)$ wird die Relation

$$(\mathbf{R}^{-1}(\omega))_{5iq} (\mathbf{R}(\omega))_{i3k} = 0 \quad (\text{C.29})$$

genutzt.

$$\begin{aligned} (0, -V_q, 0_m, 0_m, (\omega - \epsilon_q)_m \delta_{qm}, 0_m) \cdot \begin{pmatrix} R_{13k}(\omega) \\ R_{23k}(\omega) \\ R_{33kl}(\omega) \\ R_{43kl}(\omega) \\ R_{53kl}(\omega) \\ R_{63kl}(\omega) \end{pmatrix} &= 0 \\ -V_q R_{23k}(\omega) + \sum_l (\omega - \epsilon_q) R_{53kl}(\omega) \delta_{ml} &= 0 \\ -V_q R_{23k}(\omega) + (\omega - \epsilon_q) R_{53kq}(\omega) &= 0 \\ \frac{V_q}{\omega - \epsilon_q} R_{23k}(\omega) &= R_{53kq}(\omega) \end{aligned} \quad (\text{C.30})$$

Berechnung von $R_{63kq}(\omega)$

$$\begin{aligned} (\mathbf{R}^{-1}(\omega))_{6il} (\mathbf{R}(\omega))_{i3k} &= 0 \\ (0, V_q, 0_m, 0_m, 0_m, (\omega + \epsilon_q - 2\tilde{\epsilon})_m \delta_{qm}) \cdot \begin{pmatrix} R_{13k}(\omega) \\ R_{23k}(\omega) \\ R_{33kl}(\omega) \\ R_{43kl}(\omega) \\ R_{53kl}(\omega) \\ R_{63kl}(\omega) \end{pmatrix} &= 0 \\ V_q R_{23k}(\omega) + \sum_l (\omega + \epsilon_q - 2\tilde{\epsilon}) R_{63kl}(\omega) \delta_{lq} &= 0 \\ V_q R_{23k}(\omega) + (\omega + \epsilon_q - 2\tilde{\epsilon}) R_{63kq}(\omega) &= 0 \\ -\frac{V_q}{\omega + \epsilon_q - 2\tilde{\epsilon}} R_{23k}(\omega) &= R_{63kq}(\omega). \end{aligned} \quad (\text{C.31})$$

Zusammengefasst lauten die Elemente:

$$R_{13k}(\omega) = \frac{V_k}{\omega - \epsilon_k} R_{11}(\omega) \quad (\text{C.32a})$$

$$R_{32k}(\omega) = \frac{V_k}{\omega - \epsilon_k} R_{12}(\omega) \quad (\text{C.32b})$$

$$R_{53kq}(\omega) = \frac{V_q}{\omega - \epsilon_q} R_{23k}(\omega) \quad (\text{C.32c})$$

$$R_{63kq}(\omega) = -\frac{V_q}{\omega + \epsilon_q - 2\tilde{\epsilon}} R_{23k}(\omega) \quad (\text{C.32d})$$

Literatur

- [1] Wolfgang Nolting. *Grundkurs Theoretische Physik 3. Elektrodynamik*. Springer-Lehrbuch. Springer Spektrum, 2013. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-642-37905-5>.
- [2] Wolfgang Nolting. *Grundkurs Theoretische Physik 5/2. Quantenmechanik - Methoden und Anwendungen*. Springer-Lehrbuch. Springer Spektrum, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-662-44230-2>.
- [3] Gene Mosca Paul A. Tipler. *Physik. für Wissenschaftler und Ingenieure*. Springer Spektrum, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-642-54166-7>.
- [4] Alexander Cyril Hewson. *The Kondo Problem to Heavy Fermions*. Cambridge Studies in Magnetism. Cambridge University Press, 1993. DOI: 10.1017/CB09780511470752.
- [5] W.J. de Haas, J. de Boer und G.J. van den Berg. „The electrical resistance of gold, copper and lead at low temperatures“. In: *Physica* 1.7 (1934), S. 1115–1124. ISSN: 0031-8914. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0031-8914\(34\)80310-2](https://doi.org/10.1016/S0031-8914(34)80310-2).
- [6] P.W. Anderson. „Localized Magnetic States in Metals“. In: *PhysRev* 124.1 (Okt. 1961), S. 41–53. DOI: 10.1103/physrev.124.41.
- [7] C. Zener. „Interaction Between the *d* Shells in the Transition Metals“. In: *Phys. Rev.* 81 (3 Feb. 1951), S. 440–444. DOI: 10.1103/PhysRev.81.440.
- [8] Jun Kondo. „Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys“. In: *Progress of Theoretical Physics* 32.1 (Juli 1964), S. 37–49. ISSN: 0033-068X. DOI: 10.1143/PTP.32.37. eprint: <https://academic.oup.com/ptp/article-pdf/32/1/37/5193092/32-1-37.pdf>.
- [9] Paul Wiegmann. „Towards an Exact Solution of the Anderson Model - Phys. Lett. A80 163 (1980)“. In: (Jan. 1996).
- [10] H.A. Bethe. „Zur Theorie der Metalle“. In: *Z. Physik* 71 (1931), S. 205–226. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01341708>.
- [11] P. Schlottmann. „Bethe-Ansatz Solution of the Anderson Model of a Magnetic Impurity with Orbital Degeneracy“. In: *Phys. Rev. Lett.* 50 (21 Mai 1983), S. 1697–1700. DOI: 10.1103/PhysRevLett.50.1697.

