

Elektronen in Festkörpern: Grenzen des Bandbildes

N. Grewe

24. Mai 2006

1 Einiges über Grundlagen des Einteilchenbildes in wechselwirkenden Elektronensystemen

Die gängige Bandstrukturtheorie suggeriert, dass Valenzelektronen in Kristallen in Einteilchenzuständen residieren, deren Dispersionsrelation (Energie gegen Kristallimpuls) als Bänderschema über der ersten Brillouin-Zone organisiert werden kann. Andererseits bewegen sich die Valenzelektronen im Hintergrundpotential der Ionenrümpfe in Gestalt einer i. A. stark wechselwirkenden Flüssigkeit, welche z. B. im metallischen Zustand durch Landaus Konzept einer "Fermi-Flüssigkeit" beschrieben werden kann, bei dem ein Einteilchenbild nur approximativ nahe der Fermi-Kante Gültigkeit besitzt. Auch die bekannte Rechtfertigung dafür, dass die in Hartree-Fock-Theorie oder in LDA berechneten Energieparameter individuellen Einteilchenanregungen zugeordnet werden können, in Form von Koopmans Theorem, ist approximativer Natur. Sie versagt typischerweise für schmale Bänder, wie sie etwa in vielen Übergangsmetallverbindungen anzutreffen wären.

Von manchen Physikern wurde dieses grundlegende Problem schon früh auf folgende Frage zugespitzt: Existiert eine kanonische Transformation, die das wechselwirkende Elektronensystem, auch in vereinfachter Form als "Jellium", in unabhängige Freiheitsgrade überführt, also den Hamiltonian diagonalisiert? Schon damals war klar, dass das Spektrum neben Energien für Einteilchenanregungen auch solche für kollektive Moden enthalten muss, z. B. Plasmonen, die nicht wie die unterliegenden Elektronen als Fermionen mit Spin, Ladung und Masse auftreten. Weitergehend lässt sich sogar streng zeigen, z. B. in der Form des Theorems von Haag, dass in einem echt wechselwirkenden Vielteilchensystem i. A. keine exakte kanonische Transformation auf ein Einteilchenbild existiert.

Für die Beschreibung der Dynamik eines Systems wechselwirkender Fermionen existieren hilfreiche approximative Konzepte, welche die Ausbildung kollektiver Moden und die Formation von "Quasiteilchen" zum Inhalt haben. Letztere tragen die Quantenzahlen einzelner Elektronen wie Kristallimpuls, Ladung, Masse und Drehimpulse, enthalten aber einen Anteil kollektiver Bewegung, oft als "Backflow" charakterisiert, und besitzen daher i. A. eine endliche Lebensdauer. Diese divergiert allenfalls nahe der Fermi-Kante. Das Quasiteilchenkonzept und damit verbunden das der Fermi-Flüssigkeit hat sich in einigen Fällen stark wechselwirkender Fermi-Systeme im Bereich tiefer Temperaturen als außerordentlich nützlich erwiesen, so im Falle der ^3He -Flüssigkeit oder der sog. "Schwere-Fermionen-Verbindungen". In anderen Fällen, so bei der Klasse der Hochtemperatur-Supraleiter, scheint es in seinen Annahmen "zu einfach" konstruiert zu sein, und zwar auch für den normalleitenden Zustand.

Im folgenden sollen einige Überlegungen und Modellrechnungen zum Einteilchenaspekt von Festkörperelektronen vorgebracht werden, die insbesondere auch die Frage nach der möglichen Existenz von Bändern wohldefinierter (= langlebiger) Quasiteilchen beleuchten. Da man nicht von vorneherein die Natur solcher hypothetischer Quasiteilchen

kennt, etwa als quantenmechanische Überlagerung (Linearkombination) bekannter atomarer Orbitale der Konstituenten des Kristalls oder alternativ von (orthogonalisierten) ebenen Wellen, scheint der Nachweis von deren Existenz ein ernstes Problem zu sein. Es lässt sich aber in Form eines Experimentes folgendermaßen lösen: In der Regel kann das ionische Hintergrundpotential im Festkörper pro Elementarzelle (nur) eine endliche Zahl n von Valenzelektronen binden. In einer Modellrechnung wird das i. A. durch Beschränkung des Hilbert-Raumes realisiert. Nun ist der Kristallimpuls \underline{k} eine "gute Quantenzahl" für Einteilchenanregungen aufgrund der Gittertranslationsinvarianz des Systems; wir wollen wie in Lehrbüchern annehmen, dass die Glattheit eines hypothetischen "effektiven Einteilchen-Hamiltonians" die Existenz von stetigen Bändern in der Dispersion erzwingt, die sich durch die ganze 1. BZ erstrecken. Dann muss es zu jedem \underline{k} -Wert genau n diskrete (Entartungen mitgezählt) Einteilchenenergien geben, die sich in einem spektroskopischen Experiment als ideal diskrete und scharfe Anregungspeaks äußern sollten. Genau an der Gestalt eines solchen \underline{k} -aufgelösten Spektrums ließe sich also der Gültigkeitsrahmen eines konventionellen Einteilchenbandbildes festmachen.

Man mag nun einwenden, dass ein außerhalb des Kristalls mit Impuls $\hbar \underline{k}$ präpariertes Elektron im Kristallinneren aufgrund von Potentialstreuung und Wechselwirkungsprozessen zerfällt. Wird die Dynamik aber durch einen effektiven Einteilchen-Hamiltonian bestimmt, so kommen als mögliche Endzustände nur die n -hypothetischen Bandzustände zu diesem \underline{k} in Frage; allgemein wird man eine quantenmechanische Überlagerung davon erhalten. Das registrierte Spektrum wird n scharfe δ -Zacken enthalten, deren Gewichte sich zum Wert 1 aufsummieren. Die gebrochenzahligen Anteile ("Z-Faktoren") berücksichtigen den Umstand, dass die Wellenfunktion des Ausgangsteilchens noch keine Eigenfunktion des hypothetischen effektiven Einteilchen-Hamiltonians ist, sondern eine Linearkombination von n Stück davon. Im Einteilchenbild, so wie es auch die konventionelle Bandstrukturtheorie vermittelt, kann man also jeder dieser diskreten und scharfen Resonanzen einen kompletten Bandzustand mit spektralem Gewicht 1 zuordnen, welcher anteilmäßig nach Maßgabe des Z-Faktors im Ausgangszustand enthalten ist.

Diese Interpretation läßt sich für ein echt wechselwirkendes System aufgrund der Korrelationen nicht aufrechterhalten. Dies zeigt schon das Beispiel einer einzigen s -Schale: Hier existieren zwei o.B.d.A. entartete Einteilchenzustände mit z -Komponente des Spins gleich $\frac{\hbar}{2}\sigma$, $\sigma = \pm 1$, und Energie $\epsilon_\sigma \equiv \epsilon < 0 = \mu$ im betrachteten Regime. Der Fock-Raum enthält vier Zustände, das Vakuum, die beiden Einteilchenzustände und einen Zweiteilchenzustand mit Energie $2\epsilon + U$, wobei U das lokale Matrixelement der Coulomb-Abstoßung ist. Falls nun $\epsilon + U > 0$ und $T = 0$, besteht das Anregungsspektrum für ein Elektron im Ausgangszustand σ aus zwei scharfen δ -Zacken bei den Energien ϵ und $\epsilon + U$, jede mit Gewicht $\zeta_\sigma = \frac{1}{2}$. Allgemeiner gilt hier

$$\rho_\sigma(\omega) = (W_0 + W_{1\sigma})\delta(\omega - \epsilon_\sigma) + (W_{1-\sigma} + W_2)\delta(\omega - \epsilon_\sigma - U), \quad (1)$$

wobei W_M die Besetzungswahrscheinlichkeiten der vier Fock-Raum-Zustände im thermischen Gleichgewicht sind. Diesen insgesamt vier Resonanzen stehen aber nur zwei Einteilchenzustände gegenüber, so dass hier die partiellen Z-Faktoren $0 < \zeta_\sigma = \frac{1}{2} < 1$ mit echten Zweiteilchenkorrelationen verknüpft sind und nicht aus einer einfachen Überlagerung in einer zugrundeliegenden Einteilchenbasis resultieren. In einer Theorie des effektiven Feldes (Hartree-Fock-Theorie) würde man die Situation mit Hilfe zweier Einteilchenzustände der Energie $\tilde{\epsilon}_\sigma = \epsilon_\sigma + \frac{1}{2}U$ beschreiben, allgemeiner $\tilde{\epsilon}_\sigma = \epsilon_\sigma + U\langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle$, welche eine Coulomb-Abstoßung durch ein Teilchen der jeweils anderen Spineinstellung mit der durch dessen Besetzungszahl $\langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle$ gegebenen Wahrscheinlichkeit berücksichtigt. Für einen Grundzustand im Einteilchensektor mit magnetischer Isotropie ist im betrachteten Fall $\langle \hat{n}_\uparrow \rangle = \langle \hat{n}_\downarrow \rangle = \frac{1}{2}$.

Das Einteilchen-Anregungsspektrum ergibt sich daraus zu $\rho_\sigma(\omega) = \delta(\omega - \tilde{\epsilon}_\sigma)$, im offensichtlichen Widerspruch zu (1). Erst wenn man das effektive Feld selbst als ein Funktional der tatsächlichen lokalen Besetzung der Niveaus versteht, kann man für spezifische Zustände (z. B. den Grundzustand) jeweils ein korrektes Ergebnis erhalten. In diesem Fall verlieren die Energieparameter aber ihre Bedeutung als unabhängige Anregungsenergien einer Einteilchenbeschreibung. Jeder Übergang im Funktional zu Erwartungswerten $\langle \hat{n}_\sigma \rangle$ von Besetzungszahlen ignoriert die dynamisch produzierten lokalen Korrelationen, welche z. B. einen unmagnetischen Grundzustand mit kleiner Energie $\epsilon < \tilde{\epsilon}_\sigma < 0$ ermöglichen: Die Schale wird vorzugsweise nur dann mit einem Teilchen der Spinrichtung σ besetzt, wenn keines der anderen Spinrichtung $-\sigma$ dort vorhanden ist. Das momentane magnetische Moment mittelt sich über lange Zeiten hinaus, in denen Teilchenaustausch mit einem "Bad" (Umgebung) den Spin variiert.

In einer Modellrechnung entnimmt man das Einteilchen-Anregungsspektrum einer für den spezifischen Anregungsprozess mit Ausgangszustand der Energie ϵ_{kv} zum Erzeugungsoperator \hat{c}_{kv}^+ ($v =$ andere Quantenzahlen) gebildeten Einteilchen-Greensfunktion; diese läßt sich immer in folgender Form schreiben :

$$G_{kv}(z) = \frac{1}{z - (\epsilon_{kv} - \mu) - \Sigma_{kv}(z)}. \quad (2)$$

$\Sigma_{kv}(z)$ ist die irreduzible Selbstenergie, die sich z. B. in einer Störungsentwicklung nach der Wechselwirkung als Summe verbundener Diagramme berechnen läßt. Ihre wesentlichen analytischen Eigenschaften liegen fest: Sie ist holomorph in der oberen und unteren Halbebene der komplexen Energievariablen z , und das Einteilchen-Anregungsspektrum ergibt sich aus der Singularitätenstruktur an der reellen Achse:

$$\rho_\nu(\underline{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{kv}(\omega + i\delta). \quad (3)$$

Ein Spektrum für auf die Elementarzelle beschränkte "lokale" Anregungen vom Typ (= "Band") ν ergibt sich durch \underline{k} -Summation:

$$\rho_\nu(\omega) = -\frac{1}{\pi N} \sum_{\underline{k}} \text{Im} G_{kv}(\omega + i\delta). \quad (4)$$

Hierbei ist N die Zahl der Zellen im Periodizitätsvolumen. Ohne Wechselwirkungen bzw. in Hartree-Fock- oder konventioneller Bandstrukturtheorie existiert das System als Fermi-Gas, falls keine Phasenübergänge eintreten. Allgemeiner ist nach Luttinger (~1960) eine Fermi-Flüssigkeit im Kristall durch die Existenz einer Fermi-Fläche charakterisiert, die sich analytisch aus der Bedingung

$$\tilde{\epsilon}_{kv} + \mu = \epsilon_{kv} + \text{Re}\Sigma_{kv}(\tilde{\epsilon}_{kv})|_{T=0} \stackrel{!}{=} 0 \quad \Rightarrow \underline{k} = \underline{k}_F \quad (5)$$

bestimmt. An ihr springen die (aus G_{kv} ableitbaren) Besetzungszahlen für Elektronen im Zustand (\underline{k}, ν) bei $T = 0$ diskontinuierlich. Außerdem bleibt das \underline{k} -Raum-Volumen des Fermi-Körpers trotz Verschiebung der Einteilchenenergien $\epsilon_{kv} \rightarrow \tilde{\epsilon}_{kv} \equiv \epsilon_{kv} + \Delta\epsilon_{kv}$ unverändert, was als Hinweis auf eine Eins-zu-Eins-Zuordnung der ursprünglichen Einteilchenfreiheitsgrade zu neuen gesehen werden kann, die allerdings nur nahe $\underline{k} = \underline{k}_F$ den Cha-

rakter freier Teilchen annehmen. Hier sei angefügt, dass selbst in Abwesenheit langreichweitiger Korrelationen unter den Elektronen (Supraleitung, Magnetismus, Ladungsdichtewellen etc.) Alternativen zum Fermi-Flüssigkeitszustand bestehen (Luttinger-Flüssigkeit, quantenkritische Punkte etc.).

Im folgenden wird großkanonisch gerechnet, d. h. ein festes chemisches Potential wird in den Einteilchenenergien absorbiert. Insbesondere wird $\mu(T) = \epsilon_F = 0$ festgelegt. Nahe einer gut ausgesprägten Resonanzstelle $\tilde{\epsilon}_{k\nu}$ im Spektrum (und insbesondere natürlich im Fermi-Flüssigkeitszustand für $\tilde{\epsilon}_{k\nu}$ nahe $\mu = 0$) kann man Greensfunktion und Anregungsspektrum durch Entwicklung der Selbstenergie vereinfachen:

$$\begin{aligned}\Sigma_{k\nu}(\omega + i\delta) &\approx \text{Re}\Sigma_{k\nu}(\tilde{\epsilon}_{k\nu}) + (\omega - \tilde{\epsilon}_{k\nu}) \frac{\partial \text{Re}\Sigma_{k\nu}}{\partial \omega}(\tilde{\epsilon}_{k\nu}) + \text{Im}\Sigma_{k\nu}(\tilde{\epsilon}_{k\nu} + i\delta) \\ &\equiv \tilde{\epsilon}_{k\nu} - \epsilon_{k\nu} + \left(1 - \frac{1}{\zeta_{k\nu}}\right)(\omega - \tilde{\epsilon}_{k\nu}) - i \frac{1}{\zeta_{k\nu}} \Gamma_{k\nu} \\ \text{mit } 0 < \zeta_{k\nu} &= \frac{1}{1 - \frac{\partial \text{Re}\Sigma_{k\nu}}{\partial \omega}(\tilde{\epsilon}_{k\nu})} \leq 1, \quad \Gamma_{k\nu} = -\zeta_{k\nu} \text{Im}\Sigma_{k\nu}(\tilde{\epsilon}_{k\nu} + i\delta) > 0 \\ \Rightarrow G_{k\nu}(\omega + i\delta) &\approx \frac{\zeta_{k\nu}}{\omega - \tilde{\epsilon}_{k\nu} + i\Gamma_{k\nu}}, \quad \rho_\nu(\underline{k}, \omega) \approx \frac{\zeta_{k\nu}}{\pi} \frac{\Gamma_{k\nu}}{(\omega - \tilde{\epsilon}_{k\nu})^2 + \Gamma_{k\nu}^2}.\end{aligned}\quad (6)$$

In dieser führenden Näherung äußern sich Einteilchenanregungen also durch Lorentz-förmige Resonanzen im Spektrum mit Breiten $\Gamma_{k\nu}$ ($\frac{\hbar}{\Gamma_{k\nu}}$ ist die Lebensdauer) und Gewichten $\zeta_{k\nu}$, die nur im Gültigkeitsbereich einer Fermi-Flüssigkeitsbeschreibung für Energien nahe μ ganzen Quasiteilchen zugeordnet werden können. Im Rahmen der mikroskopischen Fermi-Flüssigkeitstheorie zeigt man, dass die Quasiteilchenlebensdauer für $T \rightarrow 0$ und $|\tilde{\epsilon}_{k\nu} - \mu| \rightarrow 0$ divergiert, genauer:

$$\Gamma_{k\nu} = 0(T^2, (\tilde{\epsilon}_{k\nu} - \mu)^2) \quad \text{für } \underline{k} \rightarrow \text{Fermi-Fläche.} \quad (7)$$

Die ursprünglichen Resonanzen der Ausgangsteilchen können durch Wechselwirkungseffekte stark kaschiert werden, obwohl sie in der Regel Spuren im backflow hinterlassen.

2 Über Modelle und Vielteilchenmethoden

Konventionelle Bandstrukturtheorie orientiert sich am Bild itineranter Elektronen und benutzt z. B. in der LDA Energiefunktionale, die vom Jellium-Modell inspiriert sind. Dagegen sind grundlegende Korrelationsphänomene häufig mit Modell-Hamiltonoperatoren studiert worden, die sich eher an ein lokales, quantenchemisches Bild der Festkörperbausteine anlehnen. In den letzten zwei Jahrzehnten hat dieser lokale Ansatz zum Verständnis der elektronischen Eigenschaften von Übergangsmetallverbindungen entscheidende Beiträge geleistet. In Anwesenheit starker lokaler Korrelationen unter den Elektronen ist bei hohen Anregungsenergien oft die atomare Schalenstruktur prägend, während sich bei tiefen Temperaturen und Anregungsenergien exotische Quasiteilchen und/oder kooperative Phänomene ausbilden. Seit einigen Jahren wird versucht, diesen Modellstudien zunehmend realistischere Züge zu geben, um sie letztlich zu einem weitgehend parameterfreien universellen Werkzeug der Festkörpertheorie zu entwickeln. Hier bietet sich die Perspektive, auch Suszeptibilitäten, Transportkoeffizienten und Spektren für allgemeinere Formen von Anregungen einheitlich aus einem theoretischen Aufbau zu erzeugen, welcher auch den

Vielteilchenaspekten gerecht wird.

Diese Vision beinhaltet mehrere Schritte, die jeder für sich breite Problemkreise der Festkörpertheorie umfassen. Am Anfang steht immer die Auswahl einer Einteilchenbasis zum Aufbau des Fock-Raumes, die die Formulierung eines Modellhamiltonians in Besetzungszahldarstellung gestattet und so die Anwendung guter Vielteilchentechniken ermöglicht. Eine solche Basis muß optimal ausgewählt werden, um z. B. Wechselwirkungsmatrixelemente klein und möglichst lokal zu halten. Alleine bei diesem Schritt schon (und vielleicht nur dort) können Näherungen wie LDA oder Hartree-Fock eine wichtige Rolle spielen, etwa um Abschirmungen und effektive Feldanteile schon in die Ausgangsbeschreibung zu integrieren, so dass Korrelationen den verbleibenden Restwechselwirkungen zuzuschreiben sind. Im Kristall resultieren so Bloch-Zustände mit itinerantem Charakter. Um nun das lokale Bild zu implementieren, das seine Vorzüge dann entfaltet, wenn kurzreichweitige Matrixelemente der Coulomb-Wechselwirkung und eine lokale Schalenstruktur dominieren, sollte man mit geeigneter Phasenwahl in Linearkombinationen der Bloch-Zustände jedes Bandes zu gut lokalisierten Wannierzuständen übergehen. Nur dieser Weg erhält einerseits den lokalen Charakter des Problems und garantiert andererseits die notwendige Orthogonalität der Einteilchenbasis, die z. B. in den kanonischen Antivertauschungsrelationen für Erzeuger $c_{k\nu}^+$ und Vernichter $c_{k\nu}$ von Elektronen in den Basiszuständen zum Ausdruck kommt. Rein atomare Orbitale an benachbarten Zentren im Festkörper sind ja in der Regel nicht orthogonal zueinander. Läßt sich dieser erste Schritt kontrolliert durchführen, verfügt man über einen Modell-Hamiltonian mit bekannten Parametern; der Parametersatz kann zum Zweck praktischer Berechnungen, einer Größenordnungsanalyse folgend, eingeschränkt werden. Dabei können Einsichten über atomare Schalen und molekulare Matrixelemente hilfreich sein, i. P. ist hier Input z. B. aus der Quantenchemie gefragt.

Eine besondere Schwierigkeit bei Problemen mit großen lokalen Beiträgen der Restwechselwirkung liegt in ihrem nichtstörungstheoretischen Charakter. Bei einem Coulomb-Matrixelement wie U von der Größe etwa der fiktiven Bandbreite oder mehr liegt dies auf der Hand. Besonders gefährlich ist aber auch die endliche Zustandsdichte ρ_F im metallischen Zustand um das chemische Potential herum, die evtl. zusammen mit orbitalen oder Spin-Entartungen Infrarot-Divergenzen in Störungsentwicklungen erzeugt. Einfache Beispiele sind Schwellensingularitäten in der Röntgenstreuung oder der Kondo-Effekt. Aber auch die für die Supraleitung wichtige Cooper-Instabilität und die Nichtanalytizität der resultierenden BCS-Übergangstemperatur $T_c \sim \exp[-\frac{1}{g\rho_F}]$ im effektiven Wechselwirkungsparameter g zeugt von diesem Sachverhalt. Eine Störungstheorie läßt sich nun nicht nur auf der Restwechselwirkung, sondern alternativ auch auf den Transfer- oder Hybridisierungsmatrixelementen des Hamiltonians zwischen benachbarten Zentren aufbauen, die in der angesprochenen Situation oft weit schwächer sind als die führenden Coulomb-Matrixelemente. Dabei verliert man allerdings den Vorteil, die von Feynman angegebenen Regeln verwenden zu können, weil der ungestörte Zustand selbst schon nicht mehr im Einteilchenbild beschreibbar ist, vgl. das obige Beispiel der korrelierten s -Schale. Doch auch hierfür stehen nun gut entwickelte Techniken zur Verfügung, die mit Kumulanten-Wechselwirkungen, zeitgeordneten Diagrammen oder mit selbstkonsistenten dynamischen Feldern um effektive Gitterplätze herum arbeiten. Selbst Wilsons Renormierungsgruppe, ursprünglich für das Kondo-Problem einer einzigen magnetischen Störstelle entwickelt, läßt sich in diesem allgemeinen Zusammenhang verwenden. Dabei ist klar, dass man in der Regel in allen Störungsentwicklungen auch dieser Art Klassen von Beiträgen bis in unendliche Ordnung aufzusummieren hat, um die in jeder Ordnung entstehenden Infrarot-Divergenzen effektiv zu eliminieren. Insofern sind diese Techniken echt "nichtstörungstheoretisch"; sie lassen sich aber oft durch endliche Skelettgraphenentwicklungen im Rahmen erhaltender Näherungen formulieren.

Den Grund für das Auftreten von Divergenzen kann man leicht verstehen: Anregungen von Elektronen der Energie ϵ mit Besetzungswahrscheinlichkeit $f(\epsilon)$ aus dem Fermi-See in einen leeren Zustand auf einer lokalen Energieschale mit Übergangsenergie $E_{n+1} - E_n \equiv \Delta E$ infolge von Hybridisierungsprozessen mit Amplitude V bewirken in zweiter Ordnung folgende Korrektur an der Selbstenergie des lokalen Ausgangszustandes:

$$\Sigma_{\text{lok}}(\omega + i\delta) \approx \alpha V^2 \int_{-W}^W d\epsilon \frac{\rho(\epsilon)f(\epsilon)}{\omega + i\delta - \Delta E + \epsilon} \approx \alpha \rho_F V^2 \left[\ln \left| \frac{\omega - \Delta E}{W} \right| - i\pi\theta(\omega - \Delta E) \right]. \quad (8)$$

Hierbei wird $|\omega - \Delta E| \ll W \equiv$ halbe Bandbreite sowie $T \rightarrow 0$ angenommen, und α ist die Entartung des Einteilchenorbitals auf der lokalen Schale. Die logarithmische Divergenzen treten in allen Ordnungen der Störungsentwicklung auf und begründen eine eigene Energieskala $T_K \sim \exp[-\frac{|\Delta E|}{V^2 \rho_F}]$, $\rho_F \approx \frac{1}{W}$, die im Ausgangsproblem zunächst nicht erkennbar ist, aber z. B. in Anregungsspektren eigene Strukturen erzeugt. Diese können stark temperaturabhängig sein und treten in charakteristischen Fällen z. B. als "Abrikosov-Suhl-Resonanz" oder "Bänder Schwerer Fermionen" auf.