- [12] J W Rasul und A C Hewson. „Comparison of the $1/N$ expansion and Bethe ansatz results for the degenerate Anderson model“. In: *Journal of Physics C: Solid State Physics* 17.19 (Juli 1984), S. 3337–3353. DOI: 10.1088/0022-3719/17/19/010.
- [13] Paul Wiegmann und A. Tsvelik. „Exact solution of the Anderson model: I“. In: *Journal of Physics C: Solid State Physics* 16 (Nov. 2000), S. 2281. DOI: 10.1088/0022-3719/16/12/017.
- [14] Michel Caffarel und Werner Krauth. „Exact diagonalization approach to correlated fermions in infinite dimensions: Mott transition and superconductivity“. In: *Phys. Rev. Lett.* 72 (10 März 1994), S. 1545–1548. DOI: 10.1103/PhysRevLett.72.1545.
- [15] Piers Coleman. „Heavy Fermions: Electrons at the Edge of Magnetism“. In: *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials* (2007). URL: https://www.google.com/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=&cad=rja&uact=8&ved=2ahUKEwiq9Ybg24b0AhV2hf0HHTTr1BvUQFnoECAQQAQ&url=https%3A%2F%2Fwww.physics.rutgers.edu%2F~coleman%2F682A%2Felectrons_on_the_brink.pdf&usg=A0vVaw1YXYJcnx6sppEVb-vj96D9.
- [16] H. R. Krishna-murthy, J. W. Wilkins und K. G. Wilson. „Renormalization-group approach to the Anderson model of dilute magnetic alloys. I. Static properties for the symmetric case“. In: *Phys. Rev. B* 21 (3 Feb. 1980), S. 1003–1043. DOI: 10.1103/PhysRevB.21.1003.
- [17] H. R. Krishna-murthy, J. W. Wilkins und K. G. Wilson. „Renormalization-group approach to the Anderson model of dilute magnetic alloys. II. Static properties for the asymmetric case“. In: *Phys. Rev. B* 21 (3 Feb. 1980), S. 1044–1083. DOI: 10.1103/PhysRevB.21.1044.
- [18] J. E. Hirsch und R. M. Fye. „Monte Carlo Method for Magnetic Impurities in Metals“. In: *Phys. Rev. Lett.* 56 (23 Juni 1986), S. 2521–2524. DOI: 10.1103/PhysRevLett.56.2521.
- [19] Kicheon Kang und B. I. Min. „Equation-of-motion treatment of the impurity Anderson model with a finite on-site Coulomb repulsion“. In: *Phys. Rev. B* 52 (15 Okt. 1995), S. 10689–10692. DOI: 10.1103/PhysRevB.52.10689.
- [20] Grzegorz Górski, Jerzy Mizia und Krzysztof Kucab. *Alternative equation of motion approach to the single-impurity Anderson model*. 2014. arXiv: 1404.4439 [cond-mat.str-el].
- [21] Gerd Czycholl. „Equation-of-motion treatment of the N -fold-degenerate Anderson model in the large- N limit“. In: *Physical Review B* 31.5 (1985), S. 2867.

- [22] Philip Bleicker und Götz S. Uhrig. „Strong quenches in the one-dimensional Fermi-Hubbard model“. In: *Phys. Rev. A* 98 (3 Sep. 2018), S. 033602. DOI: 10.1103/PhysRevA.98.033602.
- [23] Yigal Meir, Ned S. Wingreen und Patrick A. Lee. „Low-temperature transport through a quantum dot: The Anderson model out of equilibrium“. In: *Physical Review Letters* 70.17 (Apr. 1993), S. 2601–2604. ISSN: 0031-9007. DOI: 10.1103/physrevlett.70.2601.
- [24] Mona Kalthoff et al. „Comparison of the iterated equation of motion approach and the density matrix formalism for the quantum Rabi model“. In: *The European Physical Journal B* 90.5 (Mai 2017). ISSN: 1434-6036. DOI: 10.1140/epjb/e2017-80063-2.
- [25] Robin Röhrig et al. „Quantum mechanical treatment of large spin baths“. In: *Phys. Rev. B* 97 (16 Apr. 2018), S. 165431. DOI: 10.1103/PhysRevB.97.165431.
- [26] P. Schlottmann. „Some exact results for dilute mixed-valent and heavy-fermion systems“. In: *Physics Reports* 181.1 (1989), S. 1–119. ISSN: 0370-1573. DOI: [https://doi.org/10.1016/0370-1573\(89\)90116-6](https://doi.org/10.1016/0370-1573(89)90116-6).
- [27] Wolfgang Nolting. *Grundkurs Theoretische Physik 7. Viel-Teilchen-Theorie*. Springer-Lehrbuch. Springer Spektrum, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-642-25808-4>.
- [28] Wolfgang Nolting. *Grundkurs Theoretische Physik 5/1. Quantenmechanik - Grundlagen*. Springer-Lehrbuch. Springer, 2009. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-540-68869-3>.
- [29] M. Galassi et al. *GNU Scientific Library Reference Manual (3rd Ed.)* ISBN: 0954612078. URL: <http://www.gnu.org/software/gsl/>.
- [30] E. Jones, T. Oliphant, P. Peterson et al. *SciPy: Open source scientific tools for Python*. [Online; accessed 2022-01-24]. 2001. URL: <http://www.scipy.org/>.
- [31] Maxima. *Maxima, a Computer Algebra System. Version 5.45.0*. 2021. URL: <https://maxima.sourceforge.io/>.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. Götz S. Uhrig für das schöne Masterthema und die gute Betreuung während der Bearbeitung des Themas bedanken. Bei Herrn Prof. Dr. Frithjof B. Anders möchte ich mich für die Übernahme des Zweitgutachters bedanken.