Angesichts der zu erwartenden Komplexheit korrelierter Bandstrukturen haben sich Studien über lange Jahre auf Modell-Hamiltonoperatoren konzentriert, in denen Grundtypen von Hybridisierungs- und Wechselwirkungstermen in Verbindung mit einfachen Bandstrukturen und einfachen atomaren Schalenzuständen auftreten. In den letzten Jahren beginnen solche Rechnungen nun realistischer und komplizierter zu werden, und es erweist sich als außerordentlich nützlich für die Einschätzung der Ergebnisse, wichtige Grundphänomene und ihre typischen Parameterabhängigkeiten genau zu kennen. In den 60er bis 80er Jahren wurde viel Arbeit auf das Störstellenmodell von Anderson verwendet,

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{\sigma} \epsilon_f \hat{n}_{\sigma}^f + U \hat{n}_{\uparrow}^f \hat{n}_{\downarrow}^f + \sum_{k,\sigma} \epsilon_k \hat{n}_{k\sigma}^c - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k,\sigma} V_k (\hat{f}_{\sigma}^+ \hat{c}_{k\sigma} + \hat{c}_{k\sigma}^+ \hat{f}_{\sigma}) \\ &= \hat{H}_f^{(0)} + \hat{H}_{\text{Band}} + \hat{H}_{\text{hyb}}^{(0)} \quad \text{mit} \quad \hat{n}_{\sigma}^f = \hat{f}_{\sigma}^+ \hat{f}_{\sigma}, \quad \hat{n}_{k\sigma}^c = \hat{c}_{k\sigma}^+ \hat{c}_{k\sigma}, \end{aligned} \quad (9)$$

weil es unter anderem die Entstehung magnetischer Korrelationen zu studieren gestattet und weil es im energetischen Regime $\epsilon_f < 0 < \epsilon_f + U$ die Kondo-Physik des $s-d$ -Austausch-Modells einbettet; eine formale Abbildung gelingt mit Hilfe der Schrieffer-Wolff-Transformation. In den ersten beiden Termen erkennt man den Hamiltonian für die oben besprochene einzelne s -Schale (o. B. d. A. am Gitterplatz $\underline{R}_0 = 0$, der Index f dient nur zur Unterscheidung), der nächste Term beschreibt ein Band mit nichtwechselwirkenden Zuständen (Index c) und der letzte Term eine Hybridisierung zwischen f - und c -Zuständen mit Amplitude V_k . Die k -Abhängigkeit dieses Hybridisierungs-Matrixelementes bestimmt sich durch die lokale Physik: Erfolgt die Hybridisierung zwischen Zuständen am selben Gitterplatz (das ist oft durch Symmetrie verboten), so kann man $V_k = V$ unabhängig von \underline{k} annehmen. Erfolgt sie zwischen Zuständen an nächsten Nachbarn in einem kubischen Gitter in d Raumdimensionen, so ergibt sich

$$V_{\underline{k}} = -2V \sum_{s=1}^d \cos k_s a \equiv V \cdot \Delta \epsilon_{\underline{k}}, \quad a = \text{Gitterkonstante}. \quad (10)$$

Generell läßt sich auch die Dispersion $\epsilon_{\underline{k}}$ der Bandzustände von einem lokalen Standpunkt aus spezifizieren. In Tight-Binding-Näherung ergibt sich z. B. wieder für das kubische Gitter

$$\epsilon_{\underline{k}} = \epsilon_c + t_c \Delta \epsilon_{\underline{k}}, \quad (11)$$

wobei ϵ_c das dem Band zugeordnete "atomare" Niveau und t_c eine Transferamplitude (auch

eine Form von Hybridisierung) zwischen nächstbenachbarten c -Orbitalen ist. Alle denkbaren Vielteilchenmethoden wurden an diesem Modell ausprobiert. Für die Thermodynamik existiert eine numerisch exakte Lösung (Wilsons Renormierungsgruppe, Nobelpreis 1974) und eine analytisch exakte mit dem Bethe-Ansatz. Insofern dient dieses Modell zur Beurteilung und Eichung auch approximativer Methoden, die auf kompliziertere Modelle mit dem oben erwähnten Typ von Infrarotdivergenzen angewendet werden sollen. Darunter sind die von mir mitentwickelten und bevorzugten analytischen Skelettgraphenentwicklungen nach Transfers und Hybridisierungen, welche die nichtstörungstheoretischen Skalen der Kondophysik richtig wiedergeben und in gut kontrollierter Weise auch dynamische Größen (z. B. Spektren) zu berechnen gestatten. Da in diesem Rahmen der ungestörte Anteil $\hat{H}_f^{(0)} + \hat{H}_{Band}$ schon Wechselwirkungen enthält, kann man dazu keine Feynman-Diagramme verwenden; die Störungsentwicklung besitzt eine von diesem Standard abweichende Form und geschieht mit Hilfe von zeitgeordneten Diagrammen im lokalen Teil.

Von Interesse für eine Diskussion des Bandbildes sind natürlich Hamiltonoperatoren mit Gittertranslationsvarianz. So läßt sich das Störstellenmodell (10) zum Anderson-Gittermodell erweitern, indem man auf jedem Gitterplatz \underline{R}_j eine s -Schale annimmt und mit dem Band hybridisieren läßt:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_j \left(\sum_{\sigma} \epsilon_f \hat{n}_{j\sigma}^f + U \hat{n}_{j\uparrow}^f \hat{n}_{j\downarrow}^f \right) + \sum_{\underline{k}, \sigma} \epsilon_{\underline{k}} \hat{n}_{\underline{k}, \sigma}^c - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\underline{k}, j, \sigma} V_{\underline{k}} \left(e^{i\mathbf{k}\underline{R}_j} \hat{f}_{j\sigma}^+ \hat{c}_{\underline{k}\sigma} + e^{-i\mathbf{k}\underline{R}_j} \hat{c}_{\underline{k}\sigma}^+ \hat{f}_{j\sigma} \right) \\ &= \hat{H}_f + \hat{H}_{Band} + \hat{H}_{hyb}.\end{aligned}\quad (12)$$

Bezüglich $\epsilon_{\underline{k}}$ und $V_{\underline{k}}$ gelten dieselben Bemerkungen wie vorher. Mögliche einfache Erweiterungen betreffen die Schalenstruktur (orbitale Entartungen und Austausch-Wechselwirkungen) sowie echte Wechselwirkungen zwischen f - und c -Zuständen am selben Gitterplatz oder zwischen nächsten Nachbarn. Diese haben in der Literatur Anlaß zu interessanten Studien über Spin- und Ladungsordnungsphänomene gegeben. In erster Linie aber diente das Anderson-Gittermodell zur Analyse des Verhaltens von Compounds mit Übergangsmetall-Ionen, die das Zwischenvaleanzphänomen (homogen kohärenter Grundzustand mit gebrochenezahliger Schalenbesetzung) zeigen oder sehr schmale Bänder von Quasiteilchen (Schwere Fermionen) ausbilden. Insbesondere das zuletzt genannte Phänomen läßt sich als eine Art "kollektiver Kondo-Effekt" verstehen. Für das Gittermodell existiert keine exakte Lösung. Die für das Störstellenmodell (10) erwähnten Methoden lassen sich aber mit guten approximativen Behandlungen der Gitteraspekte kombinieren; dazu folgen unten weitere Erläuterungen.

Gleichung (12) beschreibt nicht das einfachste nichttriviale (= wechselwirkende) Gittermodell. Man kann nämlich die s -Schalen auf benachbarten Gitterplätzen durch Transferterme verbinden und Hybridisierungen mit anderen Zuständen (oder Bändern) abschalten. Man gelangt so zum Hubbard-Modell

$$\hat{H} = \hat{H}_c - t_c \sum_{j, \sigma} \sum_{\ell \text{ n.N. von } j} (\hat{c}_{j\sigma}^+ \hat{c}_{\ell\sigma} + \hat{c}_{\ell\sigma}^+ \hat{c}_{j\sigma}), \quad \hat{H}_c = \hat{H}_f (f \rightarrow c). \quad (13)$$

welches direkt die Bandbildung selbst unter dem Einfluß von Wechselwirkungen zu studieren gestattet. Für ein einfach-kubisches Gitter im nichtwechselwirkenden Fall $U = 0$ erhält man ein einfaches Tight-Binding-Band mit der Dispersion (11). Für wachsendes $U > 0$ werden zunehmend lokale Ladungsfluktuationen unterdrückt, im freien Band dagegen sind z. B. bei Halbfüllung alle vier Kombinationen von $\hat{n}_{j\uparrow}^c = 0, 1$ und $\hat{n}_{j\downarrow}^c = 0, 1$ gleich wahrscheinlich. Das Regime bei großem $U > 2t_c$ nahe Halbfüllung ist von besonderem Interesse, da das Band sich in ein oberes und ein unteres Teilband trennt; die Ausbildung

einer Anregungslücke im halbgefüllten Fall impliziert einen Metall-Isolator-Übergang. In der Nähe des kritischen Wertes U_c der Coulomb-Abstoßung kommt es zu ausgeprägten Korrelationseffekten: Für $U \lesssim U_c$ bilden sich wieder Bänder mit schweren Quasiteilchen aufgrund des unterliegenden kollektiven Kondo-Effektes, für $U > U_c$ bleibt ein nahezu unbewegliches Elektron pro Gitterplatz (das untere Teilband ist gefüllt), und virtuelle Anregungen ins obere Teilband erzeugen effektive antiferromagnetische Austauschwechselwirkungen. Geringe Loch-Konzentrationen in diesem strukturierten Hintergrund-Vakuum können möglicherweise zu Supraleitung führen, was vielleicht für die Klasse der Hoch- T_c -Supraleiter relevant ist. Auch im Anderson-Gitter-Modell läßt sich die Wechselwirkung auf den Schalen abschalten; dann ergibt sich ein freies Hybridisierungsmodell, in dem man eine andere, trivialere Art von Lückenbildung vorliegen hat als die oben erwähnte. Die freien Hybridisierungs- und Tight-Binding-Modelle lassen sich trivial analytisch lösen und ermöglichen die Identifikation "einfacher" Strukturelemente in Anregungsspektren.

Für die Lösung von Gitterproblemen mit Restwechselwirkungen wurde in den 80er und 90er Jahren ein Approximationsschema entwickelt, welches auf der Dominanz lokaler Korrelationen beruht. Zur Beschreibung homogener Zustände teilt man den Kristall in einen "effektiven Gitterplatz" und seine "Umgebung" auf. Der effektive Gitterplatz besitzt die unterliegende Schalenstruktur des Ausgangsproblems inklusive der Wechselwirkungen. Die zur Schale beitragenden Einteilchenorbitale werden durch Hybridisierung mit der Umgebung be- und entvölkert, wobei die von der Umgebung bereitgestellte spektrale Intensität in selbstkonsistenter Weise aus Elektronen aufzubauen ist, die selbst über effektive Gitterplätze propagieren. In einfachen Fällen (wie in den obigen Modellen) wird der effektive Gitterplatz durch den Störstellen-Hamiltonian (9) von Anderson beschrieben, in dem aber die Banddispersion ϵ_k in ihrer lokalen Wirkung am effektiven Gitterplatz (d. h. k -summiert) durch eine effektive energieabhängige Spektralfunktion $\rho_T(\omega)$ zu ersetzen ist. In der Literatur wird ρ_T auch als "dynamisches Feld" bezeichnet, und das ganze Schema "Dynamische Mean-Field-Theorie (DMFT)" genannt. Es muß aber erwähnt werden, dass weder die Idee des DMFT-Ansatzes zur Zeit der Namensprägung neu war (eine Theorie mit effektiven Gitterplätzen und effektiven Spektralfunktionen gibt es seit 1984) noch die genaue Ausprägung der Selbstkonsistenzschleife, die schon seit 1985 als XNCA-Theorie existiert (Kuramoto). Dieses Approximationsschema hat sich einerseits in dem hier skizzierten Rahmen als sehr erfolgreich erwiesen und andererseits auch als "einfach" genug, um praktisch ausgeführt werden zu können. Das liegt daran, dass der Gitterteil des Problems, die Propagation über die Gitterplätze der "Umgebung", mit Random-Walk-Techniken gelöst werden kann und dass andererseits für Lösungen der effektiven Störstelle die erwähnten erprobten Verfahren zu (10) zur Verfügung stehen. Technisch besteht die Näherung darin, dass in der Selbstenergie der Elektronen nur solche Prozesse berücksichtigt werden, bei denen die beiden äußeren Linien am selben Gitterplatz angreifen. Die Verwendung des dynamischen Feldes ρ_T stellt dann sicher, dass die Schale auf die Umbesetzung mit allen möglichen intermediären Anregungsprozessen reagieren kann. Was allerdings verboten bleibt, ist die gegenseitige Beeinflussung solcher Prozesse an anderen Gitterplätzen. Die dadurch hervorgerufenen zusätzlichen nichtlokalen Korrelationen können in Form von nichtlokalen Diagrammen der geschilderten "Lokal Vollständigen Theorie" hinzugefügt werden, die sich mit Hilfe von Kumulanten-Vertizes formulieren lassen.

Die Verbindung der Einteilchendynamik auf dem effektiven Gitterplatz mit der Teilchenpropagation in seiner Umgebung läßt sich in einer überraschend einfachen Weise vollziehen, welche in den 90er Jahren die DMFT für Studien des Hubbard-Modells sehr populär gemacht hat. Von zentraler Bedeutung ist die Konstruktion der Einteilchen-Greensfunktion $G_\sigma(z)$ der auf der korrelierten Schale des effektiven Gitterplatzes residierenden Elektronen als Funktional der effektiven Spektralfunktion $\rho_T(\omega)$, also

$$G_\sigma(z) = G_\sigma[\rho_T; z] \quad , \quad (14)$$

unter Berücksichtigung aller intermediären lokalen Anregungsprozesse. Bei freier Propagation durch das Gitter vermittelt Transfer-Prozessen $t \cdot \Delta \epsilon_{\underline{k}}$ zwischen gleichen effektiven Gitterplätzen würde die in den \underline{k} -Raum transformierte Einteilchen-Greensfunktion des kompletten Systems einfach die Gestalt einer geometrischen Reihe haben:

$$G_{\underline{k}\sigma}(z) \stackrel{?}{=} G_{\sigma}(z) + G_{\sigma}(z)t\Delta\epsilon_{\underline{k}}G_{\sigma}(z) + \dots = [G_{\sigma}(z)^{-1} - t\Delta\epsilon_{\underline{k}}]^{-1} \quad . \quad (15)$$

Da nun aber jeder vom ausgewählten Gitterplatz ausgehende und dorthin wieder zurücklaufende Random-Walk durch das Gitter in Form einer inneren Schleife bereits als intermediäre lokale Anregung in (14) berücksichtigt ist, muß man alle geschlossenen Schleifen aus (15) wieder herauschneiden. Nennt man den Beitrag einer solchen Schleife $T_{\sigma}(z)$ (dies ist selbst eine mit (15) verwandte Greensfunktion), so läßt sich der Schneidevorgang in der geometrischen Reihe (15) durch eine direkte Kompensation vollziehen, so dass der richtige Zusammenhang einfach so lautet:

$$G_{\underline{k}\sigma}(z) \stackrel{!}{=} [G_{\sigma}(z)^{-1} + T_{\sigma}(z) - t\Delta\epsilon_{\underline{k}}]^{-1} \quad . \quad (16)$$

Gleichzeitig ergibt sich die für (14) gebrauchte Spektralfunktion offensichtlich als die zur Greensfunktion T_{σ} gehörige:

$$\rho_T(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} T_{\sigma}(\omega + i\delta) \quad . \quad (17)$$

Nun benötigt man noch einen expliziten Ausdruck für die letzte unbekannte Größe T_{σ} . Man kann T_{σ} auf unterschiedliche Weise wieder auf $G_{\underline{k}\sigma}$ oder G_{σ} zurückführen. Die einfachste davon benutzt die Tatsache, dass die Einteilchen-Greensfunktion $G_{\underline{k}\sigma}$ für Anregungen mit Wellenvektor \underline{k} nach \underline{k} -Summation wieder diejenige für lokale Anregungen auf dem effektiven Gitterplatz geben muß, also G_{σ} . Bei Verwendung von (16) für $G_{\underline{k}\sigma}$ erhält man daraus eine implizite Gleichung für T_{σ} :

$$G_{\sigma}(z) \stackrel{!}{=} \frac{1}{N} \sum_{\underline{k}} G_{\underline{k}\sigma}(z) \stackrel{(16)}{=} \frac{1}{N} \sum_{\underline{k}} [G_{\sigma}(z)^{-1} + T_{\sigma}(z) - t\Delta\epsilon_{\underline{k}}]^{-1} \quad . \quad (18)$$

Mit der Berechnungsvorschrift (14), (16) für $G_{\underline{k}\sigma}$ hat man insgesamt ein in sich geschlossenes Schema erhalten. Meist (und auch bei mir) wird dies in Form eines Iterationsprozesses abgearbeitet: Mit einer bekannten Funktion $\rho_T(\omega)$ (hier gilt es auch, einen geschickten Iterationsanfang zu setzen) führt man die Berechnung (14) aus, danach bildet man $\tilde{G}_{\sigma}(z)^{-1} \equiv G_{\sigma}(z)^{-1} + T_{\sigma}(z)$, führt dann die \underline{k} -Summe in (18) mit dem Transferterm aus mit einem neuen Ergebnis für $G_{\sigma}(z)$ und bildet schließlich über $T_{\sigma}(z) = \tilde{G}_{\sigma}(z)^{-1} - G_{\sigma}(z)^{-1}$ gemäß (17) eine neue Version von $\rho_T(\omega)$. Konvergenz des Verfahrens wird in der Regel erreicht, wenn die Parameterwahl nicht zu pathologisch ist. Die strukturelle Klarheit dieses Schemas läßt sich auch für Hybridisierungsmodelle und für kompliziertere Schalendynamiken beibehalten: Die in den Gleichungen (14) bis (18) auftretenden Größen sind dann als Matrizen zu verstehen. Obwohl auch die darin auftretenden Invertierungen numerisch Probleme aufwerfen können, ist doch die Beherrschung eines guten "Impurity Solvers" für (14) das wesentliche technische Element des Verfahrens.

3 Diskussion von Beispielen

Im folgenden werden eine Reihe von Einteilchen-Anregungsspektren gezeigt und besprochen, welche mit Hilfe eines von mir in den letzten Jahren geschriebenen Programmpakets erstellt wurden. Dieses Paket beruht auf Erfahrungen, die ich in etwa 25 Jahren numerischer Beschäftigung mit den oben skizzierten Problemkreisen gesammelt habe. Es dient auch zum Kontrollvergleich mit den Programmversionen, die meine Mitarbeiter für spezifische Anwendungen schreiben und die für diese Zwecke oft schneller sind. Meine eigene Programmstruktur ist eher auf Flexibilität und vielfache Anwendungsmöglichkeiten ausgelegt als auf spezielle und schnelle Lösungswege. Es beinhaltet Berechnungsmöglichkeiten für mehrerer Modelle mit jeweils mehreren Lösungsmethoden unterschiedlicher Qualität und beruht auf einem Satz von Grundfunktionalitäten für die Darstellung und Verarbeitung komplexer, auch singulärer Funktionen. In vielen Fällen hat sich gezeigt, dass der Vergleich numerischer Ergebnisse aus zwei voneinander unabhängig erstellten Programmstrukturen in diesem Feld sehr nützlich ist. Wichtig scheint mir eine gewisse eigenständige "Intelligenz" der im C++-Programm auftretenden Klassen, die optimale Darstellungen für Funktionen mit stark ausgeprägten, aber nicht gut vorhersagbaren Strukturen selbst finden müssen. Ein Beispiel ist in Abb. (1a) gezeigt. Die darzustellende Funktion ist das Spektrum des Propagators \mathcal{P}_0 , der die Laplace-transformierte Zeitentwicklung eines Anregungsprozesses auf der leeren korrelierten s -Schale beinhaltet, welche mit einem Band von Zuständen hybridisiert. In den Funktionsdarstellungen unten erkennt man links eine scharfe (Röntgenabsorptions-)Kante, mit der das Spektrum einsetzt und die mit intensiven sehr lange andauernden niederenergetischen Umordnungsprozessen im Fermi-See (Elektron-Loch-Anregungen) verknüpft ist. Vor dem Einsetzen der breiteren Hauptresonanz, welche die Wahrscheinlichkeit für eine komplette Entvölkerung der Schale bei der betreffenden Energie bestimmt (hier ist das Vakuum vorwiegend nicht realisiert, sondern der einfach besetzte Schalenzustand), liegt noch ein kleiner Dip, der von einer van-Hove-Singularität im Tight-Binding-Band herrührt. In den oben gezeichneten Abbildungsteilen erkennt man die vom Programm selbst gewählte Stützstellenmenge im Darstellungsintervall $[-15, 15]$ und das Aussehen der Funktion, wenn diese Stützstellen äquidistant lägen. In der Abb. (1b) ist dasselbe für das Anregungsspektrum auf einer einfach gefüllten (Elektron mit Spin σ) s -Schale gezeigt. Hier sind die Verhältnisse noch extremer, da nach der Füllung (Energiegewinn ist die Schwellenenergie $E_g \approx -1.2$) fast ausschließlich die niederenergetische Restrukturierung des Fermi-Sees abläuft. Es ist sehr wichtig, diese Strukturen trotz ungewisser Lage z. B der Schwelle numerisch akkurat zu beschreiben, denn grundsätzlich ergeben sich Greensfunktionen für Einteilchenanregungen (und deren Spektren) aus Beiträgen, in denen Faltungen der Form

$$G_\sigma(z) \sim \oint_C dz' e^{-\beta z'} \mathcal{P}_0(z') \mathcal{P}_{1\sigma}(z+z') + \dots \quad (19)$$

vorkommen. Der Weg C umfährt dabei die komplette Singularitätenstruktur der Propagatoren \mathcal{P}_M im Integranden, die typisch durch algebraische Verzweigungsschnitte auf den jeweiligen reellen Achsen $\text{Im}z' = 0$ und $\text{Im}(z+z') = 0$ geprägt ist.

Selbst noch bei den lokalen (= k -summierten) Zustandsdichten einfacher Tight-Binding-Bänder ist eine gut automatisierte Stützstellenauswahl von großem Vorteil, denn einerseits tragen sie van-Hove-Singularitäten, die besonders in niedriger Raumdimension stark ausgeprägt sind, und andererseits gehen sie mehrfach in allen Rechnungen in die Integralkerne ein; weniger Stützstellen bedeuten hier großen Zeitgewinn. Abb. (2b) oben zeigt die Zustandsdichten für ein einfach-kubisches Gitter in $d = 1, 2, 3$ Raumdimensionen, für $d \rightarrow \infty$ wird der gaussische Grenzfall approximiert. Diesen und weitere Möglichkeiten sieht man in Abb. (2) unten. Für die folgenden Rechnungen wird der Fall $3d-sc$ gewählt. Dieser ist in Abb. (2a) noch einmal mit einer typischen Stützstellenwahl durch das Programm gezeigt. Die unterliegende Bandstruktur erkennt man in der folgenden Abb. (3a). Aufgetragen wird

hier die spektrale Dichte der Einteilchenanregungen über der k - ω -Ebene, wobei man eine Strecke des Wellenvektors \underline{k} innerhalb der kubischen 1. Brillouin-Zone auswählen muß. Dies ist hier in der Regel die vom Mittelpunkt Γ zum Eckpunkt längs der Raumdiagonalen in $[1, 1, 1]$ -Richtung, vgl. Abb. (3a) unten; wie in Abb. (3b) gezeigt, kann man das z. B. zu einer Bandstruktur längs eines geschlossenen Umlaufes komplettieren. Für das zugrunde liegende triviale Tight-Binding-Modell, exakt lösbar mit der Bandstruktur aus Gl. (11), ergibt sich ein Band von δ -Zacken, die für die Darstellung künstlich etwas verbreitert wurden. Die Projektion der Spitzen auf die k - ω -Ebene ergibt gerade die von (11) beschriebenen Kosinus-förmigen Bänder. Die van-Hove-Singularitäten bei $\omega = \pm 1$ und $\omega = \pm 3$ in Abb. (3a) oben ergeben sich aus den flachen Portionen der Bänder in der Mitte und an den Rändern der 1. BZ. In niedrigen Raumdimensionen, vgl. Fig. (2b) oben, führt das noch zu echten Divergenzen.

Auch für das Freie Hybridisierungsmodell Gl. (12) mit $U = 0$ läßt sich die Bandstruktur nach Diagonalisierung leicht ablesen; man erhält zwei Zweige mit den Dispersionen:

$$\epsilon_{\underline{k}}^{(\pm)} = \frac{\epsilon_f + \epsilon_{\underline{k}}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon_f - \epsilon_{\underline{k}}}{2}\right)^2 + V_{\underline{k}}^2} . \quad (20)$$

Lokale Zustandsdichten und Bandstrukturen sind in Abb. (4) und (5) gezeigt. Dabei ist die Gegenüberstellung von Hybridisierung zu nächsten Nachbarn Abb. (4) und lokaler Hybridisierung Abb. (5) recht aufschlussreich: Mit der Wahl $\epsilon_c = 0$ in (11) liegt das Band $\epsilon_{\underline{k}}$ symmetrisch um das lokale Niveau ϵ_f und das chemische Potential, beide bei $\omega = 0$. Für Hybridisierung zu nächsten Nachbarn besitzt $V_{\underline{k}}$ gemäß Gl. (10) dann eine Nullstelle beim Durchgang durch die Fermi-Fläche, d. h. für $V_{\underline{k}} \sim \Delta\epsilon_{\underline{k}} = 0$. Die Hybridisierung wirkt hier also stark im Innern und am Rand der 1. BZ und schwach nahe $\omega = 0$. Dagegen wirkt eine lokale Hybridisierung (infolge fehlender \underline{k} -Abhängigkeit) überall gleich stark. Zweckmäßig ist der Vergleich für Fälle integral gleicher Hybridisierungsintensität, d. h. $\frac{1}{N} \sum_{\underline{k}} (\Delta\epsilon_{\underline{k}} V_{nN})^2 = \frac{1}{N} \sum_{\underline{k}} V_{\text{lokal}}^2 = V_{\text{lokal}}^2$, woraus sich mit der in Abb. (3a) gezeigten Zustandsdichte eine Relation $V_{\text{lokal}} \approx 2.45 V_{nN}$ ergibt. Es ist nun verständlich, warum in Abb. (4) bei $\omega = 0$ keine Hybridisierungslücke auftritt, während für wachsendes ω das lokale Spektrum ρ_{σ}^f zunehmende Dispersion aufweist, also durch die \underline{k} -Abhängigkeit der Hybridisierungsamplitude $V_{\underline{k}}$ geprägt ist. Für den Fall der Abb. (5) sagt Gl. (20) mit konstantem V eine Lücke der Größe $2V$ bei $\omega = 0$ voraus; darüber hinaus zeigt der lokale Anteil der Bandstruktur viel weniger Dispersion dort, wo $\epsilon_f = 0$ und $\epsilon_{\underline{k}}$ sehr verschieden werden. Solche "trivialen" Strukturelemente können in den echt wechselwirkenden Varianten der Modelle großen Einfluss auf die Form möglicher Quasiteilchenbänder nahe $\mu = 0$ haben.

Obwohl das Störstellenproblem (9) nicht global die Bandstruktur des Kristalls beeinflusst, kann die Zustandsdichte $\rho_{\sigma}^f(\omega)$ für lokale Einteilchenanregungen auf der korrelierten Schale doch wertvollen Aufschluss über die Formation von Quasiteilchenbändern in gitterperiodischen Systemen mit stark lokal geprägten Korrelationen zwischen den Elektronen geben. Insbesondere läßt sich im "Kondo-Regime" $\epsilon_f < 0 < \epsilon_f + U$, $|\epsilon_f| \gg \Delta = \pi V^2 \rho_F$ die Entstehung des Kondo-Effektes anhand dieses Anregungsspektrums nachvollziehen. Ursprünglich verstand man unter "Kondo-Effekt" das anomal starke Ansteigen des Restwiderstandes eines metallischen Kristalls zu niedrigen Temperaturen hin infolge der Streuwirkung magnetischer Störstellen. Der magnetische Freiheitsgrad ergibt sich hier aus dem Spin mit Quantenzahl σ des Elektrons auf der vorwiegend einfach besetzten lokalen Schale. Im betrachteten Regime bewirkt die Hybridisierung mit den Bandzuständen eine effektive antiferromagnetische Austauschwechselwirkung $\sim J \underline{S}_f \underline{S}_c = J S_{f_x} S_{c_x} + J(S_{f_y} S_{c_y} + S_{f_z} S_{c_z})$ ($J > 0$), die zur Absättigung des magnetischen Moments auf der Schale durch angelagerte Bandedelektroten (1. Term) und gleichzeitig zu starken Quantenfluktuationen der transversalen Anteile der Spins (2. und 3. Term) führen. Dies geschieht in zunehmendem Maße bei fallender Temperatur, getrieben durch die im vorigen Abschnitt erwähnten Divergenzen, und führt unterhalb der dynamisch erzeugten Kondo-

Skala, d. h. für $T < T_K \approx \sqrt{W} \exp[-\frac{|\epsilon_f|}{V^2 \rho_F}]$, zu einem lokalen Singulett-Zustand. Damit wird auch das weitere Anwachsen der magnetischen Suszeptibilität unterbunden, welche ohne diesen Effekt einem Curie-Gesetz folgen würde. Ihr hoher, bei $T < T_K$ nahezu konstanter Wert läßt sich nach Nozieres als die Pauli-Suszeptibilität einer lokal gebildeten Fermi-Flüssigkeit verstehen. Der Einfang von Bandelektronen in das Singulett wirkt als sehr effektiver Streumechanismus und ist für den starken Anstieg des Widerstandes verantwortlich. Der sich mit dem Effekt ausbildende scharfe Peak in der Zustandsdichte $\rho_\sigma^f(\omega)$ (Breite $\approx k_B T_K$, Höhe $\approx \frac{1}{\pi \Delta}$ mit $\Delta = \pi V^2 \rho_F$ ist durch eine Summenregel festgelegt) nahe der Fermi-Kante läßt sich in diesem Zusammenhang als Streuresonanz deuten; er heißt "Abrikosov-Suhl-Resonanz". Man erkennt ihn in Abb. (6a) in der Mitte der 3-Peak-Struktur. Im Gegensatz zu den nahe $\omega \approx \epsilon_f$ bzw. $\omega \approx \epsilon_f + U$ gelegenen verbreiterten Einteilchenresonanzen der Schale, zeichnet sich die AS-Resonanz durch eine starke Temperaturabhängigkeit auf der Skala T_K aus (hier $\beta_K \equiv 1/k_B T_K \approx 50$), die für die unterliegenden Vielteilchenkorrelationen typisch ist; für $T \gg T_K$ verschwindet sie logarithmisch. In starker Vergrößerung der ω -Achse erkennt man in Abb. (6b) Real- und Imaginärteil der Suszeptibilität der korrelierten Schale. Das starke Anwachsen von $Re\chi(\omega)$ und die Sättigung von $Re\chi(0)$ für $T \ll T_K$ bei einem Vielfachen des Hochtemperaturwertes signalisiert die Formation der magnetisch leicht polarisierbaren lokalen Fermi-Flüssigkeit.

Die Berechnung dieser Effekte bildet einen Prüfstein für die Qualität des hier und auch später bei den Gittermodellen verwendeten "Impurity Solvers". In meiner Gruppe sind dazu analytische Näherungen wie die NCA in verschiedenen Versionen und eine Post-NCA entwickelt worden. Daneben kam Wilsons numerische Renormierungsgruppe zum Einsatz, die in den 90er Jahren für die Berechnung dynamischer Einteilchengrößen erweitert wurde. In meinem Programmpaket läuft augenblicklich eine SNCA (= Simplified-Non-Crossing-Approximation), welche die vier Skelett-Diagramme niedrigster Ordnung für die Selbstenergien der Ionischen Propagatoren \mathcal{P}_M verwendet, sowie eine ENCA (= Enhanced NCA), die zusätzlich vier Skelette mit Vertex-Korrekturen einbezieht. Insbesondere die ENCA liefert sehr brauchbare Ergebnisse, die Grenzen ihrer Genauigkeit sind gut bekannt. Wilsons NRG wurde in meiner Gruppe von F. Anders einsatzfähig gemacht, V. Kaufman hat darüber seine Diplomarbeit geschrieben, und T. Jabben / S. Schmitt sind dabei, diesen "Impurity Solver" als weitere Option in das Programmpaket aufzunehmen. Diese numerischen Verfahren, wie auch die Quanten-Monte-Carlo-Methode, besitzen trotz ihrer prinzipiellen Exaktheit gewisse Nachteile, z. B. erfolgt die analytische Fortsetzung ebenfalls numerisch, und die Qualität bei hohen Temperaturen und Anregungsenergien läßt nach. Abb. (7) vergleicht die SNCA mit der ENCA. Man erkennt, dass die Vertexkorrekturen deutliche Unterschiede produzieren. Sie schließen unendliche Klassen von nachgeordneten Infrarotdivergenzen ein und korrigieren dadurch z. B. den Vorfaktor vor dem Exponential in T_K . Abgesehen von dieser Skalenänderung liefert die SNCA meist schon strukturell richtige Ergebnisse und bleibt so für eine Erstbehandlung komplizierterer Modelle sehr nützlich. Die folgenden Resultate für Gittermodelle basieren jedoch meist auf der ENCA.

Mit dem Hubbard-Modell (13) kommen wir nun zu einem ersten gitterperiodischen System und seiner Bandstruktur. Hartree-Fock-Theorie sollte hier für kleine Werte von U , etwa $U \ll 3d \cdot (2t_c) =$ Breite des Tight-Binding-Bandes bei $U = 0$, nicht allzu schlecht sein ($2t_c$ dient überall als Energie-Einheit); mittels der Zerschlagung $U \hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow} \rightarrow U \langle \hat{n}_{j\uparrow} \rangle \hat{n}_{j\downarrow} + U \langle \hat{n}_{j\downarrow} \rangle \hat{n}_{j\uparrow} = \sum_\sigma U \langle \hat{n}_{j-\sigma} \rangle \hat{n}_{j\sigma}$ läßt sich dabei der Wechselwirkungsterm als Effektives Feld in die Einteilchenenergie absorbieren, $\epsilon_c \rightarrow \tilde{\epsilon}_{c j\sigma} \equiv \epsilon_c + U \langle \hat{n}_{j-\sigma} \rangle = \epsilon_c + \frac{1}{2} U = 0$ im homogenen unmagnetischen Fall bei Halbfüllung, so dass ein einzelnes um $\omega = 0$ zentriertes Tight-Binding-Band entstehen würde. Abb. (8a) erinnert in der Tat an ein solches Band in $[1, 1, 1]$ -Richtung, vgl. Abb. (3a), und zwar sowohl als k -aufgelöste Spektralfunktion (jeweils unten), als auch in der k -summierten lokalen Zustandsdichte. Auffällig ist allerdings schon die erhebliche Breite der Resonanzen in Abb. (8b) unten, die man nicht etwa der hier gewählten hohen Temperatur $k_B T = 1/\beta = 1$ zuschreiben darf. Das zeigt sich im Vergleich

mit Abb. (8b), in der nur die Temperatur erniedrigt wurde, abgesehen davon, dass die Dispersion eines Systems freier (= nicht wechselwirkender) Teilchen temperaturunabhängig wäre und alle Anregungen scharf, vgl. Abb. (3a). Im vorliegenden Fall bleiben die Resonanzen breit, und nahe der Fermi-Kante $k_F = \frac{1}{2}\sqrt{3} \approx 0,85$ (in Einheiten $\frac{\pi}{a}$, a = Gitterkonstante) erscheint ein Bereich neuer und längerlebiger Anregungen. In der \underline{k} -summierten Größe in Abb. (8b) unten erkennt man um $\omega \approx 0$ einen ausgeprägten Peak, der an die Abrikosov-Suhl-Resonanz des Störstellen-Anderson-Modells in Abb. (7a) erinnert. Aufgrund seiner starken Temperaturabhängigkeit kommt hier nur ein Vielteilcheneffekt in Frage, und die Modellstruktur (Transfer zum Nachbarn kann als Hybridisierung der Schale mit der Umgebung angesehen werden) legt tatsächlich eine Deutung als "kollektiver Kondo-Effekt" nahe. In der folgenden Abb. erkennt man eine Sequenz von Bandstrukturen, die durch sukzessive Erhöhung des Matricelementes U bei gleichzeitiger Verringerung der Temperatur entsteht, und zwar wieder für den symmetrischen halbgefüllten Fall $\epsilon = -\frac{1}{2}U$, $\epsilon_c = \mu = 0$. Im Endresultat, Abb. (9b) unten, hat sich deutlich sichtbar ein Quasiteilchenband nahe der Fermi-Kante gebildet, welches mit der Lage der ursprünglichen Einteilchenresonanzen der Schale nicht korrespondiert. Der optische Eindruck suggeriert, dass die Lebensdauer dieser Quasiteilchen bei $k = k_F$ divergiert. Das Quasiteilchenband ist sehr schmal, als Skala kommt ein modifiziertes T_K in Frage.

In Abb. (10a) erkennt man, dass die Wahl der verschiedenen Temperaturen für die Bildsequenz in Abb. (9) für eine Vergleichbarkeit der einzelnen Fälle mit unterschiedlichem U wichtig war: Die Höhe der Vielteilchenresonanz in Abb. (10a) oben fällt ähnlich aus und ebenso die Tiefe des Minimums in der Streurrate $\Gamma_\sigma(\omega) = -\frac{1}{\hbar}\text{Im}\Sigma_\sigma(\omega + i\delta)$, Σ = Selbstenergie nach Gl. (2). Hier kommt ein Skalenverhalten des Korrelationsphänomens zum Ausdruck, relevante Variable ist T/T_K^* mit $T_K^* = T_K^*(U)$. Die Temperatur ist in jedem Fall so niedrig gewählt, dass im Minimum der Streurrate das für den Fermi-Flüssigkeitszustand charakteristische quadratische Verhalten aus Gl. (7) zustande kommt. Dagegen wird in Abb. (10b) unten das Matricelement U bei festgehaltener Temperatur variiert. Man erkennt die Wirkung des Anwachsens der relevanten Variablen T/T_K^* hauptsächlich am allmählichen Verschwinden der Vielteilchenresonanz. Gleichzeitig beginnt sich in der Mitte bei $\omega = 0$ eine Lücke zu öffnen. Für den größten Wert $U = 5.5$ (wie immer in Einheiten $2t_c$) erkennt man dort numerische Schwankungen im Lösungsverfahren. Um dies zu verstehen, werfe man einen Blick zurück auf Abb. (10a). Dort wird ersichtlich, insbesondere beim größten Wert $U = 5$, dass die Ausbildung der Lücke, hier rechts und links neben dem zentralen Peak, mit einer sehr stark anwachsenden Streurrate einhergeht; auf diese extreme Variation im Imaginärteil der Selbstenergie (typisch 2 Größenordnungen und mehr) reagiert mein Lösungsverfahren (noch) sehr empfindlich und bedarf der Verbesserung. Man beachte auch das analoge Verhalten der Selbstenergie im unsymmetrischen Fall, insbesondere Abb. (12a) unten. In Abb. (10b) oben ist das Verhalten des Realteils der Selbstenergie gezeigt. Aus der negativen Steigung bei $\omega = 0$, die für wachsendes U und fallendes T betragsmäßig zunimmt, kann man auf ein entsprechendes Anwachsen der effektiven Masse der Quasiteilchen schließen. Im vorliegenden Fall einer \underline{k} -unabhängigen Selbstenergie kann man nämlich aus Gl. (5) und (6) direkt folgern:

$$\frac{m^*}{m} = 1 - \frac{\partial \text{Re}\Sigma}{\partial \omega}(0) = 1/\zeta_{k_F} \quad \text{an der Fermikante.} \quad (21)$$

Eine komplette Temperaturvariation bei festgehaltenem $U = 5$ zeigt Abb. (11a). Hier wird deutlich, wie sich im Vorfeld der Lückenbildung die Vielteilchenresonanz ausprägt, begleitet von der Ausbildung des Fermi-Flüssigkeitszustandes infolge des Verschwindens der Streurrate um $\omega \approx 0$. Abb. (11b) zeigt die bei der tiefsten Temperatur $k_B T = \beta^{-1} = 1/25 < T_K^*$ formierten Quasiteilchenbänder längs eines kompletten Umlaufs in der 1. Brillouin-Zone. Diese sind mit zunehmender Nähe zur Fermi-Kante bemerkenswert scharf ausgeprägt und weisen auf der kleinen Skala $k_B T_K^*$ ähnliche Dispersionen und Strukturen auf wie das bei $U = 0$ erhaltene Tight-Binding-Band, vgl. Abb. (3b).

Das Phänomen der Lückenbildung bei Vergrößerung der lokalen Coulomb-Abstoßung U im Hubbard-Modell wird allgemein als Realisierung eines sog. "Mott-Hubbard-Überganges" angesehen. Darunter versteht man eine besondere Form von Metall-Isolator-Übergang, die von anwachsenden lokalen Korrelationen begleitet ist. Diese bestehen hier in der zunehmenden Vermeidung von Doppelbesetzungen auf der lokalen Schale sowie, nachgeordnet, in den möglicherweise daraus resultierenden magnetischen Korrelationen. Diese spezielle Form von Lückenbildung muß man sehr wohl vom Auftreten von Hybridisierungslücken unterscheiden, wie sie etwa in Abb. (5) sichtbar wurden. Bei dem einfachen Hybridisierungsmodell unterliegen die Elektronen keinen durch Wechselwirkung erzeugten Korrelationen, und die Bandzustände besitzen unendliche Lebensdauer. Dagegen bildet sich die Lücke beim Mott-Hubbard-Übergang in Energiebereichen, in denen die Lebensdauer der Zustände sehr klein wird, vgl. Abb. (11a) und (12a). Der unsymmetrische Fall in Abb. (12) zeigt auch, dass das ausgeprägte (betragliche) Maximum des Imaginärteils der Selbstenergie wirklich mit der Lückenposition wandert. Eine Betrachtung des unsymmetrischen Falls ist auch lehrreich im Zusammenhang mit der Physik von Hochtemperatur-Supraleitern, weil selbst das einfache Hubbard-Modell (in zwei Raumdimensionen) als Approximation für den Niederenergiebereich der CuO_2 -Ebenen diskutiert wird. Man erkennt in Abb. (12a) oben, dass bei Ablösung des oberen Teilbandes nach Vergrößerung von U eine Vielteilchenresonanz an der Fermi-Kante zurückbleibt. Abb. (12b) unten zeigt, dass in diesem Energiebereich weiterhin ein schmales Quasiteilchenband durch die Fermi-Kante läuft, in dem sich schwere Löcher (die lokale Besetzung ist hier $\lesssim 1$) bewegen können. Dieser Blick auf das Einteilchen-Anregungsspektrum enthüllt allerdings noch nicht weitere Details der Mehrteilchenkorrelationen, die möglicherweise auch für die Ausbildung von Hochtemperatur-Supraleitung ursächlich sein könnten.

Die Abb. (13) dient dazu, sich die Auswirkung bestimmter Näherungen zur Lösung des Hubbard-Modells vor Augen zu führen. Dieses Modell hat eine lange Geschichte, in der unser Verständnis über die Rolle von Korrelationen mitgeprägt wurde, und zwar in komplementärer Weise zur Diskussion etwa über das Jellium-Modell; in letzterem steht ja ganz der itinerante Gesichtspunkt im Vordergrund. In Abb. (13a) sind übereinander zwei einfache gegensätzliche Vorstellungen gezeigt, so wie sie vielleicht in den 60er Jahren bestanden haben. Oben sieht man die schon besprochenen Hartree-Fock-Näherung, die im symmetrischen Fall $\epsilon_c = \mu = 0$ für jeden Wert von U das gleiche Tight-Binding-Band liefert wie für $U = 0$. Darunter sieht man den Bandverlauf, wie er in der sog. "Hubbard I-Näherung" erhalten wird. Diese Näherung läßt sich mit verschiedenen Methoden sehr einfach produzieren, u. A. mit der Bewegungsgleichungsmethode oder mit der Gl. (16), indem man dort für $G_\sigma(z)^{-1} + T_\sigma(z)$ die inverse Greensche Funktion der isolierten s -Schale einsetzt, deren Anregungsspektrum in Gl. (1) angegeben wurde. Die Näherung läßt sich problemlos auf eine größere Klasse von Modellen übertragen und heißt (bei mir) in dem allgemeinen Zusammenhang "Freie Theorie". Sie realisiert folgende sehr einfache Vorstellung: Jedes der beiden in Gl. (1) auftretenden Einteilchenniveaus $\omega = \epsilon$ und $\omega = \epsilon + U$ der Schale verbreitert sich durch Transferprozesse zu den Nachbarn zu einem eigenen partiellen Einteilchenband, wobei das gebrochene spektrale Gewicht $\zeta \approx \frac{1}{2}$ der Niveaus über den k -Verlauf eine gewisse Verteilung erfährt. In Abb. (13b) oben erkennt man die k -summierte Zustandsdichte dieser beiden Näherungen als den breiten Trog in der Mitte bzw. die beiden aufgespaltenen schmaleren Abbilder davon. Dazu erkennt man in der senkrechten Strichen die Positionen der ursprünglichen Einteilchenniveaus der isolierten s -Schale, deren Lage jeweils in der Mitte eines der aufgespaltenen Tröge die Bemerkungen über die Freie Theorie unterstützt. Dazu wird als durchgezogene Linie eine SNCA-Rechnung im Rahmen der "Lokal Vollständigen Näherung" (DMFT) gezeigt, und zwar für eine tiefe Temperatur $T \lesssim T_K^*$. Neben der Vielteilchenresonanz, die für $T \rightarrow 0$ die Höhe des Troges bei $\omega = 0$ erreicht (Summenregel), bemerkt man eine erhebliche Verbreiterung der Bereiche, in denen die Teilbänder angesiedelt waren. Das beruht wesentlich auf der Verbreiterung der Einzel-

resonanzen. In Abb. (13b) unten ist nun noch eine ENCA-LVN-Rechnung hinzugefügt von dem Typ, der den vorangegangenen Abbildungen zugrunde lag. Die Vielteilchenresonanz erscheint aufskaliert, entsprechend einem größeren $T_k^*(\text{ENCA}) > T_k^*(\text{SNCA})$, in Einklang mit den vorherigen Bemerkungen zum Anderson-Störstellen-Modell. Entsprechend führt auch schon eine höhere Temperatur ($k_B T = 0.1$ gegenüber 0.01) zur Sättigung der Vielteilchenresonanz. Eine Rechnung auf der Basis der numerischen Renormierungsgruppe würde nun noch im Wesentlichen den Verlauf der oberen Spitze dieser Resonanz korrigieren.

Zum Abschluss der Diskussion des Hubbard-Modells ist in Abb. (14) noch einmal ein typisches, in ENCA-LVN gerechnetes k -aufgelöstes Einteilchen-Anregungsspektrum gezeigt. Darin sind Linienbreiten, spektrale Gewichte sowie Kurven in der k - ω -Ebene eingezeichnet, die sich aus der Projektion von Maxima in der Funktion $\rho(k, \omega)$ ergeben. Diese Kurven machen auf mich längs der durchgezogenen Teilstücke einen etwas überzeugenderen Eindruck als längs der gestrichelt gezeichneten. Grundsätzlich kann man die mit dem linken Gleichheitszeichen in Gl. (5) erhaltene implizite Beziehung für die Anregungsenergien $\tilde{\epsilon}_{k\sigma}$, die man mit diesen Kurven assoziieren würde, graphisch unter Zugrundelegung von Kurven wie aus Abb. (10b) oben lösen. Fälle mit einer oder drei Lösungen zu festem $\epsilon_{k\sigma}$ erscheinen plausibel; eine Interpretation als Resonanzen ist aber nur sinnvoll, wenn auch der in (5) nicht auftretende Imaginärteil der Selbstenergie genügend klein ist. Mir selbst erscheint nicht klar, mit welcher Art Bandstruktur im herkömmlichen Sinne man ein Bild wie in Abb. (14) assoziieren sollte. Auf dem Blatt unten ist Platz freigelassen für die Entwicklung eigener Vorstellungen des Lesers.

Es ist nützlich, einen Blick auf die Anregungsspektren zu werfen, die man für das Anderson-Gitter-Modell mit Hilfe der Freien Theorie, also der adaptierten Hubbard I-Näherung erhält. Auf diese Weise lassen sich die trivialen Hybridisierungs- und Wechselwirkungseffekte identifizieren. Abb. (15) zeigt den Fall mit Hybridisierung zu nächsten Nachbarn, Abb. (16) den mit lokaler Hybridisierung. Jeweils oben findet sich das Spektrum der Bandelektronen ("c"), unten das der Schalelektronen ("f"), links jeweils in k -summierter Form, rechts nach k aufgelöst mit k längs der Raumdiagonalen der 1. BZ. Im Vergleich mit dem einfachen Hybridisierungsmodell aus Abb. (4) bzw. Abb. (5) ist die Tight-Binding-Bandstruktur durch die Wirkung von U aufgespalten, ähnlich wie auch beim Hubbard-Modell in Freier Theorie. Oberes und unteres Teilband enthalten jedes eine Hybridisierungsstelle. Durch die Verschiebung dieser Stellen von $\omega = 0$ nach $\omega \approx \epsilon_f$ bzw. $\omega \approx \epsilon_f + U$ wirkt sich die Nullstelle von V_k an der Fermikante nicht mehr so aus wie in Abb. (4b). In Abb. (15a) erkennt man nun auch bei Hybridisierung zu nächsten Nachbarn Lücken bei diesen Energien in der lokalen Zustandsdichte und in Abb. (15b) die typischen Bandverläufe, die oft durch den Mechanismus der "Level-Abstoßung" interpretiert werden. Da hier V_k betragsmäßig "nach außen" anwächst, im Gegensatz zu dem konstanten V in Abb. (16), krümmen sich oberes und unteres Teilband sichtlich stärker als im Fall der lokalen Hybridisierung von Abb. (16b). Generell mischen sich beide Typen von Zuständen in den Anregungen, und zwar am stärksten nahe der Hybridisierungspunkte, d. h. dort wo die Tight-Binding-Dispersion $\omega = \epsilon_k$ die Level-Positionen $\omega = \epsilon_f$ und $\epsilon_f + U$ schneidet. Man beachte in den Abbildungen die Peak-Breiten, die hier für den jeweiligen Anteil maßgebend sind, aber in dieser Näherung wie vorher auf einer künstlichen Verbreiterung beruhen und nicht auf physikalischen Lebensdauer-Effekten.

Eine volle ENCA-LVN-Rechnung für beide Fälle, ausgeführt bei gleicher Temperatur $k_B T = 0.2$ zeigen die folgenden Abb. (17) und (18). Hier beobachtet man nun weitere, vorher nicht sichtbare Auswirkungen von Vielteilchenkorrelationen. In Abb. (17b) fallen deutliche und variable Lebensdauer-effekte auf, die ähnlich auch in Abb. (18b) vorhanden sind. Man muß sich hier vor Augen führen, dass das Modell für die c-Elektronen kein eigenes Matrixelement der Restwechselwirkung enthält. Daher entstehen alle Linienbreiten nur durch Vermittlung der Hybridisierung. Typisch beobachtet man daher in den äußersten

Bandbereichen eine Verengung der Resonanzen, die in einem realistischen Modell so nicht erhalten werden würde; in dieser Beziehung sollte dort eher eine Ähnlichkeit zum Band des Hubbard-Modells bestehen. Beim Vergleich der Region $\omega \approx 0$ um die Fermi-Kante wird ein qualitativer Unterschied zwischen Abb. (17) und (18) bemerkt: Mit einer lokalen Hybridisierung bildet sich bereits bei dieser Temperatur eine Vielteilchenresonanz an der Fermi-Kante, siehe Abb. (18a) unten, während die im halbgefüllten Fall dort verschwindende Hybridisierung eine viel kleinere Skala $T_K^* < T = 0.2$ bewirkt und noch zu keinem sichtbaren Effekt in Abb. (17a) unten führt. Vielmehr bleibt die f -Zustandsdichte hier noch auf die Bereiche $\omega \approx \epsilon_f$ und $\omega \approx \epsilon_f + U$ konzentriert, wo sich die nach außen anwachsende Hybridisierungstärke V_k zu nächsten Nachbarn ähnlich auswirkt wie im anderen Fall; man erkennt Hybridisierungslücken in $\rho_\sigma^c(k, \omega)$ sowohl in Abb. (17b) oben als auch in Abb. (18b) oben. Dagegen zeigt nur Abb. (17) eine deutliche Verringerung der Hybridisierungseffekte im Mittelteil um $\omega = 0$. Die bei kleineren Temperaturen auch im Fall von Abb. (17) auftretende Vielteilchenresonanz ist deutlich filigraner als die von Abb. (18) und numerisch schwerer aufzulösen. Daher behandeln die folgenden Beispiele zunächst nur den Fall der lokalen Hybridisierung.

In den Abb. (19) und (20) wird nun die wachsende Auswirkung der Vielteilchenkorrelationen bei sinkender Temperatur für lokale Hybridisierung im Falle halbgefüllter Bänder (d. h. $2\epsilon_f + U = \mu = 0$, 2 Elektronen pro Gitterplatz) verdeutlicht. Zunächst sieht man die k -summierten Spektren in Abb. (19a), und darin das komplementäre Verhalten des c -Anteils oben und des f -Anteils unten. Im letzten baut sich die Vielteilchenresonanz am chemischen Potential $\mu = 0$ auf, während gleichzeitig c -Zustandsdichte aus diesem Bereich verdrängt wird; Abb. (19a) zeigt einen korrespondierenden Einbruch. Dies entspricht dem optischen Eindruck in der k -aufgelösten Bandstruktur von Abb. (18b). Abb. (19b) zeigt die Imaginärteile der Selbstenergien der Greensfunktionen für beide Arten von Elektronen. (Im allgemeinen sind die Selbstenergien im Anderson-Gitter-Modell abhängig vom Wellenvektor, speziell aber ihr Imaginärteil im Fall von lokaler Hybridisierung nicht.) Im unteren Teil bestätigt sich die Vorstellung von der Formation einer Fermi-Flüssigkeit unter maßgeblicher Beteiligung der Schalenzustände, die Streurate bildet ein immer tiefer werdendes Minimum um $\omega = 0$ aus. Die c -Streurrate in Abb. (19b) oben wächst in einem schmalen Bereich bei $\omega \approx 0$ an, was in Einklang mit der geschilderten Lückenbildung dort steht. Die k -aufgelösten Anregungsspektren von Abb. (20) ergänzen diese Befunde zu einem kompletteren Szenario für die Ausbildung von engen Quasiteilchenbändern nahe der Fermi-Kante. Während bei der hohen Temperatur $k_B T = 1$ in Abb. (20a) höchstens ein breiter Untergrund erkannt wird, treten bei $k_B T = 0.04$ scharfe Peaks hervor, die sehr nahe bei $\omega = 0$ eine eigene Struktur von "hybridisierten Quasiteilchenbändern" erzeugen, die auf viel kleinerer Energieskala T_K^* die Strukturen bei $\omega = \epsilon_f$ und $\omega = \epsilon_f + U$ aus Abb. (16b) reproduzieren, und zwar eher noch als die aus Abb. (20a). Das ist im Einklang mit der Vorstellung, dass die Fermi-Flüssigkeit im Niederenergiebereich aus nur noch schwach wechselwirkenden Quasiteilchen besteht, d. h. die Restwechselwirkung ist hier ebenfalls mindestens auf die Skala T_K^* herunterrenormiert und verliert ihre Streuwirkung ganz für $\omega \rightarrow 0$.