Des Weiteren möchte ich mich bei Philip Bleicker bedanken, der sich während der Bearbeitungszeit immer Zeit für meine Fragen genommen hat und meine Masterarbeit Korrekturgelesen hat. Mein Dank geht auch an die Leute am Lehrstuhl, die für ein angenehmes Arbeitsklima in der Uni gesorgt haben.

Ganz herzlich möchte ich mich auch bei meiner Familie und Freunden bedanken, die mich währen der Arbeit und vor allem in der Endphase tatkräftig unterstützt haben.

Eidesstattliche Versicherung

(Affidavit)

Behrensmeier, Sinja

192963

Name, Vorname
(surname, first name)

Matrikelnummer
(student ID number)

Bachelorarbeit
(Bachelor's thesis)

Masterarbeit
(Master's thesis)

Titel
(Title)

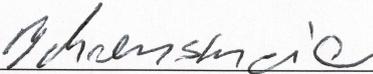
Iterierte Bewegungsgleichungen für das Einstörstellen-Andersonmodell bei allgemeiner Füllung

Ich versichere hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Abschlussarbeit mit dem oben genannten Titel selbstständig und ohne unzulässige fremde Hilfe erbracht habe. Ich habe keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie wörtliche und sinngemäße Zitate kenntlich gemacht. Die Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

I declare in lieu of oath that I have completed the present thesis with the above-mentioned title independently and without any unauthorized assistance. I have not used any other sources or aids than the ones listed and have documented quotations and paraphrases as such. The thesis in its current or similar version has not been submitted to an auditing institution before.

Dortmund, 22.03.2022

Ort, Datum
(place, date)


Unterschrift
(signature)

Belehrung:

Wer vorsätzlich gegen eine die Täuschung über Prüfungsleistungen betreffende Regelung einer Hochschulprüfungsordnung verstößt, handelt ordnungswidrig. Die Ordnungswidrigkeit kann mit einer Geldbuße von bis zu 50.000,00 € geahndet werden. Zuständige Verwaltungsbehörde für die Verfolgung und Ahndung von Ordnungswidrigkeiten ist der Kanzler/die Kanzlerin der Technischen Universität Dortmund. Im Falle eines mehrfachen oder sonstigen schwerwiegenden Täuschungsversuches kann der Prüfling zudem exmatrikuliert werden. (§ 63 Abs. 5 Hochschulgesetz - HG -).

Die Abgabe einer falschen Versicherung an Eides statt wird mit Freiheitsstrafe bis zu 3 Jahren oder mit Geldstrafe bestraft.

Die Technische Universität Dortmund wird ggf. elektronische Vergleichswerkzeuge (wie z.B. die Software „turnitin“) zur Überprüfung von Ordnungswidrigkeiten in Prüfungsverfahren nutzen.

Die oben stehende Belehrung habe ich zur Kenntnis genommen:

Official notification:

Any person who intentionally breaches any regulation of university examination regulations relating to deception in examination performance is acting improperly. This offense can be punished with a fine of up to EUR 50,000.00. The competent administrative authority for the pursuit and prosecution of offenses of this type is the Chancellor of TU Dortmund University. In the case of multiple or other serious attempts at deception, the examinee can also be unenrolled, Section 63 (5) North Rhine-Westphalia Higher Education Act (*Hochschulgesetz, HG*).

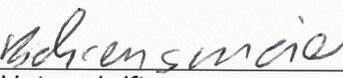
The submission of a false affidavit will be punished with a prison sentence of up to three years or a fine.

As may be necessary, TU Dortmund University will make use of electronic plagiarism-prevention tools (e.g. the "turnitin" service) in order to monitor violations during the examination procedures.

I have taken note of the above official notification.*

Dortmund, 22.03.2022

Ort, Datum
(place, date)


Unterschrift
(signature)

***Please be aware that solely the German version of the affidavit ("Eidesstattliche Versicherung") for the Bachelor's/ Master's thesis is the official and legally binding version.**