Die sehr schmalen Spitzen in Abb. (19a) ganz nahe bei $\omega = 0$ deuten nicht etwa (ausschließlich) Probleme bei der numerischen Auswertung an; vielmehr steht dahinter ein reeller und wichtiger physikalischer Effekt. Bevor dieser Sachverhalt erläutert wird, gestattet Abb. (21a) noch einen Blick auf die Qualität der unterschiedlichen Näherungen für das Anderson-Gitter-Modell. Die Position der beiden Hybridisierungslücken in der Freien Theorie ist klar erkennbar durch die Aufspaltung in drei Teil-Tröge beim c -Spektrum oben, ebenso der Verarmungsbereich an f -Zustandsdichte in der Mitte von Abb. (21a) unten. Bereits die Verwendung der SNCA in der Lokal Vollständigen Näherung liefert i. P. die angesprochenen Vielteilcheneffekte: Endliche Lebensdauern, die z. B. für einen breiten Untergrund sorgen und in den Bereichen $\omega \approx \epsilon_f$, $\omega \approx 0$, $\omega \approx \epsilon_f + U$ für eine Ausschmie-

rung der in der Freien Theorie vorhandenen Lücken, sowie die Vielteilchenresonanz in der k -summierten f -Zustandsdichte unten bzw. die korrespondierende Verarmungszone im c -Spektrum oben. Die Vertexkorrekturen der ENCA-Rechnung sorgen danach im Wesentlichen für eine richtige Adjustierung der dynamischen Energieskala T_K^* . Eine k -aufgelöste Bandstruktur, die man mit Hilfe einer recht präzisen SNCA-Rechnung für sehr kleines $T = 0.005$ erhält, zeigt Abb. (21b). Hier werden insbesondere bei der Vergrößerung des engen Energiebereichs um $\omega = 0$ im Anregungsspektrum der lokalen Schalen rechts außen Feinheiten der Quasiteilchen-Bandstruktur deutlich: Sie besteht für $T \rightarrow 0$ aus zwei energetisch etwas separierten Zweigen, von denen der untere ganz unter dem chemischen Potential $\mu = 0$ liegt (der obere darüber) und bis zum Rande der 1. Brillouin-Zone verläuft. Dies ist ein wichtiges Detail, denn es verdeutlicht die formale Aussage des Luttinger-Theorems und sorgt für eine charakteristische Prägung der physikalischen Tieftemperatureigenschaften des Systems. In dem kohärenten Tieftemperatur-Regime des Modells sorgt diese feine Lücke, die sich gleichermaßen in c - und f -Anteil des Spektrums ausprägt, bei der betrachteten halben Bandfüllung für das mit dem Begriff "Kondo-Isolator" umschriebene Verhalten z. B. von Transportkoeffizienten, ähnlich wie bei einem Halbleiter auf größerer Skala. Bei Abweichungen der Bandfüllung in komplizierteren Compound-Strukturen kann man auch metallisches Verhalten mit drastisch geänderten effektiven Massen finden, welches sich etwa aus der Quasiteilchen-Bandstruktur mit μ im unteren Teilband ableiten läßt; so kann z. B. das Ansteigen des Widerstandes zu niedrigen Temperaturen hin abgelöst werden durch ein quadratisches Verschwinden $R(T) \sim T^2$ ($T \rightarrow 0$) im kohärenten Regime. Im halbgefüllten Fall mit zwei Elektronen pro Gitterplatz sagt das LuttingerTheorem für das hier besprochene Anderson-Gitter voraus, dass der Fermi-Körper genau wie im Fall ohne Restwechselwirkung die gesamte 1. BZ ausfüllen sollte. Dies geht nur, wenn bei $T = 0$ ein ganzes letztes Quasiteilchenband unterhalb der Fermi-Kante liegt und bis zum Zonenrand reicht, gerade so wie man es im halbgefüllten Hybridisierungsmodell ($U = 0$) in Abb. (5b) beim Tight-Binding-Band sieht. Aufspaltungen am Zonenrand findet man in der Regel als Folge von Bragg-Streuung, in diesem einfachen Fall und analog auch im Quasiteilchenband bei $U > 0$. In der Tat deutet sich bei hoher Auflösung in den sehr schmalen Strukturen bei $\omega \approx 0$ für tiefe T die Lückenbildung im Quasiteilchenband an. Eine wirklich sauber konvergente Lösung für diese Feinstruktur konnte bisher nur mit der QMC-Methode und der numerischen Renormierungsgruppe (d. h. in QMC-LVN bzw. NRG-LVN) erzeugt werden.

Zur Abrundung des Gesamtbildes über Einteilchen-Anregungsspektren des Anderson-Gitter-Modells dienen die in Abb. (22) gezeigten Sequenzen mit variierendem U . Die Ausbildung der für die Hybridisierung zu nächsten Nachbarn charakteristischen Verarmungszonen an spektralem f -Gewicht um $\omega = 0$ herum bei wachsendem U zeigt Abb. (22a) im unteren Teil. Darüber sieht man die korrespondierende Zuspitzung der c -Zustandsdichte in diesem Bereich, vgl. auch Abb. (17b) oben. Letztere ist in Abb. (22a) besonders stark zur Mitte hin konzentriert, da die gewählte Hybridisierungsstärke ($V = 0.5$ gegenüber $V = 0.3$ vorher) einen stärkeren Abstoßungseffekt von den Stellen $\omega = \epsilon_f$ und $\omega = \epsilon_f + U$ her verursacht. Bei dieser Sequenz wird die symmetrische Situation $2\epsilon_f + U = \mu = 0$ für Halbfüllung beibehalten, während die inverse Temperatur β mit der Wechselwirkungsstärke U erhöht wird, um eine ausgeprägte Vielteilchenresonanz beizubehalten. Der unsymmetrische Fall mit ϵ_f fest und variierendem U wird exemplarisch in Abb. (22b) dargestellt. Man sieht, dass die Vielteilchenresonanz und damit die Quasiteilchen-Bandstruktur trotz leichter Variationen an der Fermi-Kante gepinnt bleibt und dass die Resonanz zum doppelt besetzten Zustand allmählich aus dem Band herauswandert und dabei schmaler und höher wird. Interessant ist übrigens auch der Grenzfall ϵ_f fest mit $U \rightarrow \infty$, der rechnerisch etwas einfacher zu behandeln ist (der doppelt besetzte Zustand fällt einfach aus dem Hilbertraum heraus), ohne dass sich das Wesen der Vielteilchenkorrelationen und die Strukturen um die Fermi-Kante qualitativ ändern. Mit diesen Anmerkungen soll die Diskussion des Anregungsspektrums einfacher Modelle beendet sein.

4 Über Modellerweiterungen, thermodynamische Größen und Transportkoeffizienten sowie über kollektives Verhalten

Die vorangegangenen Ausführungen haben einen wichtigen Teilaspekt des Systems wechselwirkender Elektronen im Kristall beleuchtet. In vielerlei Hinsicht bleibt das entworfene Bild ergänzungsbedürftig oder zielt gar an entscheidenden Sachverhalten vorbei. Das betrifft natürlich zunächst den eingeschränkten Zustandsraum und die Spezialisierung auf kubische Symmetrie sowie das Fortlassen weiterer Matrixelemente der Restwechselwirkung, kurz alle möglichen Modellerweiterungen zur Beschreibung realistischer Kristalle. Aber auch schon die Beschränkung auf gitterperiodische Systeme (abgesehen von Störstellenmodellen) ist nicht zwangsläufig. Das Einteilchen-Anregungsspektrum und die dahinterstehenden Einteilchen-Greensfunktionen bieten natürlich die Möglichkeit, Erkenntnisse über thermodynamische Größen und Transportkoeffizienten zu gewinnen. Schließlich ist überhaupt die Beschränkung auf die Fermi-Flüssigkeitsphase fragwürdig, denn sowohl reale Compounds mit Übergangsmetall-Ionen als auch die zu ihrer Beschreibung entworfenen vereinfachten Modelle beinhalten viele Möglichkeiten für alternative kollektiv geprägte Phasen, darunter Supraleitung verschiedener Typen, Ladungsordnung, Phasen-Entmischung und verschiedene, auch exotische Arten von Magnetismus, dazu besonderes Verhalten in der Nähe quantenkritischer Punkte oder infolge starker Streuung durch orbitale Freiheitsgrade oder als Konsequenz der ausgeprägteren van-Hove-Singularitäten in reduzierten Raumdimensionen. Schließlich ist auch die Kopplung an elastische Freiheitsgrade zu bedenken, z. B. bezüglich der dadurch hervorgerufenen Beiträge zu einer effektiven Restwechselwirkung, und möglicherweise auch ein Versagen der Abschirmung bei sinkender Konzentration freier Ladungsträger, die eine Ergänzung des lokalen Ansatzes um langreichweitigere Wechselwirkungsanteile nötig machen könnte.

Tatsächlich liegt das Hauptinteresse in meiner Arbeitsgruppe mehr auf den kollektiven Effekten und insbesondere auch technisch auf der Berechnung von Zweiteilchen-Greensfunktionen und von allgemeinen Suszeptibilitäten. Dafür ist allerdings die Kenntnis des Einteilchen-Anregungsspektrums eine Voraussetzung. Im folgenden sollen einige Aktivitäten kurz angesprochen werden. Die Weiterentwicklung des Instrumentariums für analytische und numerische Verfahren umfaßt drei Schwerpunkte: Der Einschluß weiterer Klassen von Prozessen, etwa Ketten von Elektron-Loch-Anregungen, in die Lösung des Teilproblems der effektiven Störstelle soll die analytischen Lösungen auch im Bereich kleinster Anregungsenergien konkurrenzfähig mit der NRG machen. Eine solche "Post-NCA-Strategie" ist von F. Anders in seiner Dissertation (1995) entwickelt und getestet worden, ihr Einsatz bleibt aber bis heute mit zu großem Aufwand verbunden. F. Anders hat auch vor etwa 5 Jahren bei uns mit dem Einsatz von Wilsons NRG begonnen, die andernorts zur Einsatzreife auch für die Berechnung dynamischer Größen gebracht worden war. Die Diplomarbeit von V. Kaufman beschäftigte sich mit ihrer numerischen Implementierung. T. Jabben und S. Schmitt setzen das Projekt fort, um sie als eine der Alternativen im Impurity-Solver-Baustein meines Programmpakets standardmäßig nutzen zu können. Schließlich möchte ich selbst die eigenständige Adaptionfähigkeit meiner grundlegenden Programmbausteine zur Erkennung und optimalen Darstellung stark strukturierter Funktionen auf mehrdimensionale Bereiche ausdehnen, um z. B. den Einschluß von Vertexkorrekturen in die Integralgleichungssysteme und die Berechnung mehrdimensionaler Integrale rechenzeitoptimaler zu gestalten.

Modellerweiterungen und neue physikalische Situationen sind bereits bearbeitet bzw. projiziert worden. So läßt sich das Anderson-Gitter-Modell durch Aufnahme einer (schwächeren) lokalen Coulomb-Abstoßung für Bandedelektroten untereinander zu einem realistischeren "Zweiband-Modell" ausbauen, dessen Lösung i. P. nicht wesentlich mehr

Aufwand erfordert. Sorgfalt erfordert allerdings die Kontrolle, auch interpretatorisch, aller neu hinzukommenden Details in den Anregungsspektren. Eine direkte lokale Restwechselwirkung zwischen Schalen- und Bandelektronen ("Falicov-Term") ist technisch etwas mühevoller zu handhaben, weil sie das System der Integralgleichungen am effektiven Gitterplatz nachhaltiger verkoppelt. Ein solcher Term oder auch die Variante als echte Wechselwirkung zwischen Elektronen auf nächstbenachbarten Gitterplätzen sollte z. B. für Ladungsordnungsphänomene wichtig sein. Natürlich entspricht auch eine einfache s -Schale in der Regel nicht der physikalischen Wirklichkeit, obwohl sie ein effektives Modell für das niedrigste Kramers-Doublett nach Kristallfeldaufspaltung sein kann. Prinzipiell ist es leicht möglich, z. B. die NCA auf kompliziertere Schalen auszudehnen; dies wird z. B. von meinem ersten Doktoranden T. Pruschke (jetzt Professor in Göttingen) und von F. Anders gut beherrscht und ist auch in meinem Programmpaket ansatzweise verwirklicht.

Es existieren auch schon Studien über diesen Modellrahmen hinaus. Dies betrifft z. B. andere Kristallstrukturen als einfach-kubische. S. Schmitt studiert in seiner laufenden Dissertation zentrierte Strukturen. T. Jabben hat in seiner Diplomarbeit (2004) eine Frage aufgegriffen, die insbesondere auch in Zusammenhang mit dem Luttinger-Theorem sehr interessant ist: Bildet sich im halbgefüllten Hubbard-Modell bei Reduzierung der 1. BZ um die Hälfte im Anregungsspektrum an der Fermi-Kante eine Lücke aus, ähnlich wie beim Anderson-Gitter-Modell, d. h. spaltet die Quasiteilchen-Bandstruktur dort auf? Dazu hat er das einfach-kubische Gitter bipartitioniert und jedem der Untergitter eine andere Schalenenergie ϵ_c gegeben. Mit dem Einsatz der NRG als "Impurity Solver" konnte die Aufspaltung in diesem "Ionischen Hubbard-Modell" tatsächlich nachgewiesen werden: E. Jakobi hat sich in seiner Diplomarbeit (2005) an ein recht realistisches Strukturmodell für die CuO_2 -Ebenen herangewagt, die wesentlicher Bestandteil der Hochtemperatur-Supraleiter sind. Hier interagieren die $2p$ -Orbitale an den O-Ionen und die $3d$ -Orbitale an dem Cu-Ionen. Durch sorgfältige Analyse läßt sich der Zustandsraum begrenzen und die in Abschnitt 3 geschilderte Strategie zur Anwendung bringen. Die Ergebnisse enthüllen recht detailreiche Anregungsspektren, die weiterer Analyse bedürfen und sicher durch Informationen über Zweiteilchenkorrelationen ergänzt werden müssen. F. Wissel schließlich hat in seiner Diplomarbeit (2002) eine inhomogene Situation studiert, nämlich einen halbunendlichen Hubbard-Kristall. Hier interessierte der Übergang von einem nahezu zweidimensionalen System an der Oberfläche zu echtem dreidimensionalen "Bulk-Verhalten". Für alle angesprochenen Varianten der kristallinen Ortsraumstruktur wie auch für inhomogene und ungeordnete Systeme ist der in Abschnitt 3 geschilderte "Lokale Ansatz" zur Berechnung von "Bandstrukturen" und anderer Festkörpereigenschaften besonders gut geeignet. Er trennt nämlich die Dynamik lokaler, stark korrelierter Einheiten ("atomare" oder "molekulare" Schalen) von der Propagation durch ein umgebendes Medium. Für die Behandlung jedes der beiden Teilaspekte stehen gute Techniken zur Verfügung. Bei der Propagation sind dies Random-Walk-Verfahren, die auch in räumlich strukturierten oder ungeordneten Systemen (evtl. dort in Mittelung) ausführbar sind.

Einteilchen-Anregungsspektren geben, wie erwähnt, wertvolle aber beileibe nicht vollständige Informationen über die Festkörpereigenschaften. Zu den daraus ableitbaren Größen gehören thermodynamische Eigenschaften wie etwa die spezifische Wärme. Auch alleine schon die effektiven Quasiteilchenmassen können hierüber Aufschlüsse geben, obwohl vor der blinden Anwendung von Formeln, die für nichtwechselwirkende ("freie") Elektronensysteme gelten, ausdrücklich gewarnt sei. Es wurde schon darauf hingewiesen, dass die effektiven Massen direkt aus der Einteilchen-Greensfunktion entnommen werden können. Über die Berechnung genereller thermodynamischer Größen mit Hilfe der direkt von dem Programmpaket zur Verfügung gestellten Greensfunktionen könnte man eine interessante Master-Thesis vergeben. Transportkoeffizienten lassen sich aus Einteilchen-Greensfunktionen im Rahmen der "Stoßzeit-Näherung" aufbauen, bei der die Stoßzeit alleine der im Imaginärteil der Selbstenergie enthaltenen Streurate entnommen wird. Diese Näherung,

Vertexkorrekturen einer Zweiteilchen-Greensfunktion werden vernachlässigt, ist sogar sehr gut für annähernd k -unabhängige Selbstenergien, so wie sie der lokale Ansatz produziert. Schon vor vielen Jahren wurden solche Transportrechnungen in Zusammenarbeit mit Diplomanden und Doktoranden aus Prof. Steglichs Gruppe durchgeführt; manches experimentelle Ergebnis konnte so (meist qualitativ) verstanden werden. Heute könnte man, vor dem Hintergrund verbesserter und automatisierter Verfahren, diese Bemühungen fortsetzen.

Ein Forschungsgegenstand von zentraler Bedeutung in den Systemen mit starken Elektronenkorrelationen ist die Aufklärung kollektiven Verhaltens, in das auch in meiner Gruppe viel Mühe geflossen ist. Dazu müssen Zwei- und Mehrteilchenkorrelationen explizit studiert werden, also höhere Greensfunktionen. Dazu laufen augenblicklich zwei Doktorarbeiten von T. Jabben und S. Schmitt, die natürlich auch auf Studien ihrer Vorgänger (F. Anders, S. Prohaska, J. Brinckmann, B. Welslau) aufbauen. Grundsätzlich werden explizite Mehrteilchenkorrelationen (d. h. solche, die nicht in der quasilokalen Dynamik effektiver Gitterplätze enthalten sind) durch die Wirkung lokaler Kummulanten-Vertizes erzeugt, welche der Abschnitt 3 geschilderten Stufe des Lokalen Ansatzes hinzuzufügen sind. Die Berechnung solcher 2- und 3-Teilchen-Vertizes ist mit den geschilderten Techniken möglich; explizite Formeln habe ich in den 80er und 90er Jahren bereitgestellt. Es gibt eine Reihe von aktuellen, sehr interessanten Problemkreisen, die auf diese Weise angegangen werden können, darunter grundlegende Fragen zu Magnetismus und Supraleitung. Nachdem in den 90er Jahren aber die Supraleitung im Vordergrund stand (Dissertation B. Welslau über SL Schwerer Fermionen, J. Brinckmann über Hochtemperatur-SL), ist dies augenblicklich der Magnetismus. Das Projekt von T. Jabben erstreckt sich z. B. auch auf die Frage, wie genau der Übergang von einer Beschreibung mit stabilen magnetischen Momenten auf den Schalen (Grenzfall sehr großer U) zu einer Bandbeschreibung vonstatten geht. Die angestrebte einheitliche Theorie muß z. B. auch in der Lage sein, das qualitative Umschlagen der magnetischen Suszeptibilität von einem Curie-Verhalten ($\chi \sim \frac{1}{T}$) zu einem Pauli-Verhalten (χ konstant) darzustellen. S. Schmitt verfolgt das ehrgeizige Vorhaben, ein Phasendiagramm für Modelle von der hier skizzierten Art zu berechnen. Dazu studiert er allgemeine Suszeptibilitäten und die in ihnen vorgefundenen Instabilitäten gegenüber der Formation z. B. modulierter magnetischer Phasen. Dazu haben wir zusammengearbeitet, um eine analytische und numerische Lösung von allg. Bethe-Salpeter-Gleichungen mit Kummulanten-Vertizes zu ermöglichen. Man muß sich übrigens vor Augen führen, dass die in Abschnitt 3 präsentierten Rechnungen und Ergebnisse die Abwesenheit kollektiver Ordnung voraussetzen, d. h. (soweit nicht einfach Lücken an der Fermi-Kante entstehen) die Stabilität der Fermi-Flüssigkeits-Phase annehmen. Über die relative Stabilität konkurrierender Phasen kann man Informationen aus der Berechnung eines thermodynamischen Potentials erhalten (Pruschke) oder eben aus der expliziten Suche nach Instabilitäten (Schmitt) und evtl. anschließender Identifikation eines metastabilen Bereiches. Es wird z. B. darüber diskutiert, dass der Metall-Isolator-Übergang im Hubbard-Modell für $d = 3$ bei dem kritischen Wert U_c von U (wo sich oberes und unteres Teilband trennen) ein Zweiphasengebiet $U_{c1} < U_c < U_{c2}$ aufweist, das mit unterschiedlichen residuellen Zustandsdichtestrukturen in der sich öffnenden Lücke verknüpft ist. Diese und viele weitere spannende Fragen harren m. E. der Aufklärung.

5 Anhang: Abbildungen

1-T-ANREGUNGSSPEKTRUM AUS GREENSFUNKTIONEN

$$G_{k\sigma}(z) = \text{FT}_z \left\{ -\langle T_z(\tilde{c}_{k\sigma}^{(0)} z^+) \rangle \right\} \Big|_{i\omega_n \rightarrow z} = [z - \epsilon_{k\sigma} - \Sigma_{k\sigma}(z)]^{-1}, \mu \equiv 0$$

$$S_{k\sigma}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{k\sigma}(\omega + i\delta), \quad S_{\sigma}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\underline{k}} S_{k\sigma}(\omega)$$

FERMI-FLÄCHE: $\tilde{\epsilon}_{k\sigma} = \epsilon_{k\sigma} + \text{Re} \Sigma_{k\sigma}(\tilde{\epsilon}_{k\sigma}) \Rightarrow \underline{k} = \underline{k}_F$ IMPL. GL.

RESONANZEN ? :

$$\Sigma_{k\sigma}(\omega + i\delta) \approx \text{Re} \Sigma_{k\sigma}(\tilde{\epsilon}_{k\sigma}) + (\omega - \tilde{\epsilon}_{k\sigma}) \frac{\partial \text{Re} \Sigma_{k\sigma}(\tilde{\epsilon}_{k\sigma})}{\partial \omega} + \text{Im} \Sigma_{k\sigma}(\tilde{\epsilon}_{k\sigma} + i\delta)$$

$$\rightarrow G_{k\sigma}(\omega) = \frac{S_{k\sigma}}{\omega - \tilde{\epsilon}_{k\sigma} + i\Gamma_{k\sigma}} \quad \text{LINIENBREITE } \Gamma_{k\sigma} \text{ "KLEIN" ?}$$

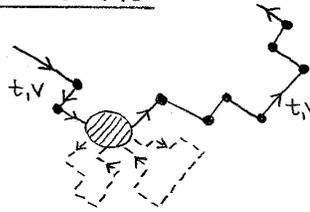
FERMI-FLÜSSIGKEIT: $\Gamma_{k\sigma} \sim T^2, (\tilde{\epsilon}_{k\sigma} - \mu)^2$ FÜR $T \rightarrow 0, \underline{k} \rightarrow \underline{k}_F$

LOKAL VOLLSTÄNDIGE NÄHERUNG - DMFT-ZYKLUS

ZERLEGE PROPAGATION DURCHS GITTER

IN: ① 1-T-ANREGUNGEN AUF "EFFEKTIVEN GITTERPLÄTZEN"

② RANDOM-WALK MIT SELBST-KONSTANTEN LOKALEN PAUSEN



① LOKALE 1-T-GF $G_{\sigma}[\rho_T; z]$ IST FUNKTIONAL VON

$$S_T(\omega) = -\frac{1}{\pi} \sum_{\underline{k}} \text{Im} T_{k\sigma}(\omega + i\delta) \quad \text{"RANDOM-WALK-SPEKTRUM" (DMF)}$$

② RANDOM-WALK Z.B. DURCH PERFEKTES GITTER:

$$G_{k\sigma}(z) = G_{\sigma} + G_{\sigma} t_{\underline{k}} G_{\sigma} + \dots = \left[G_{\sigma}[\rho_T; z]^{-1} - \left(t_{\underline{k}} - \left(\frac{1}{N} \sum_{\underline{k}} T_{k\sigma}(z) \right)^{-1} \right) \right]^{-1}$$

③ SELBSTKONSISTENTE VERKNÜPFUNG:

$$G_{\sigma}[\rho_T; z] = \frac{1}{N} \sum_{\underline{k}} G_{k\sigma}(z)$$

AUSSCHLUS LOKALER SCHLEIFEN (SIND IM EFF. GP. ENHALTEN)

"IMPURITY-SOLVER" FÜR LOKALES VT-PROBLEM $G_{\sigma}[\rho_T; z]$

SEMIANALYTISCH: SNCA, ENCA NUMERISCH: WILSON'S RG, QUANTEN-MC

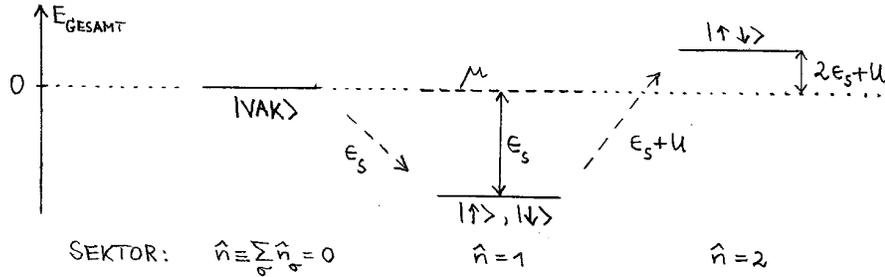
NICHT-STÖRUNGSTHEORETISCH GUT KONTROLLIERT \rightarrow NEUE SKALA T^*

DIE KORRELIERTE s-SCHALE

$$\hat{H}_s = \sum_{\sigma} \epsilon_s \hat{n}_{\sigma} + U \hat{n}_{\uparrow} \hat{n}_{\downarrow}, \quad \hat{n}_{\sigma} = \hat{c}_{\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\sigma}$$

ISOTROPES MAGNETISCHES REGIME: $\langle \hat{n}_{\uparrow} \rangle = \langle \hat{n}_{\downarrow} \rangle = \frac{1}{2}$

FOCK-RAUM:



GRUNDZUSTÄNDE: $|0\rangle = \alpha_{\uparrow} |\uparrow\rangle + \alpha_{\downarrow} |\downarrow\rangle, \quad |\alpha_{\uparrow}|^2 + |\alpha_{\downarrow}|^2 = 1$

BEISPIEL: $\alpha_{\uparrow} = \alpha_{\downarrow} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \hat{G}_x |0\rangle = |0\rangle$ SPIN IN POS. x-RICHTUNG

AUFHEBUNG DES MAGNETISMUS DURCH (THERMODYN.) ERWARTUNGSWERT IM ISOTROPEN REGIME!

BEISPIEL T=0: $\langle \hat{G} \rangle \rightarrow \frac{1}{Z} \sum_{\text{ALLE GRUNDZUSTÄNDE}} \langle 0 | \hat{G} | 0 \rangle = 0$

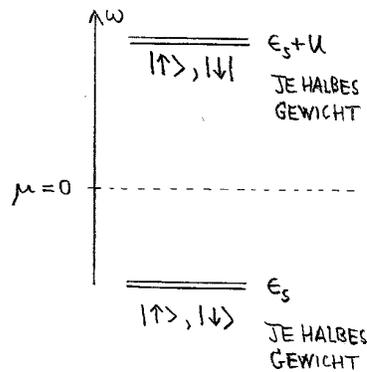
EINTEILCHEN-ANREGUNGSSPEKTRUM:

$$g_{\sigma}(\omega) = \frac{1}{2} \delta(\omega - \epsilon_s) + \frac{1}{2} \delta(\omega - \epsilon_s - U)$$

KEINE KONSISTENTE INTERPRETATIONSMÖGLICHKEIT DURCH 2 FREITEILCHEN MIT SPIN!

KORRELATIONEN (T=0):

$$\langle \hat{n}_{\uparrow} \hat{n}_{\downarrow} \rangle_0 = \langle (1 - \hat{n}_{\uparrow})(1 - \hat{n}_{\downarrow}) \rangle_0 = 0$$

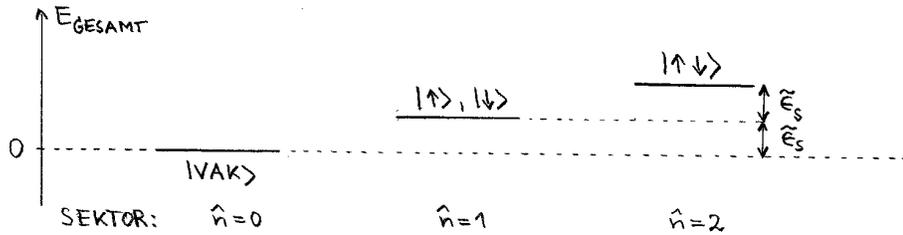


HARTREE-FOCK-THEORIE DER KORRELIERTEN s-SCHALE

"REZEPT": $(\hat{n}_\uparrow - \langle \hat{n}_\uparrow \rangle)(\hat{n}_\downarrow - \langle \hat{n}_\downarrow \rangle) \approx 0 \Rightarrow$

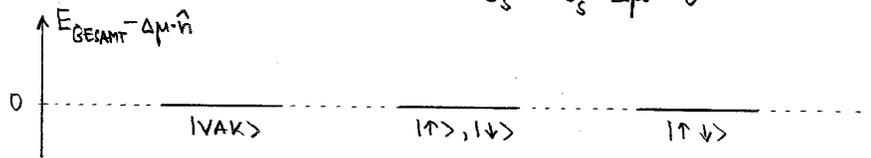
$\hat{H}_s^{HF} = \sum_{\sigma} \tilde{\epsilon}_{s\sigma} \hat{n}_{s\sigma}$, $\tilde{\epsilon}_{s\sigma} = \epsilon_s + U \langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle$, $E = \langle \hat{H}_s^{HF} \rangle - U \langle \hat{n}_\uparrow \rangle \langle \hat{n}_\downarrow \rangle$

ISOTROPES MAGNETISCHES REGIME: $\tilde{\epsilon}_s = \epsilon_s + \frac{1}{2} U$



BEIBEHALTUNG VON $\langle \hat{n} \rangle = 1$ ERZWINGT NACHFÜHRUNG DES CHEMISCHEN POTENTIALS:

$\tilde{\epsilon}_s \rightarrow \tilde{\epsilon}_s - \Delta\mu = 0$



ALLE EINTEILCHEN-ANREGUNGSENERGIEN SIND GLEICH UND NULL!

$\rho_{\sigma}(\omega) = \delta(\omega - (\tilde{\epsilon}_s - \Delta\mu)) = \delta(\omega)$

KEINE KORRELATIONEN VORHANDEN:

$\langle \hat{n}_\uparrow \hat{n}_\downarrow \rangle = \langle \hat{n}_\uparrow \rangle \langle \hat{n}_\downarrow \rangle = \frac{1}{4}$

$\langle \hat{n}_\uparrow \rangle = \langle \hat{n}_\downarrow \rangle = \frac{1}{2}$

$\langle (1 - \hat{n}_\uparrow)(1 - \hat{n}_\downarrow) \rangle = \frac{1}{4}$

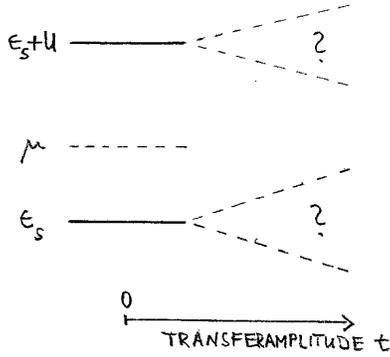
/1

TYPISCH FÜR BANDBILD:
BESETZUNGSSTATISTIK
FÜR TEILCHEN IST
UNABHÄNGIG!

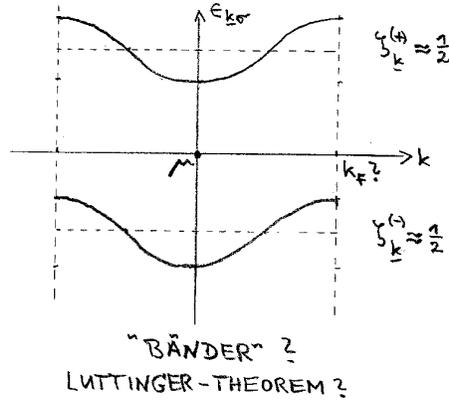
KORRELIERTE s-SCHALEN AUF GITTER & SCHWACHER TRANSFER

Folie 3

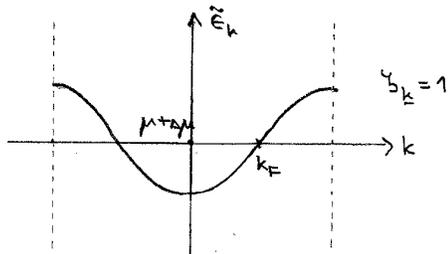
60'ER JAHRE:



HUBBARD-I-NÄHERUNG (1963):



HARTREE-FOCK-THEORIE:



- 1 (SPIN-ENTARTETES) TIGHT-BINDING-BAND
- FREIE BLOCH-ZUSTÄNDE MIT VOLLEM SPEKTRALEM GEWICHT 1
- ABER EXAKT FÜR U=0 !

DICHTEFUNKTIONALTHEORIE (LDA, ...)

$F[\rho_0(\pm); T, \mu] \xrightarrow{\text{MINIMUM}} F(T, \mu)$ EXAKT, FALLS EXAKTES FUNKTIONAL

FALLS $\rho_0(\pm) = \sum_{j \text{ BESETZT}} |\varphi_j(\pm)|^2$ "ϕ-DARSTELLBAR" ⇒ KOHN-SHAM-GLNEN

$T=0$ $E_0 = \sum_{j \text{ BESETZT}, \sigma} \epsilon_{j\sigma} - \Delta E_{WW}$ DARSTELLUNG DURCH 1-T-ENERGIEPARAMETER

$E_1 = \sum_{j \text{ BESETZT}, \sigma} \epsilon'_{j\sigma} - \Delta E'_{WW}$ ANDERE PARAMETER FÜR ANGEST. ZUSTAND

ANREGUNGSENERGIEN: $E_1 - E_0 \neq \sum_{j, \sigma} \epsilon_{j\sigma} \Delta n_{j\sigma}$ WEIL $\epsilon'_{j\sigma} \neq \epsilon_{j\sigma}$ i.A. ALLE j, σ i.A. j, σ

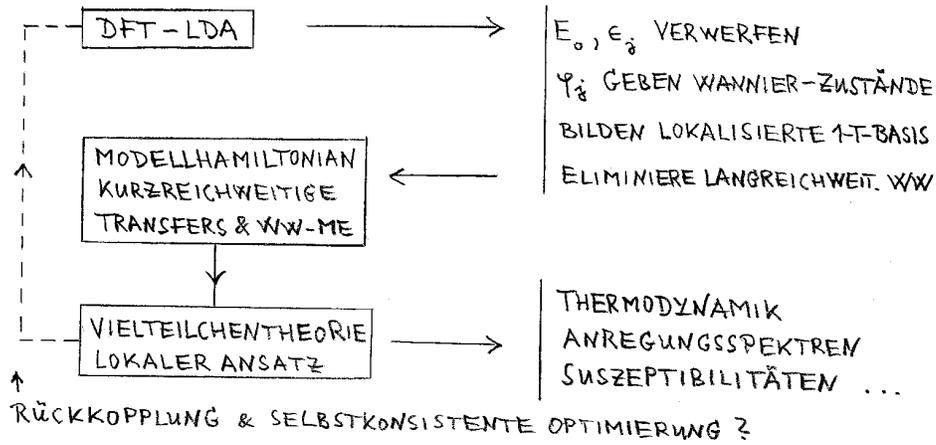
"BANDSTRUKTUR" HÄNGT VOM ZUSTAND AB ! KEIN EINTEILCHENBILD !

SCHWACHE KORRELATIONEN: $\epsilon'_{j\sigma} \approx \epsilon_{j\sigma} \rightarrow$ BANDENERGIEN (KOOPMANSTHEOREM)

STARKE (LOKALE) KORRELATIONEN: ? VORSCHLAG: →

MÖGLICHER AUFBAU EINER "BANDSTRUKTURTHEORIE"

Folie 4



EINFACHE MODELLSITUATIONEN

$$\hat{H} = \sum_{\text{GITTERPLÄTZE } j} \hat{H}_{s_j} - t_c \sum_{j, \sigma} \sum_{\text{N.N. VON } j} (\hat{c}_{j\sigma}^+ \hat{c}_{k\sigma} + \hat{c}_{k\sigma}^+ \hat{c}_{j\sigma})$$

HUBBARD-MODELL: AUSBILDUNG EINES "KORRELIERTEN BANDES"
 $U=0$: TIGHT-BINDING-BAND

$$\hat{H} = \hat{H}_s(c \rightarrow f) + \sum_{k, \sigma} \epsilon_k \hat{n}_{k\sigma} - \frac{1}{N} \sum_{k, \sigma} V_k (\hat{f}_{\sigma}^+ \hat{c}_{k\sigma} + \hat{c}_{k\sigma}^+ \hat{f}_{\sigma})$$

ANDERSON-STÖRSTELLE: KONDO-EFFEKT

$U=0$: VIRTUELLER STREUZUSTAND IM BAND (FRIEDEL'S STÖRSTELLE)

LOKALE HYBRIDISIERUNG: $V_k \equiv V$ k -UNABHÄNGIG

HYB. ZU NÄCHSTEN NACHBARN: $V_k \sim$ TIGHT-BINDING-DISPERSION

$$\hat{H} = \sum_j \hat{H}_{s_j}(c \rightarrow f) + \sum_{k, \sigma} \epsilon_k \hat{n}_{k\sigma} - \frac{1}{N} \sum_{k, \sigma} V_k (e^{ikB_j} \hat{f}_{j\sigma}^+ \hat{c}_{k\sigma} + e^{-ikB_j} \hat{c}_{k\sigma}^+ \hat{f}_{j\sigma})$$

ANDERSON-GITTER-MODELL: "ZWISCHENVALENTE COMPOUNDS"
 "SCHWERE FERMIONEN"

$U=0$: HYBRIDISIERTE BÄNDER

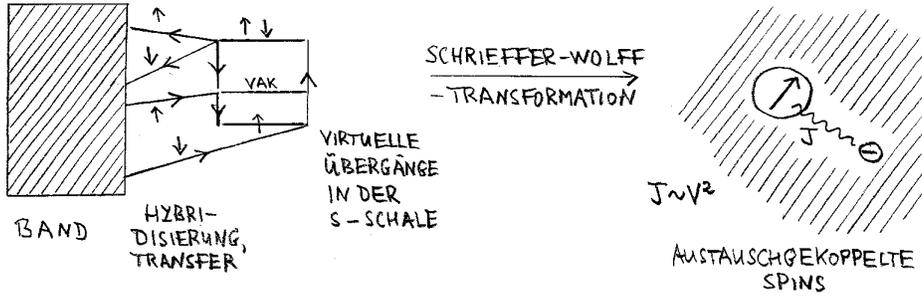
COOBLIN-SCHRIEFFER-MODELL: MEHR SCHALENSTRUKTUR

FALICOV-KIMBALL-MODELL: LADUNGSORDNUNGSPHÄNOMENE

CuO_2 -EBENE: BAUSTEIN IN HOCH- T_c -SUPRALEITERN

KONDO-EFFEKT UND INFRAROTDIVERGENZEN

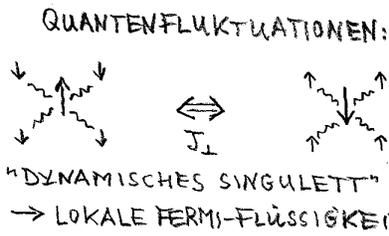
S-SCHALE IM MAGNETISCHEN REGIME HYBRIDISIERT MIT BAND:



s-d-AUSTAUSCHMODELL:

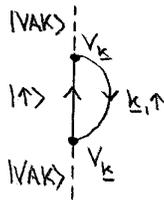
$$\hat{H} = \sum_{k, \sigma} \epsilon_k \hat{n}_{k\sigma} + J_{||} \hat{S}_z^f \hat{S}_z^c(0) + \frac{1}{2} J_{\perp} (\hat{S}_+^f \hat{S}_-^c(0) + \hat{S}_-^f \hat{S}_+^c(0))$$

$J_{||} S_z^f$ ÄUSSERES LOKALES
MAGNETFELD BEI $R=0$ IM
FREIEN BAND. TRIVIAL:
GRUNDZUSTAND: $\hat{S}_z^f(0) = -J_{||} \hat{S}_z^f$
 $J_{||} > 0$: $\uparrow\downarrow$ ODER $\downarrow\uparrow$



ANALOGIE ZUM QUANTEN-ANTIFERROMAGNETEN & NEEL-ZUSTAND

SCHALEN-PROPAGATOREN & TYPISCHE STÖRTERME IM LOKALEN BILD

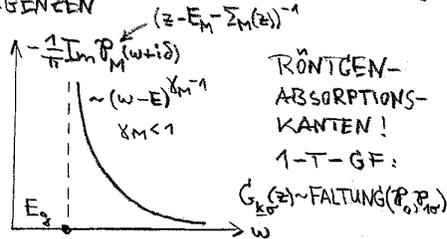


BEITRAG ZUR SELBSTENERGIE DES HÜLLEN-VAKUUMS:

$$\Sigma_0(z) \approx \alpha V^2 \int_{-W}^W d\epsilon \frac{s(\epsilon) f(\epsilon)}{z - (E_1 - E_0) + \epsilon} \approx \alpha \rho_F V^2 \left[\ln \left| \frac{W - (E_1 - E_0)}{W} \right| - i\pi \theta(W - (E_1 - E_0)) \right]$$

LOGARITHMISCHE DIVERGENZEN
IN ALLEN ORDNUNGEN!

PLÖTZLICHE ÄNDERUNGEN DES
HÜLLEN-ZUSTANDES $\epsilon \rightarrow \epsilon + u \rightarrow \dots$
ERZEUGEN LANGDAUERENDE
ELEKTRON-LOCH-KASKADEN →
SCHWELLEN-SINGULARITÄTEN:



PROGRAMMPAKET:

METHODISCHE ERWEITERUNGEN: NRG (ANDERS, KAUFMAN, JABBen, SCHMITT)

MODELL-ERWEITERUNGEN: ZWEIBANDMODELL

IONISCHES HUBBARD-MODELL (JABBen)

CuO_2 -EBENE (JACOBI)

KRISTALL-STRUKTUR: ZENTRIERUNGEN (SCHMITT)

BI-PARTITIONIERUNG (JABBen)

OBERFLÄCHEN (WISSEL)

GENERELL: LOKALER ANSATZ GEEIGNET FÜR UNORDNUNG & INHOMOGENITÄT

PROJEKT (MASTER-THESIS ?): AUTOMATISIERTE BERECHNUNG VON
-THERMODYNAMIK & -TRANSPORTKOEFFIZIENTEN

HAUPTARBEITSGEBIET DER GRUPPE "VIELTEILCHENTHEORIE":

2-TEILCHEN-KORRELATIONEN & KOLLEKTIVES VERHALTEN

SUPRALEITUNG: "SCHWERE FERMIONEN" (WELSLAU)

"HIGH- T_c " (BRINCKMANN)

"ODD-FREQUENCY-PAIRING" (ANDERS)

"MAGNETISCHE SUPRALEITER"

MAGNETISMUS: "MODULIERTE ORDNUNG IN QT-BÄNDERN"

"MAGNETISCHE INSTABILITÄTEN KORREL. ELEKTRONEN"
(PROHASKA, SCHMITT)

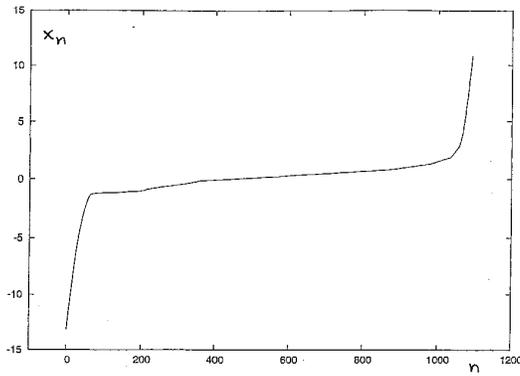
"MAGNETISCHES PHASENDIAGRAMM" (SCHMITT)

"VERSCHMELZUNG DER BILDER: CURIE vs. PAULI" (JABBen)

NICHTLOKALE KORREKTUREN ZUM LOKALEN ANSATZ: "KUMULANTEN"
(JABBen, SCHMITT)

METALL-ISOLATOR-ÜBERGANG: ORDNUNG, METASTABILITÄT, DETAILS

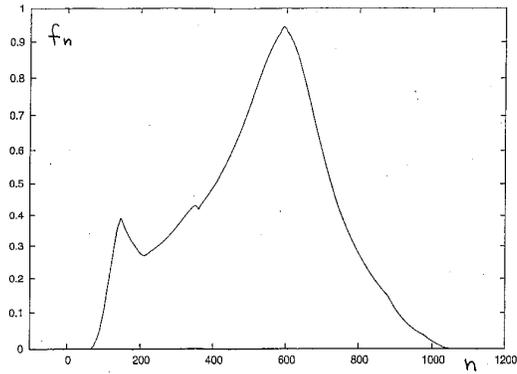
Abb. 1a



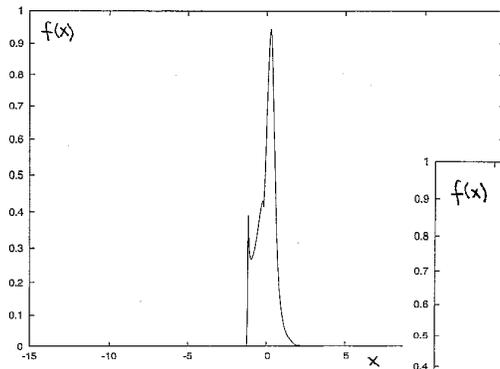
$$f = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \mathcal{P}_0$$

(SIAM: $\epsilon_f = -1.0$, $u = 3.0$
 $\beta = 50$, $3d-5c$)

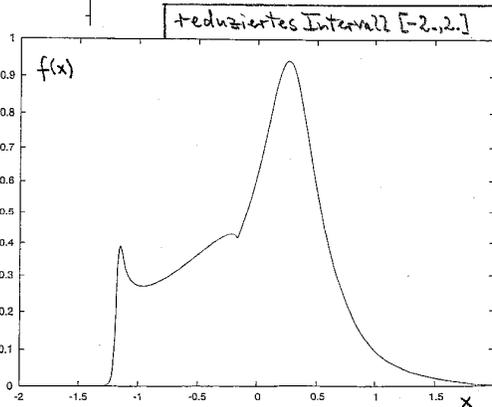
Punkteverteilung im
Intervall $[-13, 11]$



Zugehörige
Funktionswerte

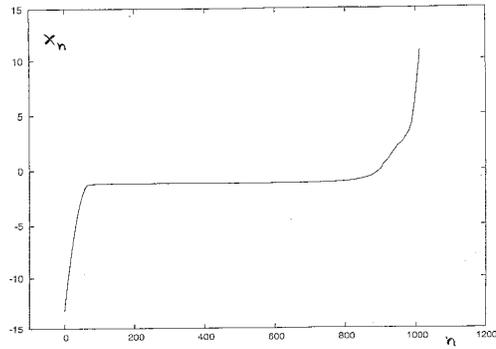


Funktionsdarstellung



reduziertes Intervall $[-2, 2]$

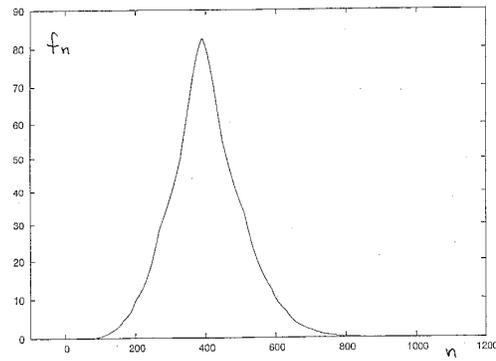
A4.6.10



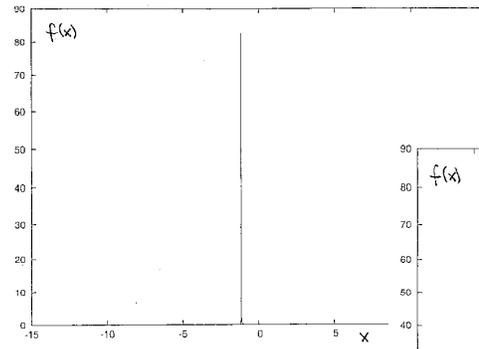
$$f = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \mathcal{P}_{10}$$

(SIAM: $\epsilon_f = -1.0$, $u = 3.0$
 $\beta = 50$, $3d - 5c$)

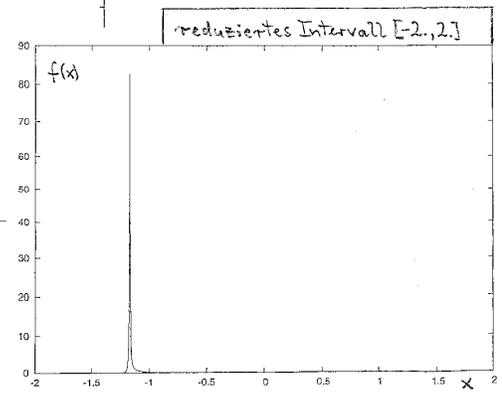
Punktverteilung im
Intervall $[-13, 13]$



Zugehörige
Funktionswerte

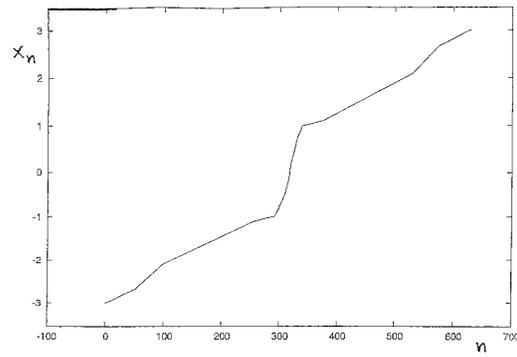


Funktionsdarstellung



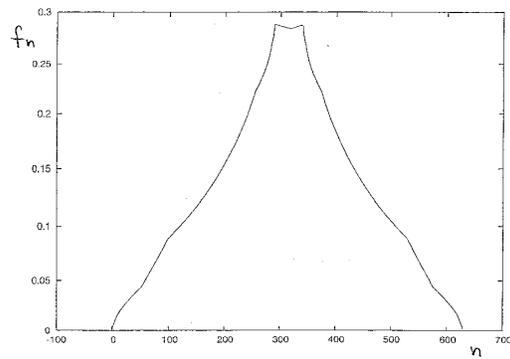
reduziertes Intervall $[-2, 2]$

Abb. 2.10

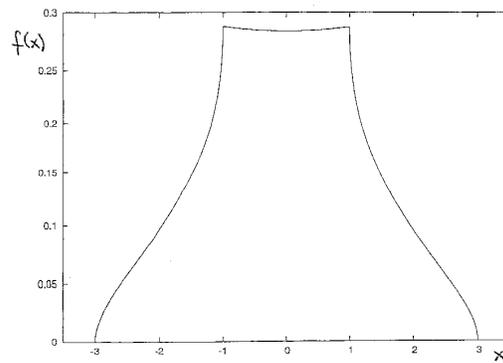


$$f = \int_0^3 d-s_c$$

Punkteverteilung
im Intervall $[-3, 3]$

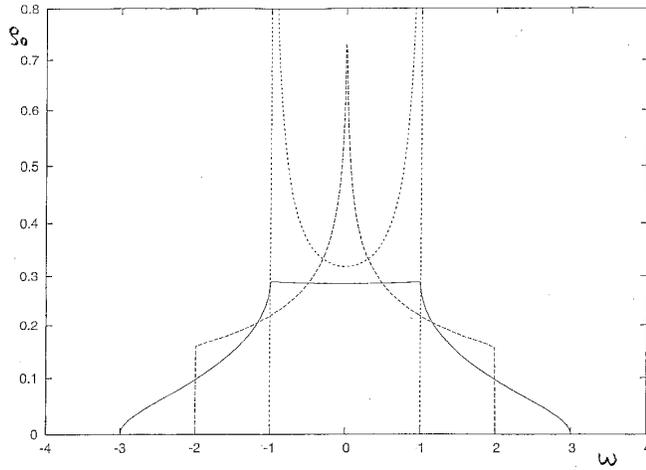


Zugehörige
Funktionswerte

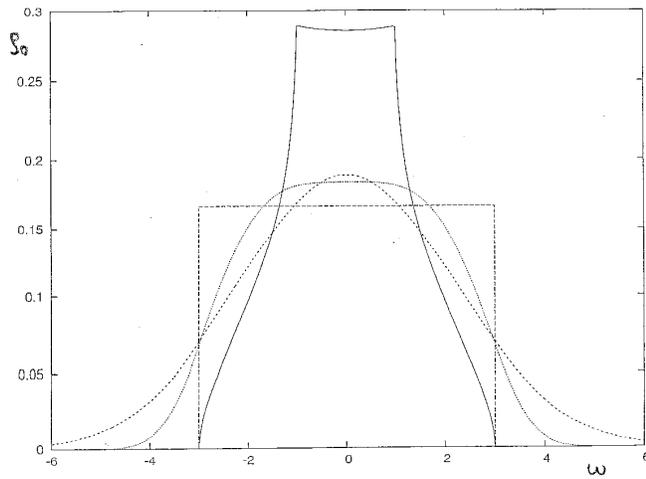


Funktions-
darstellung

Zustandsdichten einfacher Modelle
unkorrelierter Elektronen



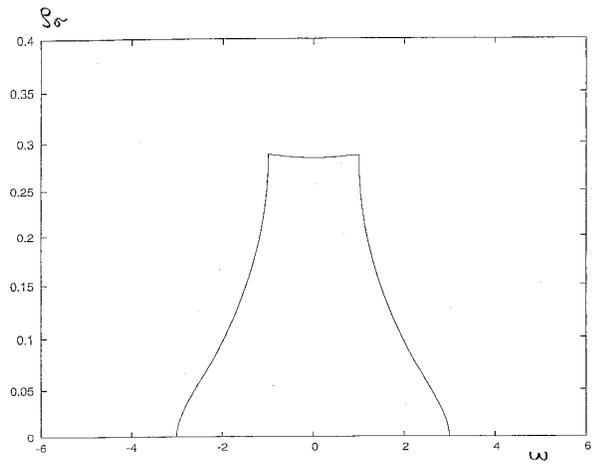
..... 1d-sc
 - - - 2d-sc
 ——— 3d-sc



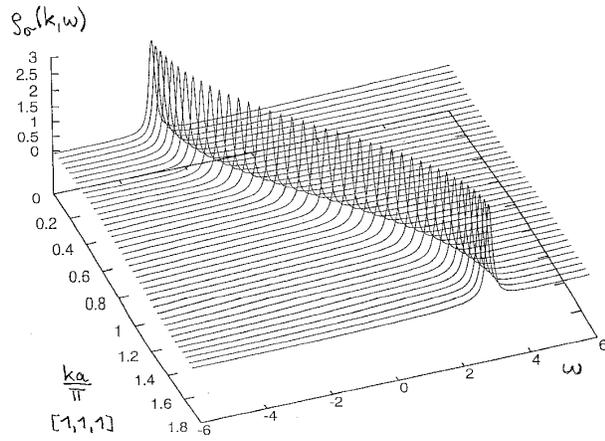
3d-sc
 Kasten
 gaussisch
 quartisch-
 exponentiell
 ($\sim e^{-\alpha|\omega|^4}$)

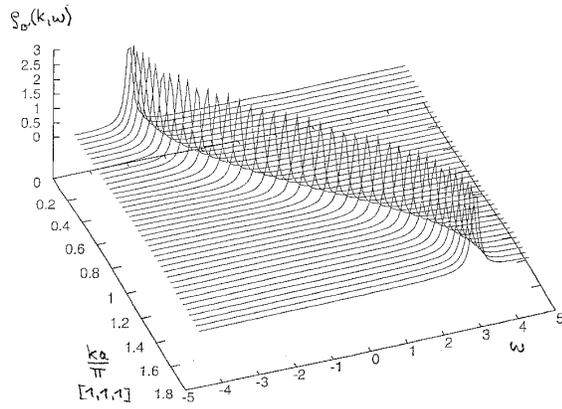
4.1.10

Tight-Binding-Band
im einfach-kubischen (sc) Kristall
 $\mu = 0$ -Halbfüllung, 3d
 $\epsilon = 0$, $2t = 1$



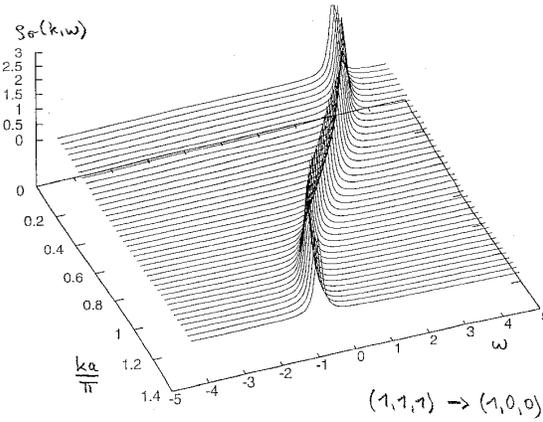
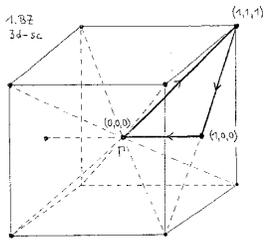
$$\rho_{sc} = \rho_0^{3d-sc}$$



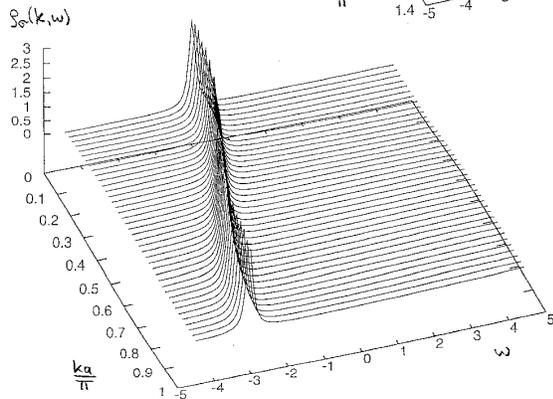


Tight-Binding-Modell
 $E=0$, $2t=1$
 $d=3$, sc

$\Gamma \rightarrow (1,1,1)$

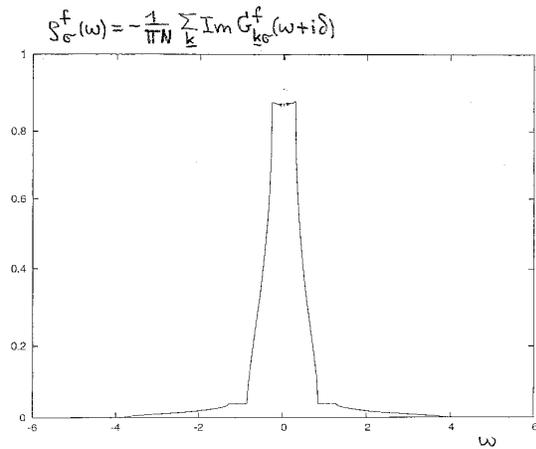
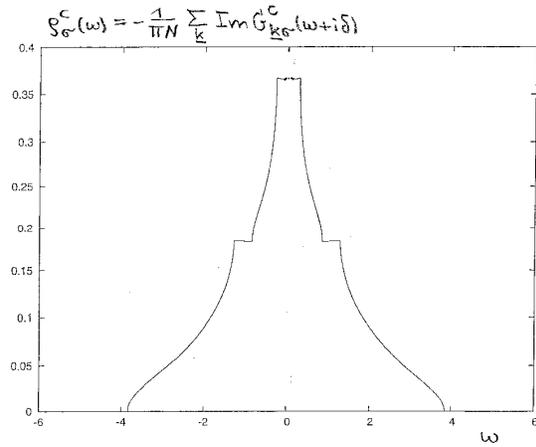


$(1,1,1) \rightarrow (1,0,0)$

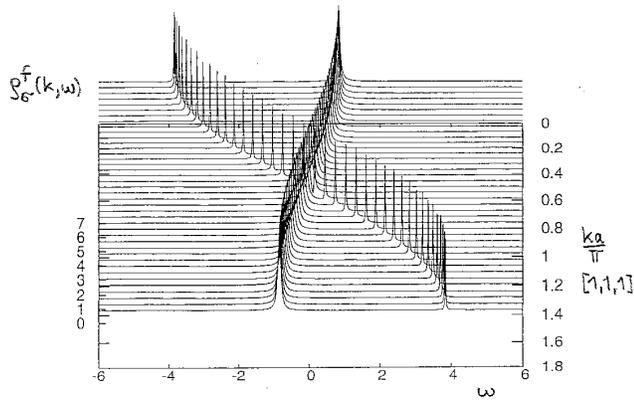
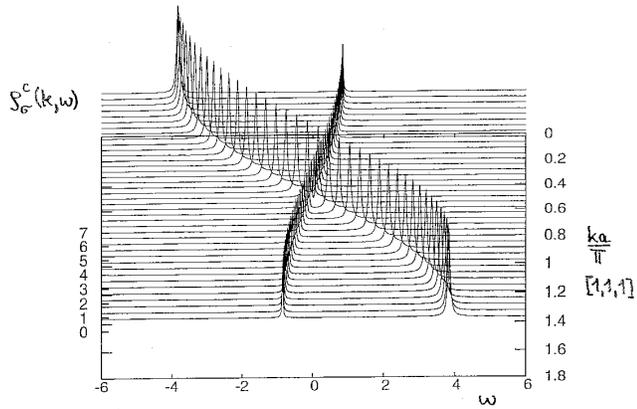


$(1,0,0) \rightarrow \Gamma$

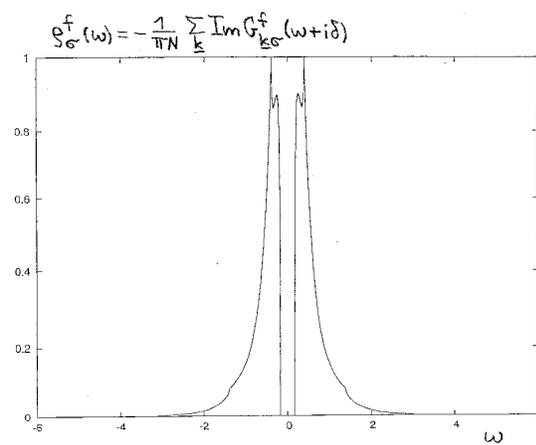
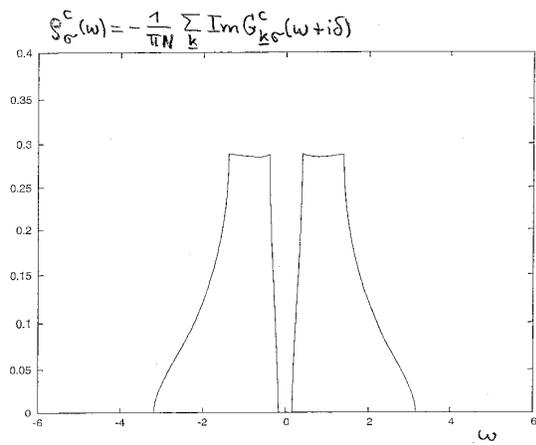
Hybridisierungs-Modell, Hybridisierung zu nächsten Nachbarn
 $3d-sc$, $\epsilon_c = \epsilon_f = 0$, $2t_c = 1$, $t_f = 0$, $V = 0.3$



Hybridisierungs-Modell, Hybridisierung zu nächsten Nachbarn
 Einteilchen-Spektren $S_{\sigma}^{c,f}(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{k\sigma}^{c,f}(\omega + i\delta)$
 mit \underline{k} längs $[1,1,1]$
 $3d-s\sigma$, $\epsilon_c = \epsilon_f = 0$, $2t_c = 1$, $t_f = 0$, $V = 0.3$



Hybridisierungs-Modell, lokale Hybridisierung
 3d-sc, $\epsilon_c = \epsilon_f = 0$, $2t_c = 1$, $t_f = 0$, $V = 0.3 \cdot 2.45$



Hybridisierungs-Modell, lokale Hybridisierung
 Einteilchen-Spektren $S_{\sigma}^{c/f}(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\sigma}^{c/f}(\omega + i\delta)$
 mit k längs $[1,1,1]$
 $3d-s_c, \epsilon_c = \epsilon_f = 0, 2t_c = 1, t_f = 0, V = 0.3 \cdot 2.45$

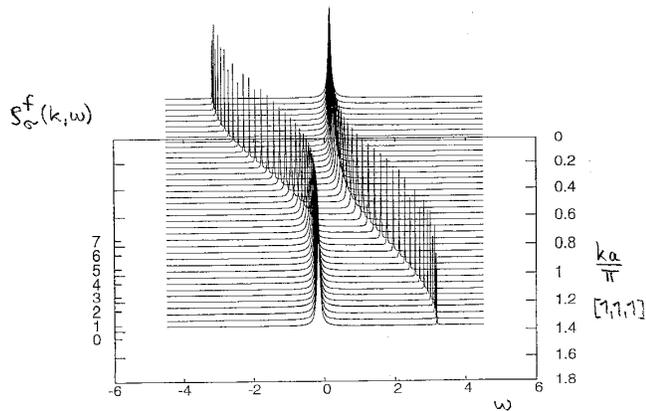
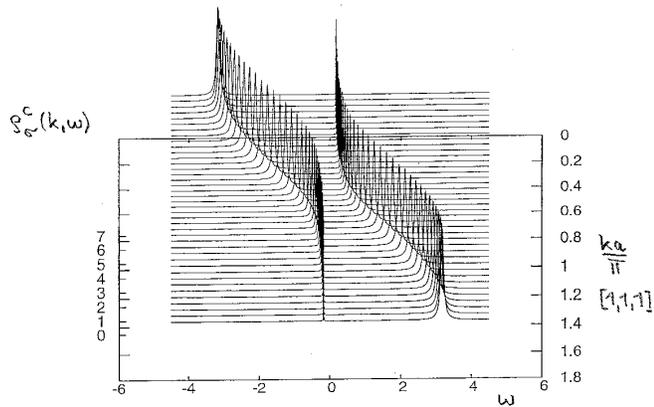
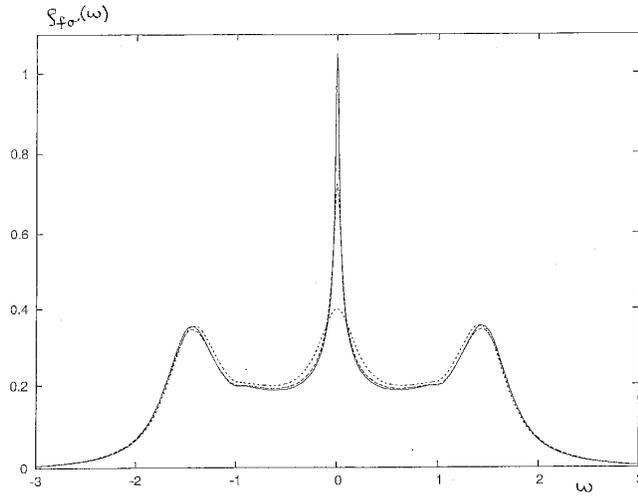


Abb. 12

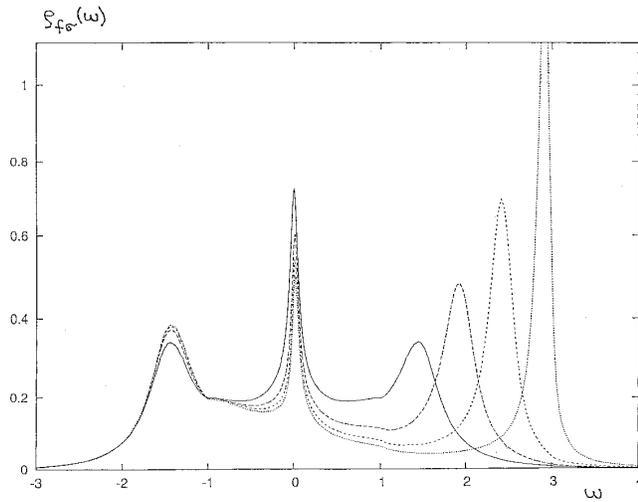
Störstellen-Anderson-Modell (SIAM)
Hybridisierung zu nächsten Nachbarn



$\epsilon_f = -1.0$
 $U = 2.0$
 $\beta = 150.$
50.
10.

3d-sc-Gitter, $\Delta = \pi V^2 g_{\text{cos}}(0) = 0.3$
Tight-Binding-Band, $2t=1, \mu=0.$

ENCA

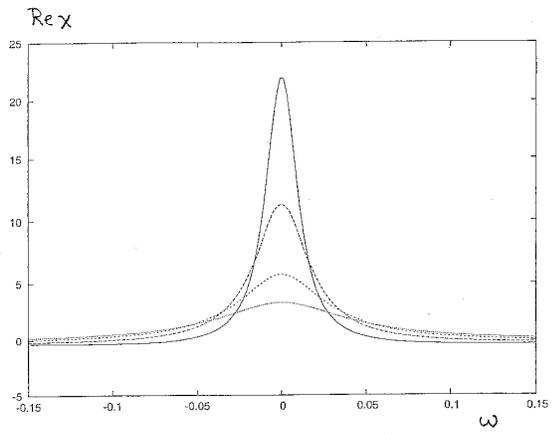


$\epsilon_f = -1.0$
 $\beta = 50.$
 $U = 2.0$
2.5
3.0
3.5

1/16/05

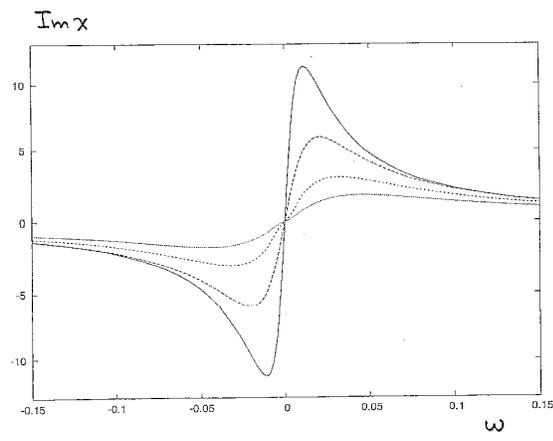
Störstellen-Anderson-Modell (SIAM)
Hybridisierung zu nächsten Nachbarn
3d-sc-Gitter, $\Delta \equiv \pi V^2 g_{sc}(0) = 0.3$
Tight-Binding-Band, $2t=1$, $\mu=0$.

Magnetische Suszeptibilität



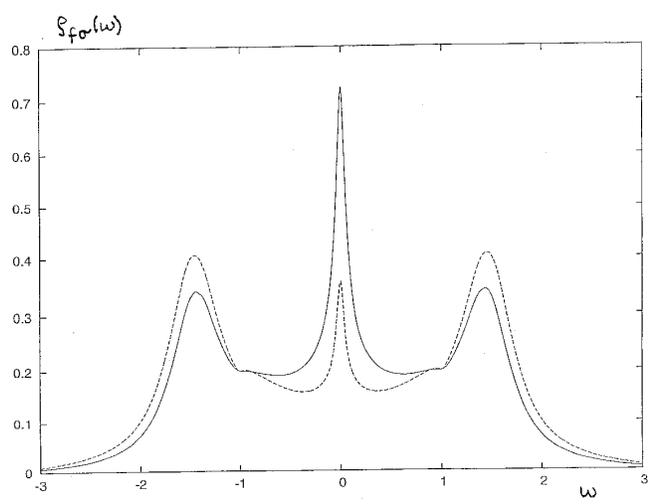
$\epsilon_f = -1.0$
 $U = 2.0$
 $\beta = 150.$
50.
20.
10.

ENCA

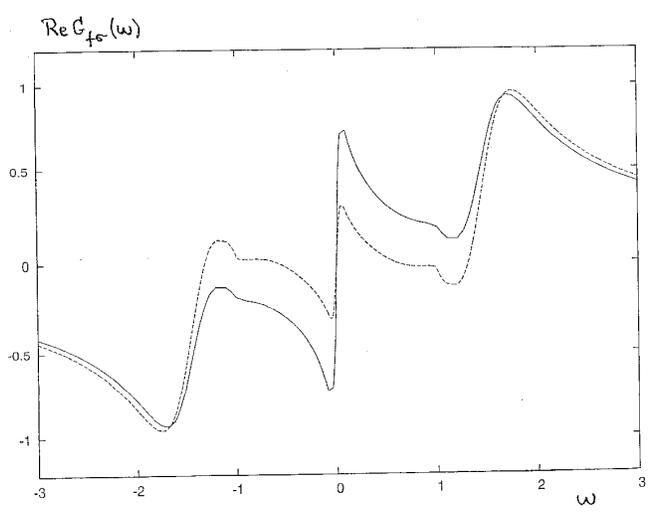


Störstellen-Anderson-Modell (SIAM)
 Hybridisierung zu nächsten Nachbarn
 3d-sc-Gitter, $\Delta \equiv \text{Tr} V^2 g_{cc}(0) = 0.3$
 Tight-Binding-Band, $2t = 1, \mu = 0$.

Abb. 2.1

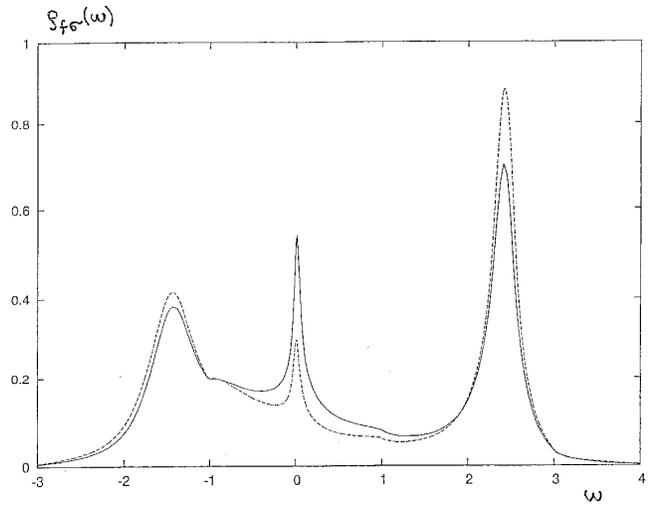


$E_f = -1.0$
 $U = 2.0$
 $\beta = 50.$
 — ENCA
 --- SNCA

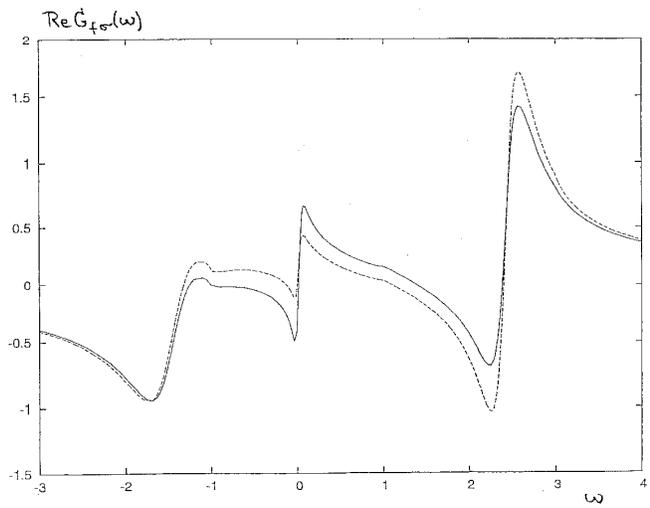


24.31

Störstellen-Anderson-Modell (SIAM)
Hybridisierung \equiv u nächsten Nachbarn
3d-sc-Gitter, $\Delta \equiv \pi V^2 g_{c0}(0) = 0.3$
Tight-Binding-Band, $2t = 1, \mu = 0$.



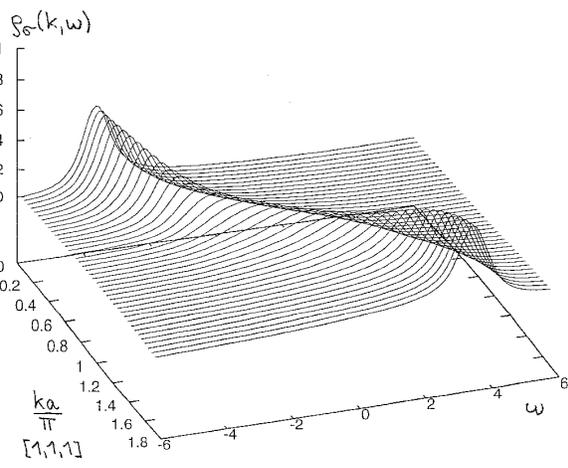
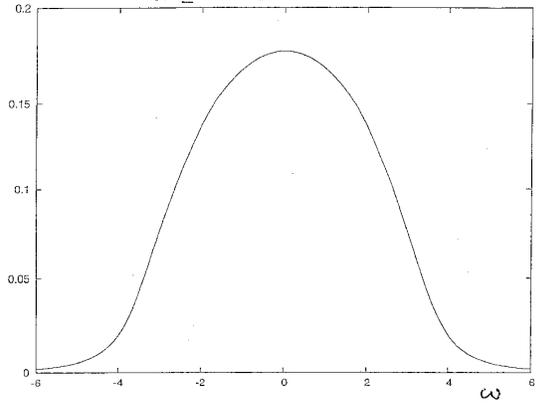
$E_f = -1.0$
 $U = 3.0$
 $\beta = 50$
— ENCA
--- SNCA



ENCA-LVN

Hubbard-Modell: Einteilchen-Spektrum
3d-sc, $\mu=0$ - Halbfüllung
 $\epsilon = -1.5$, $U=3.0$, $\beta=1$, $2t=1$ ENCA-LVN

$$\rho_0(\omega) = -\frac{1}{\pi N} \sum_{\mathbf{k}} \text{Im} G_{\mathbf{k}\sigma}(\omega + i\delta)$$



Hubbard-Modell: Einteilchen-Spektrum
 3d-sc, $\mu=0$. - Halbfüllung
 $\epsilon = -1.5$, $U=3.0$, $\beta=5$, $2t=1$ ENCA-LYN

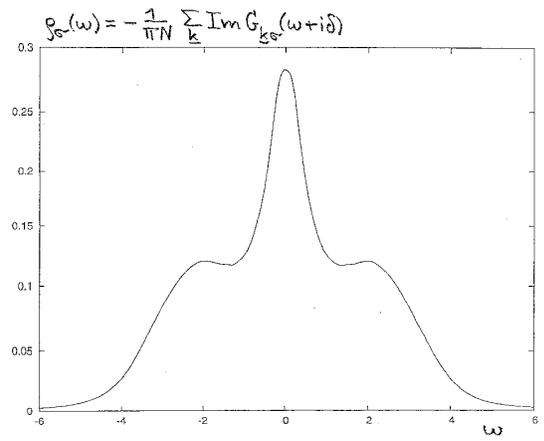
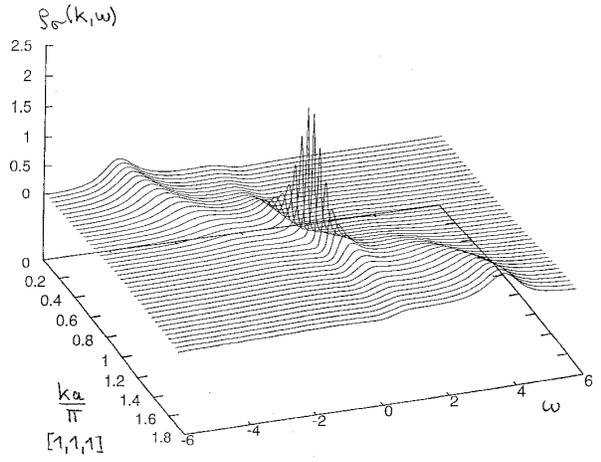
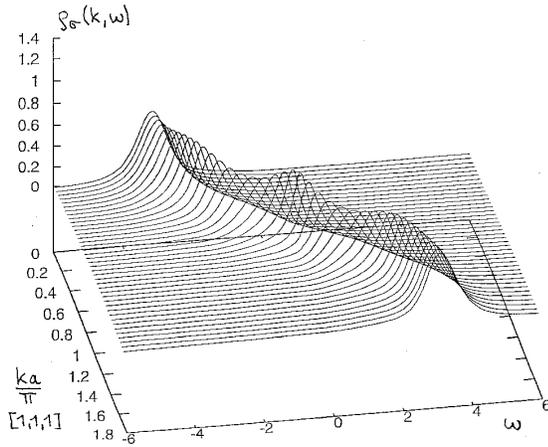
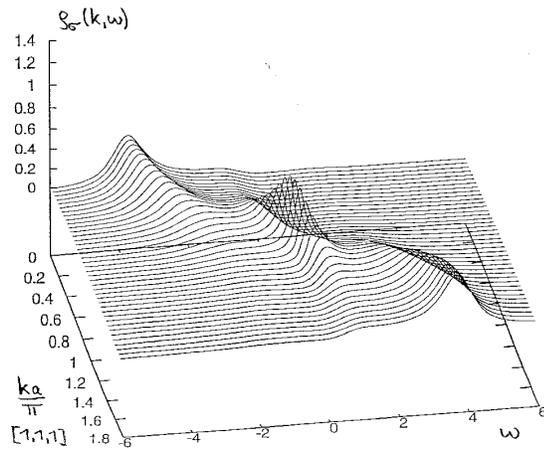


Abb. 10

Hubbard-Modell, ENCA-LVN
Einteilchen-Spektrum $S_0(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{k\sigma}(\omega + i\delta)$
mit k längs $[1,1,1]$
3d-sc, $\mu = 0$ -Halbfüllung, $2t = 1$
Symmetrischer Fall: $2e + u = 0$

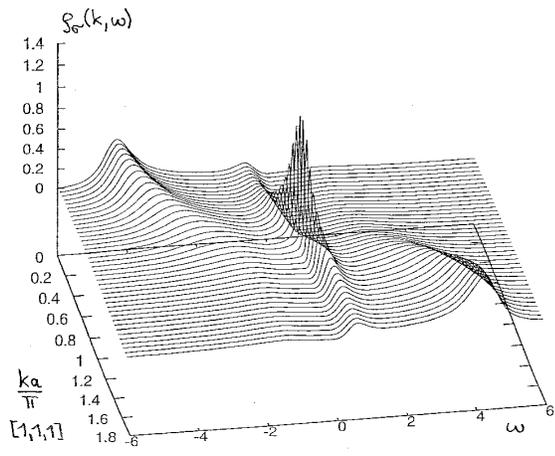


$U = 2.0$
 $\beta = 1$

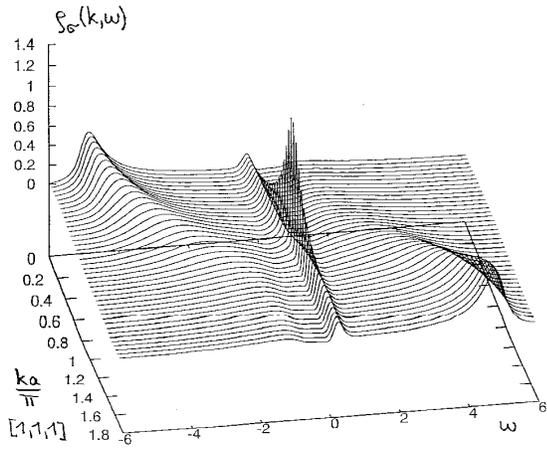


$U = 3.0$
 $\beta = 3$

Hubbard-Modell, ENCA-LVN
 Einteilchen-Spektrum $S_0(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{k_0}(\omega + i\delta)$
 mit k längs $[1,1,1]$
 3d-sc, $\mu = 0$ - Halbfüllung, $2t = 1$
 Symmetrischer Fall: $2\epsilon + U = 0$



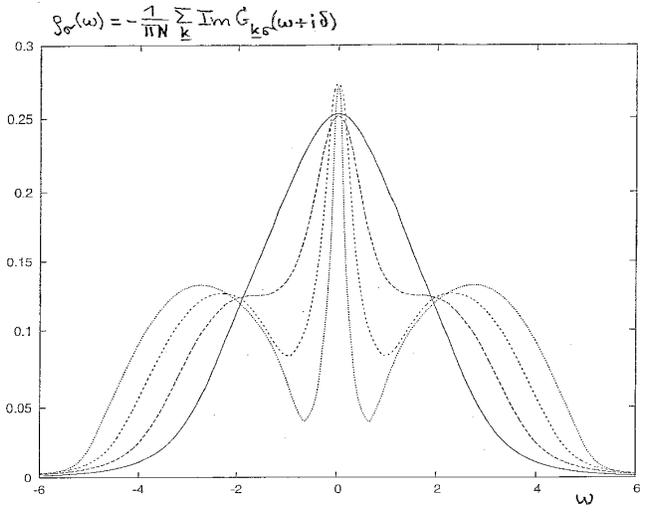
$U = 4.0$
 $\beta = 10.$



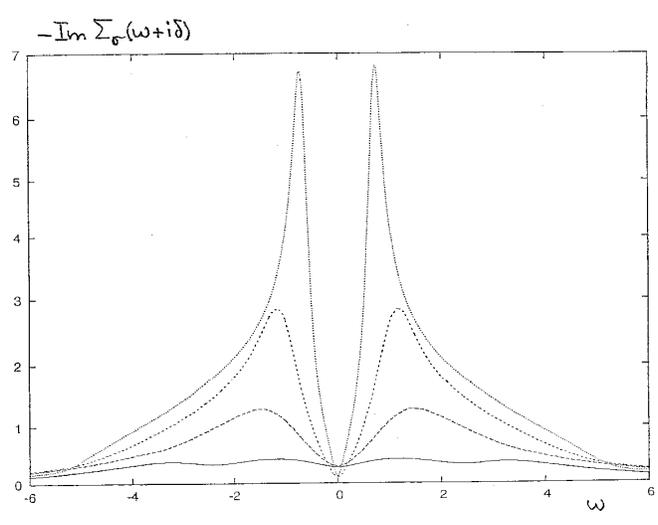
$U = 5.0$
 $\beta = 25.$

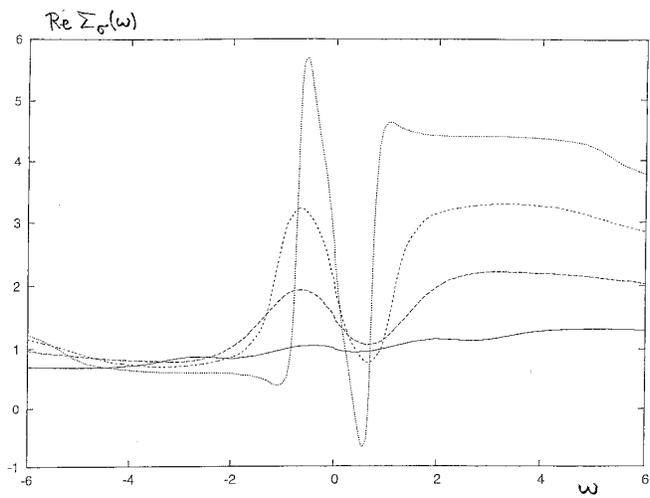
Hubbard-Modell, ENCA-LVN
 3d-sc, $\mu=0$ - Halbfüllung
 $U=-2\epsilon$, $2t=1$

Abb. 11

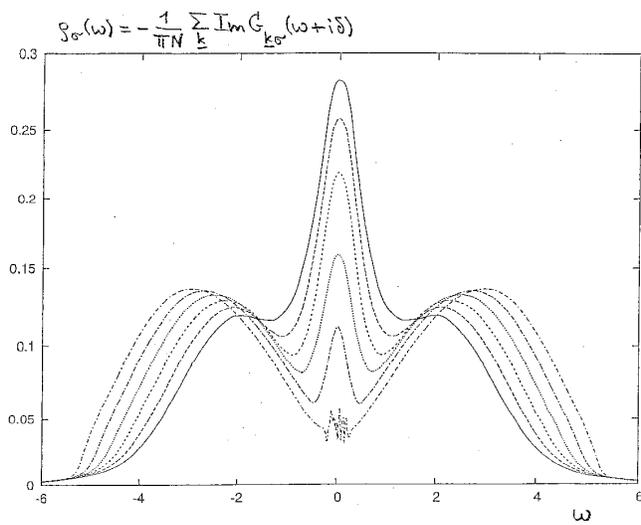


$U=2.0$	$\beta=1.$
3.0	3.
4.0	10.
5.0	25.





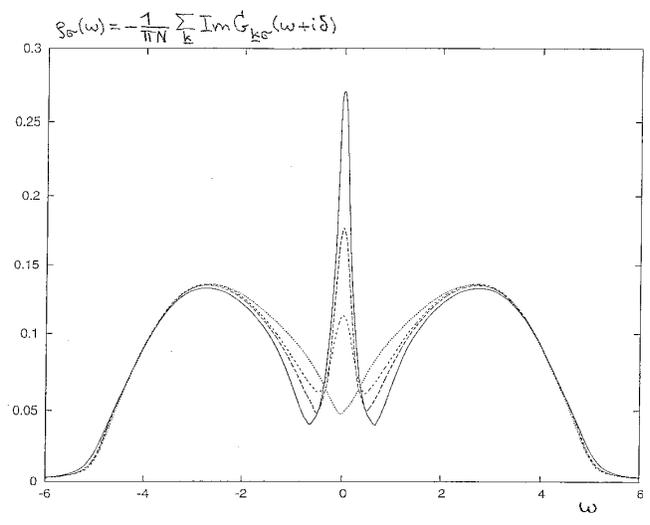
Hubbard-Modell, ENCA-LVN
 3d-sc, $\mu=0$. - Halb-füllung, $2t=1$
 $U=-2e$, $\beta=5$.



$U = 3.0$
 3.5
 4.0
 4.5
 5.0
 5.5

Hubbard-Modell, ENCA-LVN
 3d-sc, $\mu=0$. - Halbfüllung, $2t=1$
 $\epsilon=-2.5$, $u=5.0$

Abb. 11



$\beta = 25.$
 10.
 5.
 2.

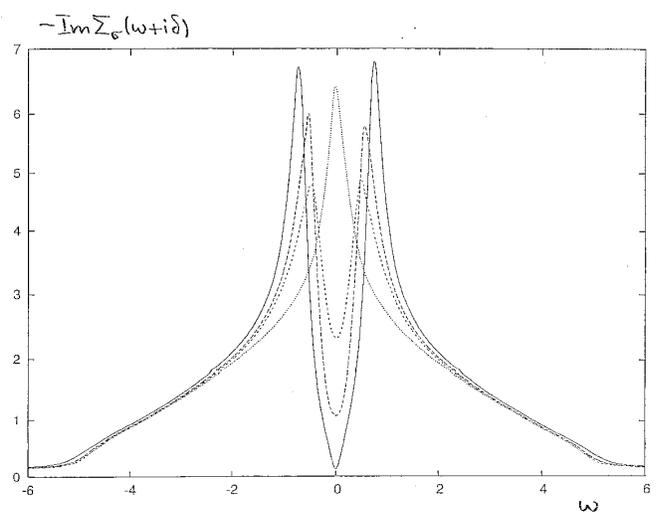
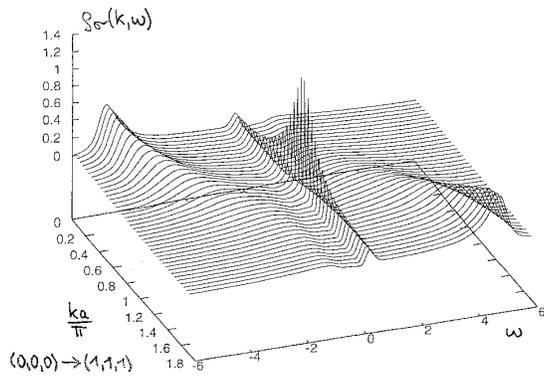
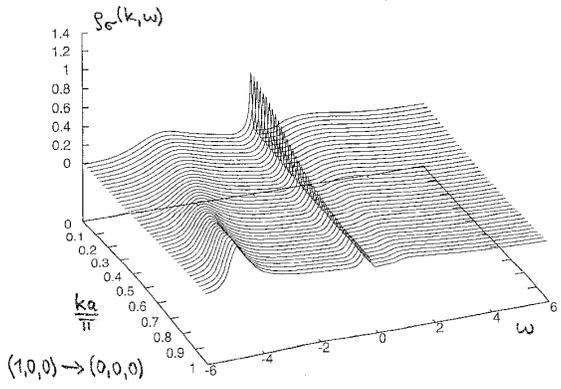
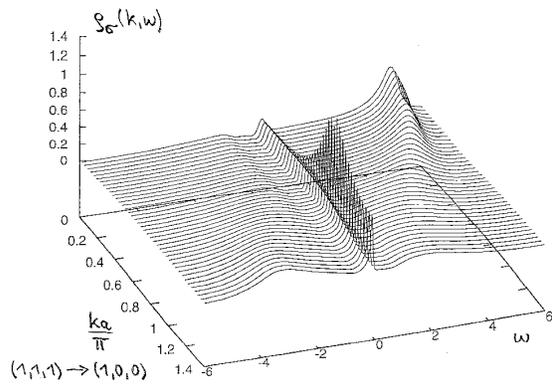
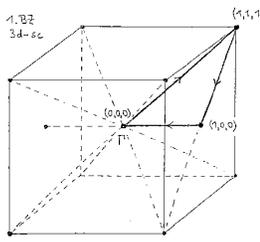


Abb. 100

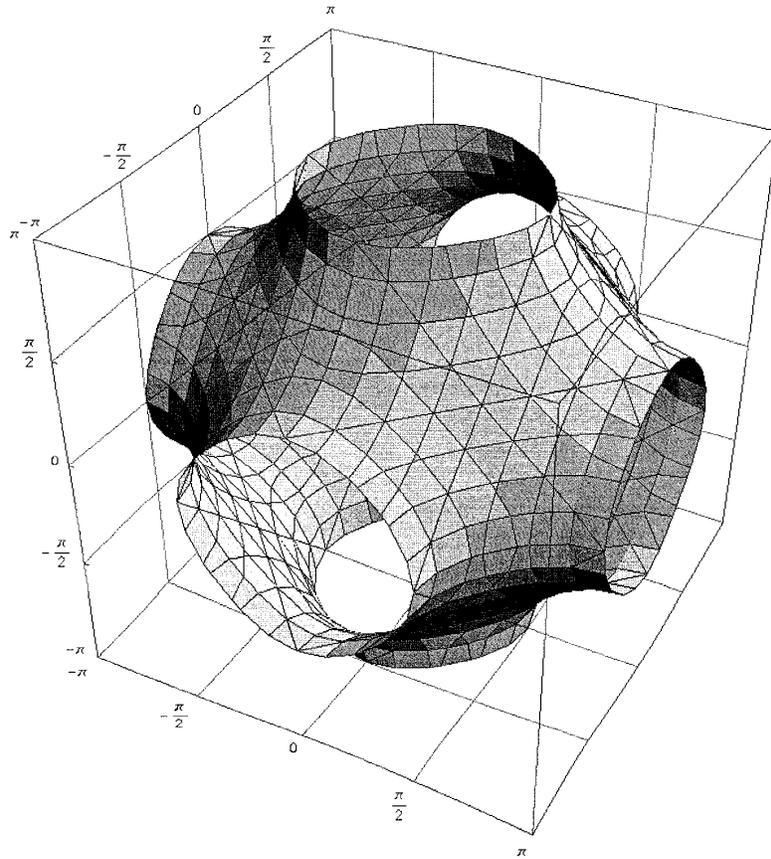


Hubbard-Modell:
 Einteilchen-Spektrum
 $S_0(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{k\sigma}(\omega + i\delta)$
 mit k längs expz. Linie
 $3d-dc, \mu = 0, -\text{Halbfüllung}$
 $2t = 1$



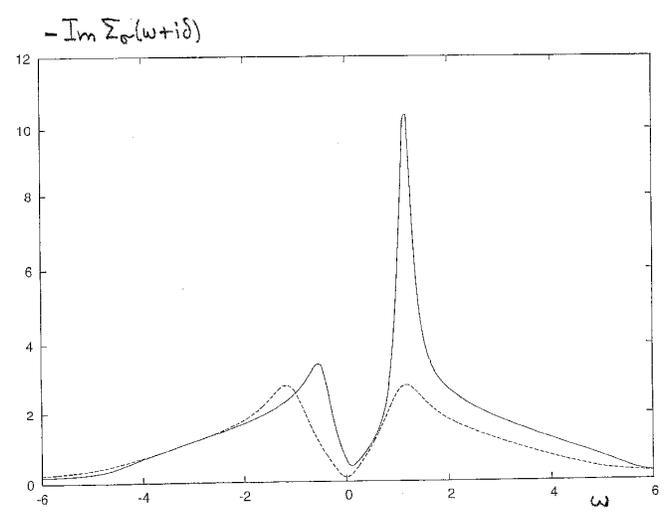
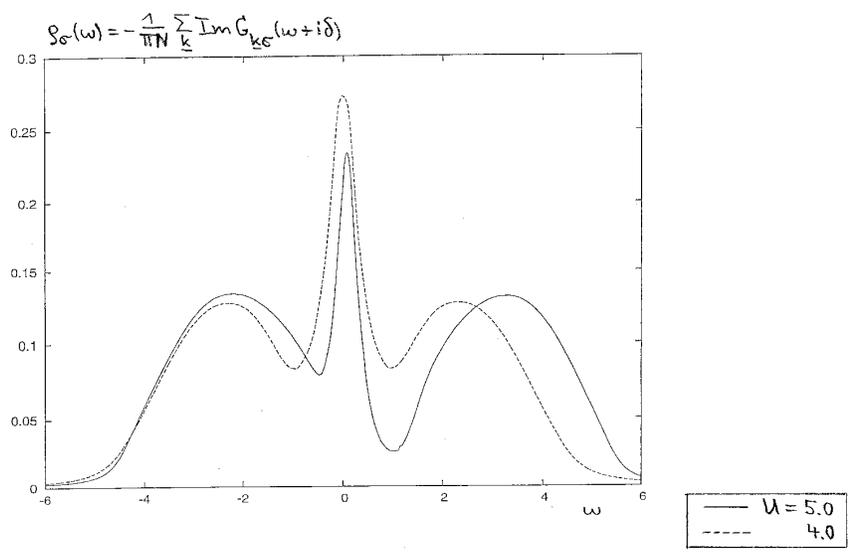
$\epsilon = -2.5, U = 5.0$
 $\beta = 25$
 ENCA-LVN

Figure 10.10



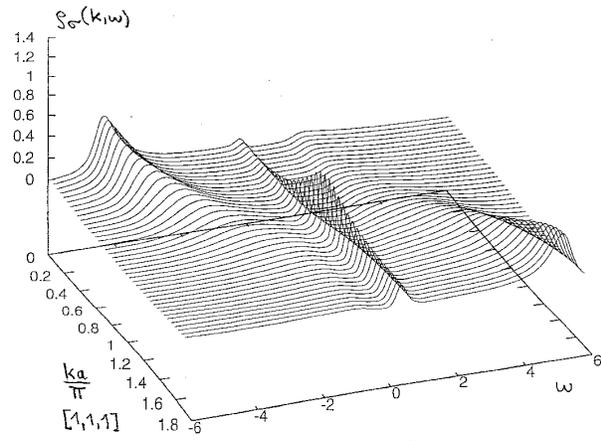
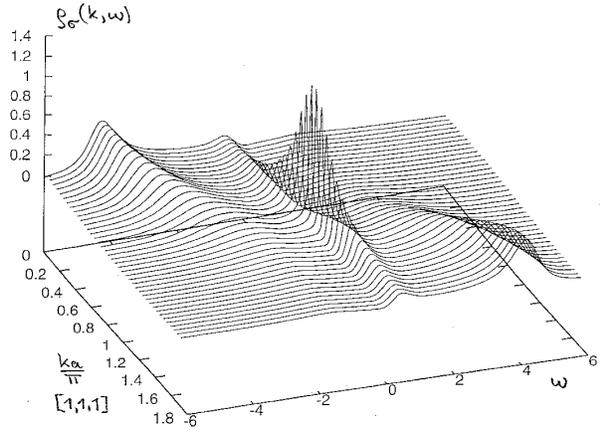
Hubbard-Modell, ENCA-LVN
 3d-sc, $\mu=0$, $2t=1$
 $\epsilon=-2.0$, $\beta=10$.

Abbildung

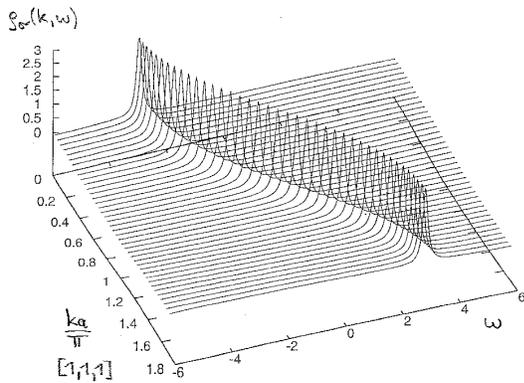


AGS, 2011

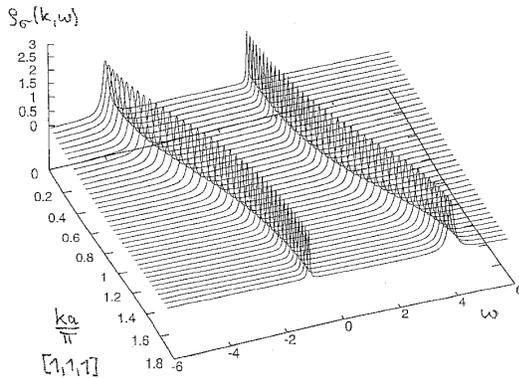
Hubbard-Modell, ENCA-LVN
Einteilchen-Spektrum $\rho_\sigma(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{k\sigma}(\omega + i\delta)$
mit k längs $[1,1,1]$
3d-sc, $\mu = 0.$, $\epsilon = -2.0$, $\beta = 10.$, $2t = 1$



Hubbard-Modell:
 Verschiedene Näherungsstufen für das
 Einteilchen-Spektrum $S_0(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{100}(k, \omega + i\delta)$
 3d-sc, $\mu = 0$, -Halbfüllung
 $\epsilon = -2.0$, $U = 4.0$, $2t = 1$

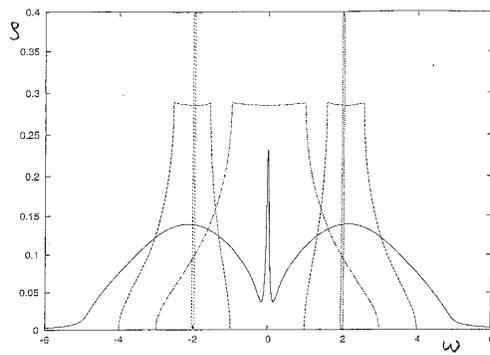


Hartree-Fock
 \cong
 Tight-Binding-Band



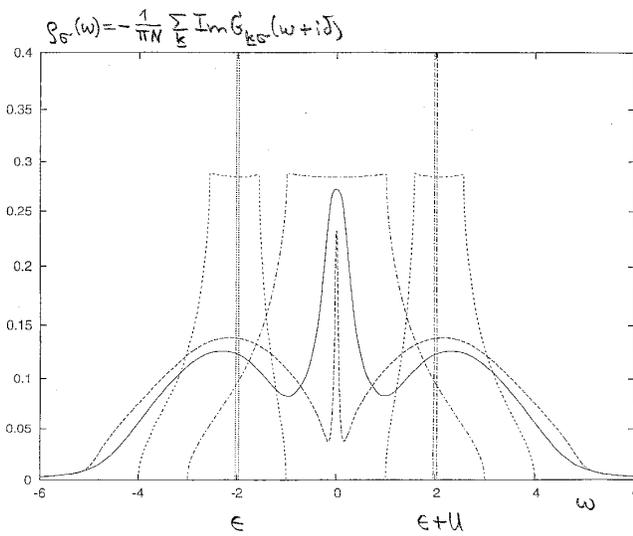
Hubbard I
 (Freie Theorie)

Abb. 2.1



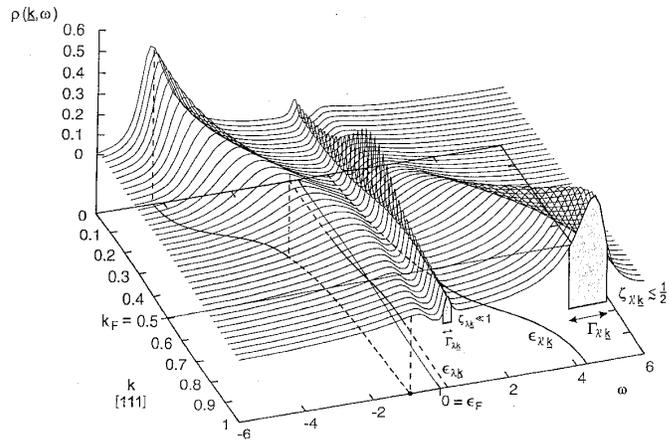
dazu:
SNCA-LVN
mit $\beta=100$.

Verschiedene Näherungstufen für das Einteilchen-Spektrum des Hubbard-Modells mit $\epsilon=-2.0$, $U=4.0$, $\mu=0$, $3d-sc$, $2t=1$.

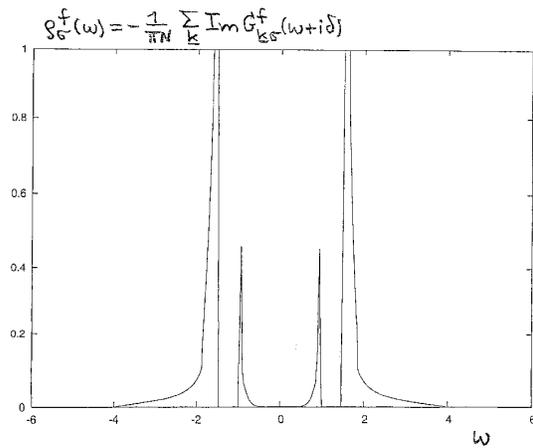
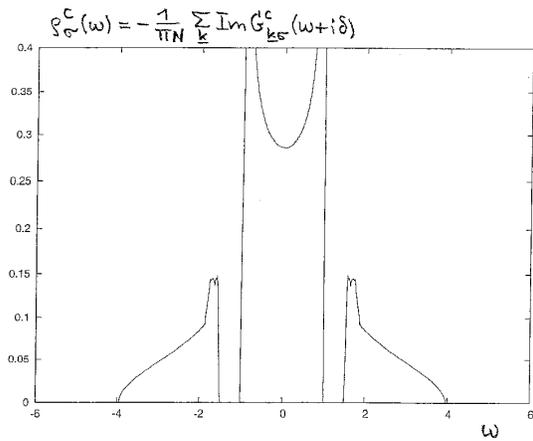


s-Schale
Tight-Binding-Band \cong
Hartree-Fock
Hubbard I
SNCA-LVN
mit $\beta=100$.
ENCA-LVN
mit $\beta=10$.

Abb. 14



Anderson-Gitter-Modell, Freie Theorie
 3d-sc, $\mu=0$, -Halbfüllung, $2t_c=1$, $t_f=0$
 $E_f = -1.5$, $U=3.0$, $\epsilon_c=0$, $V=0.3$
 Hybridisierung zu nächsten Nachbarn



Anderson-Gitter-Modell, Hybridisierung zu nächsten Nachbarn
 Einteilchen-Spektren $\rho_{\sigma}^{c,f}(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{k\sigma}^{c,f}(\omega + i\delta)$ mit k längs $[1,1,1]$
 3d-sc, $\mu = 0$, -Halbfüllung, $2t_c = 1$, $t_f = 0$
 $\epsilon_f = -1.5$, $U = 3.0$, $\epsilon_c = 0$, $V = 0.3$

Freie Theorie

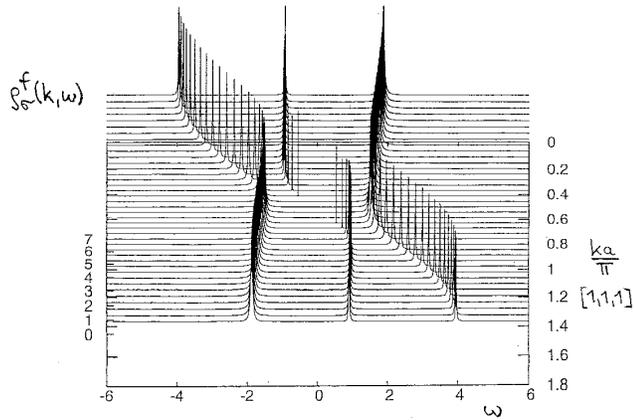
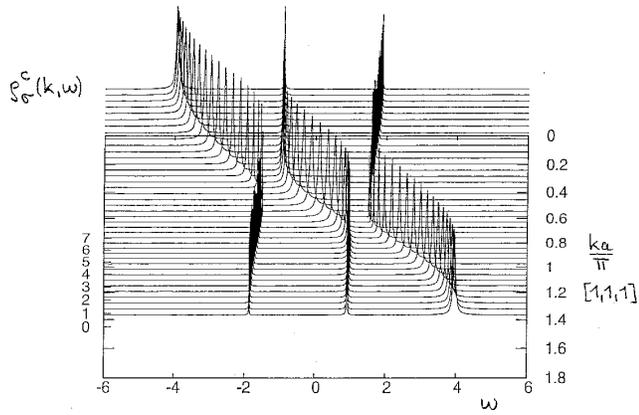
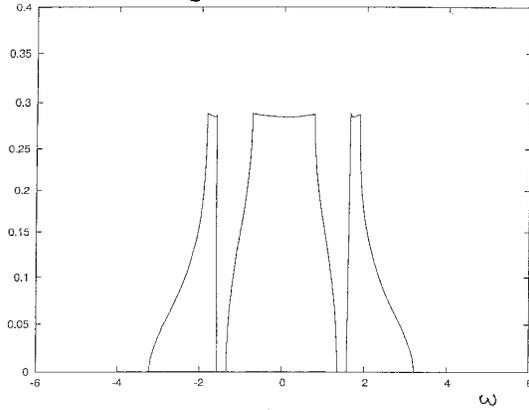


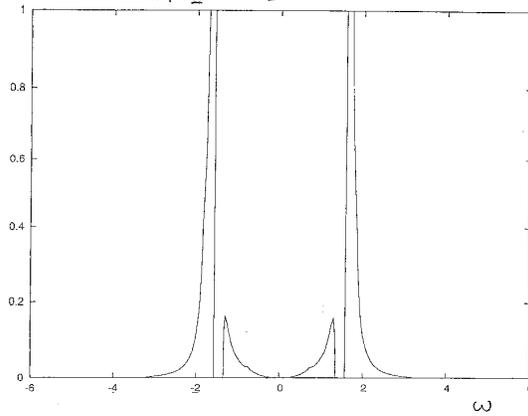
Abb. 16

Anderson-Gitter-Modell, Freie Theorie
3d-sc, $\mu=0$ - Halbfüllung, $2t_c=1, t_f=0$
 $\epsilon_f=-1.5, U=3.0, \epsilon_c=0, V=0.3 \cdot 2.45$
lokale Hybridisierung

$$\rho_{\sigma}^c(\omega) = -\frac{1}{\pi N} \sum_{\mathbf{k}} \text{Im} G_{\mathbf{k}\sigma}^c(\omega+i\delta)$$

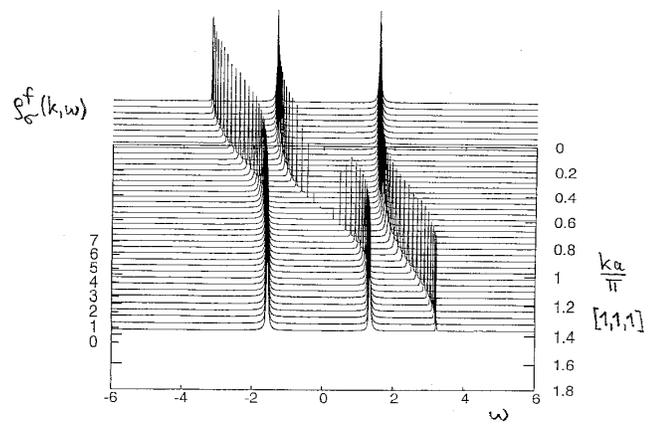
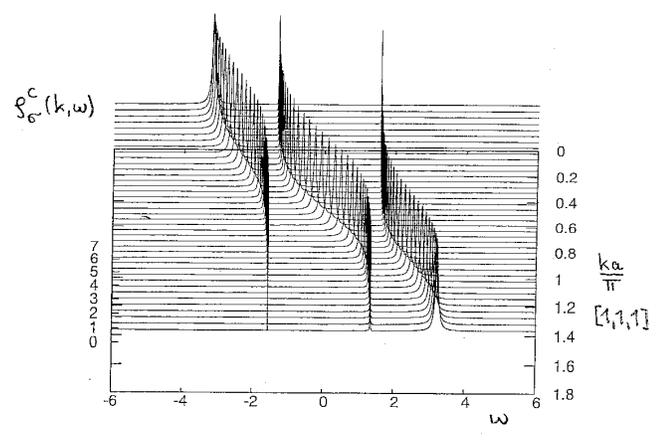


$$\rho_{\sigma}^f(\omega) = -\frac{1}{\pi N} \sum_{\mathbf{k}} \text{Im} G_{\mathbf{k}\sigma}^f(\omega+i\delta)$$

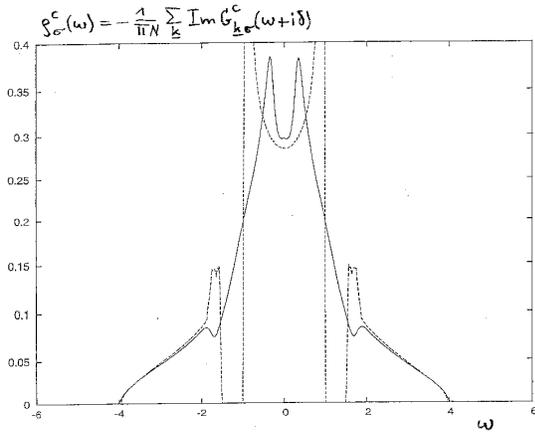


Anderson-Gitter-Modell, lokale Hybridisierung
 Einteilchen-Spektren $g_{\sigma}^{c,f}(k,\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\sigma}^{c,f}(k,\omega+i\delta)$ mit k längs $[1,1,1]$
 3d-sc, $\mu=0$. - Halbfüllung, $2t_c=1, t_f=0$.
 $E_f = -1.5, U=3.0, \epsilon_c=0, V=0.3 \cdot 2,45$

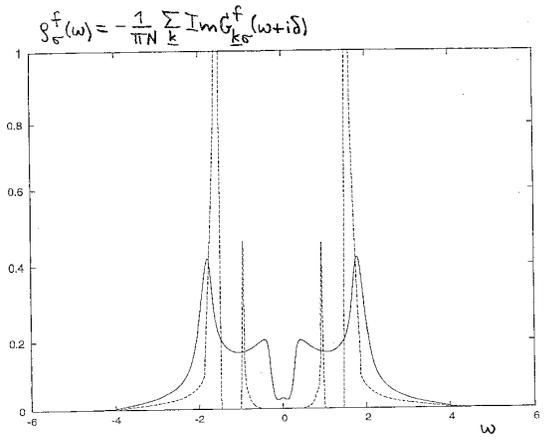
Freie Theorie



Anderson-Gitter-Modell, Hybridisierung zu nächsten Nachbarn
 3d-sc, $\mu=0$, -Halbfüllung, $2t_c=1$, $t_f=0$
 $\epsilon_f=-1.5$, $U=3.0$, $\epsilon_c=0$, $\beta=5$, $V=0.3$

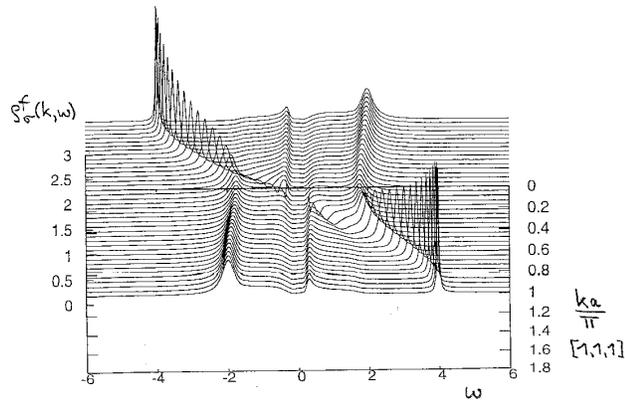
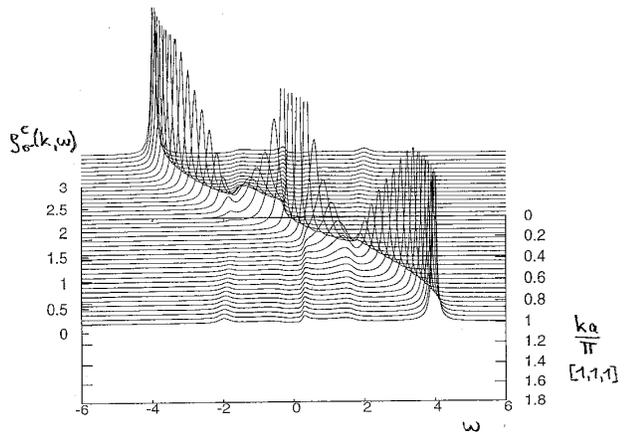


— ENCA-LVN
 ---- Freie Theorie

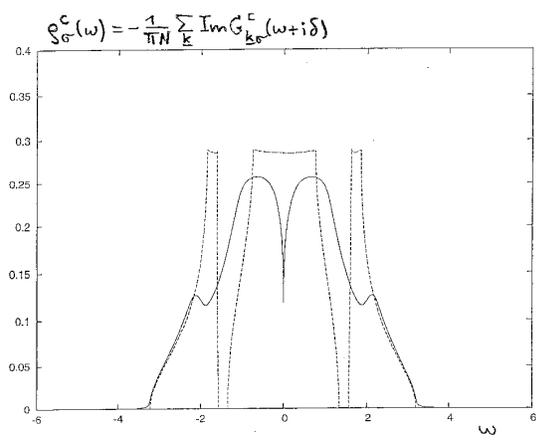


Anderson-Gitter-Modell, Hybridisierung zu nächsten Nachbarn
 Einteilchen-Spektren $g_{\alpha}^{cf}(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\alpha\alpha}^{cf}(\omega + i\delta)$ mit k längs $[\pi, \pi, \pi]$
 3d-sc, $\mu = 0$ - Halbfüllung, $2t_c = 1$, $t_f = 0$.
 $\epsilon_f = -1.5$, $U = 3.0$, $\epsilon_c = 0$, $\beta = 5$, $V = 0.3$

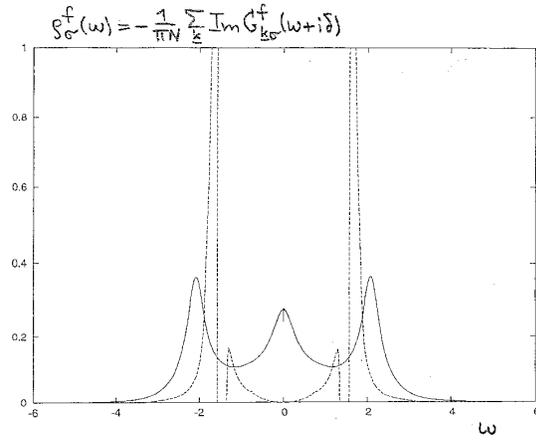
ENCA-LVN



Anderson-Gitter-Modell, lokale Hybridisierung
 3d-sc, $\mu=0$. - Halbfillung, $2t_c=1$, $t_f=0$.
 $\epsilon_f = -1.5$, $U=3.0$, $\epsilon_c=0$, $\beta=5$, $V=0.3 \cdot 2.45$



— ENCA-LVN
 - - - - Freie Theorie



Anderson-Gitter-Modell, lokale Hybridisierung
 Einteilchen-Spektren $\rho_{\sigma}^{c,f}(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{k\sigma}^{c,f}(\omega + i0)$ mit k längs $[1,1,1]$
 3d-sc, $\mu=0$, -Halbfüllung, $2t_z=1$, $t_x=0$. ENCA-LVN
 $\epsilon_f = -1.5$, $U = 3.0$, $\epsilon_c = 0$, $\beta = 5$, $V = 0.3 \cdot 2.45$

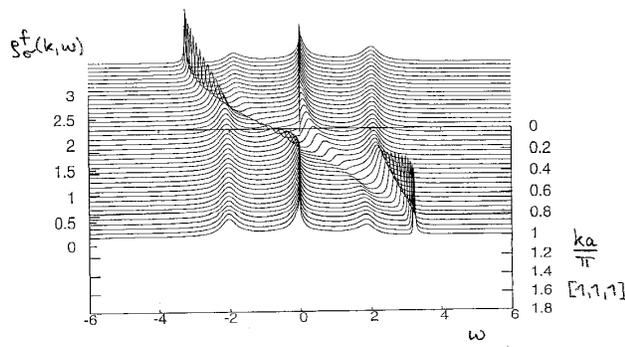
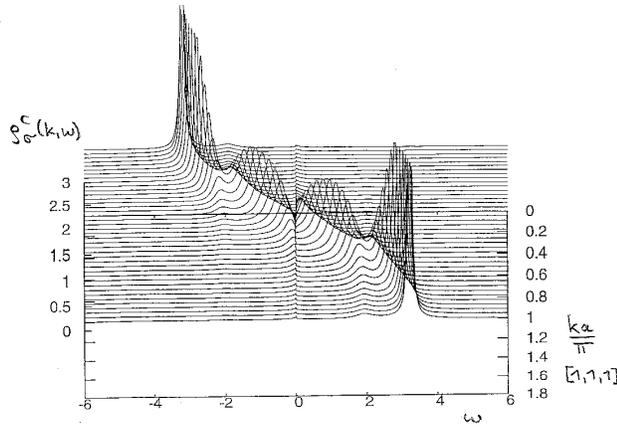
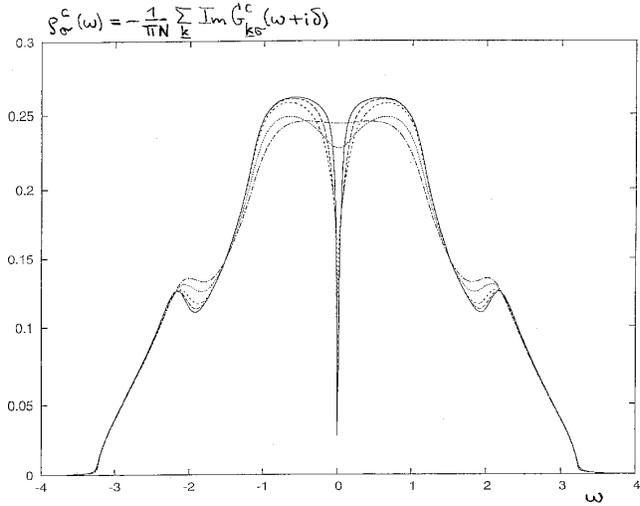
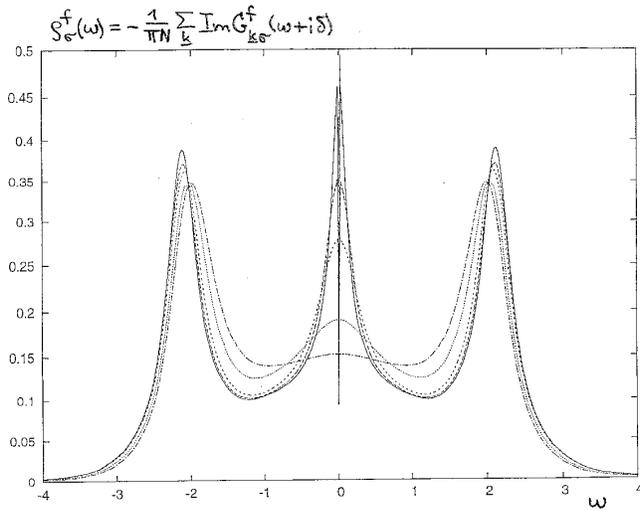


Abb. 19.3

Anderson-Gitter-Modell, lokale Hybridisierung
 3d-sc, $\mu=0$ -Halbfüllung, $2t_c=1$, $t_f=0$. ENCA-LVN
 $\epsilon_f = -1.5$, $U=3.0$, $\epsilon_c=0$, $V=0.3 \cdot 2.45$

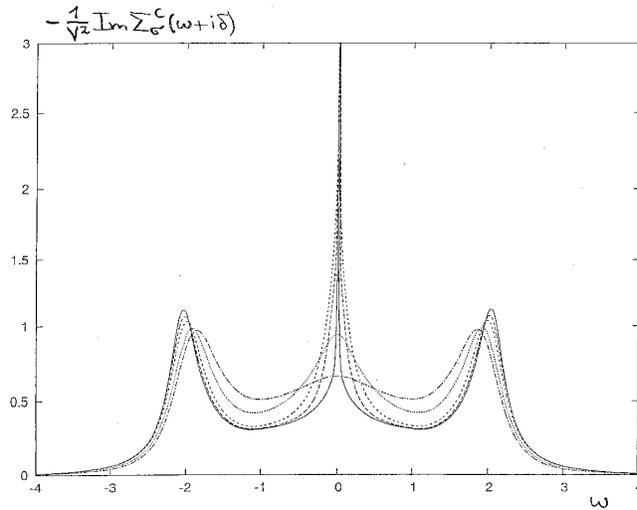


$\beta =$
 1.
 2.
 5.
 10.
 25.

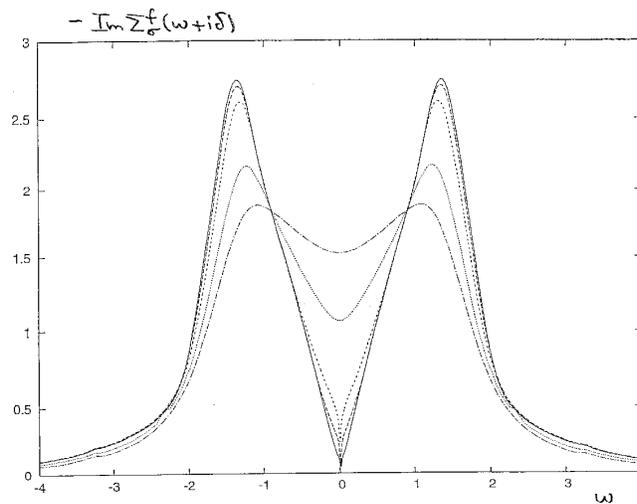


19.05.2011

Anderson-Gitter-Modell, lokale Hybridisierung
 3d-sc, $\mu=0$, -Halbfüllung, $2t_c=1$, $t_f=0$.
 $\epsilon_f=-1.5$, $U=3.0$, $\epsilon_c=0$, $V=0.3 \cdot 2.45$ ENCA-LVM

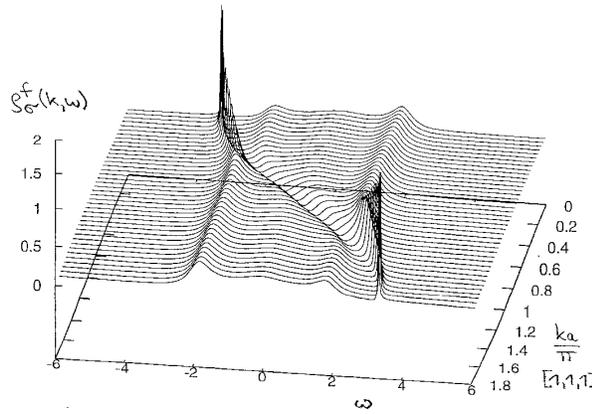
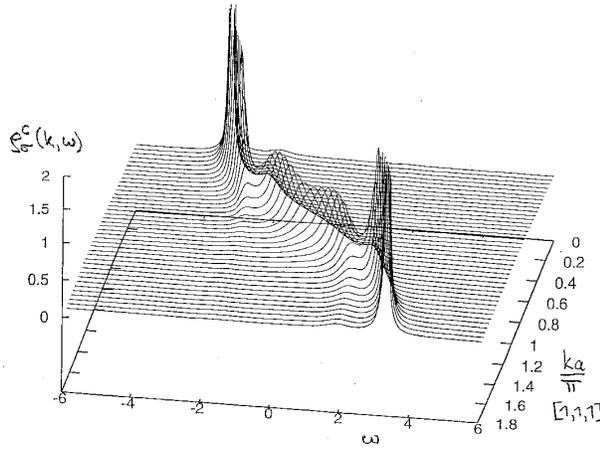


$\beta =$ 1.
 2.
 5.
 10.
 25.



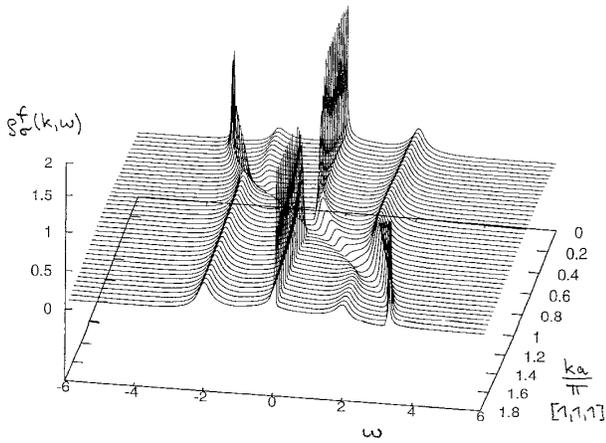
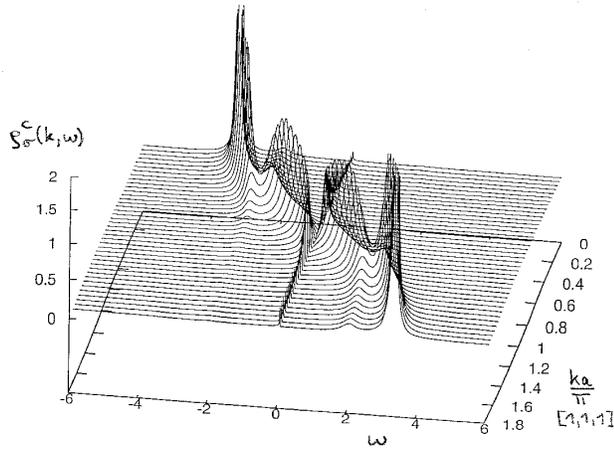
Anderson-Gitter-Modell, lokale Hybridisierung
 Einteilchen-Spektren $S_{\sigma}^{c/f}(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{k\sigma}^{c/f}(\omega + i\delta)$ mit k längs $[1,1,1]$
 3d-sc, $\mu = 0$ -Halbfüllung, $2t_c = 1, t_f = 0$.
 $\epsilon_f = -1.5, U = 3.0, \epsilon_c = 0, \beta = 1, V = 0.3 \cdot 2.45$

ENCA-LVN



Anderson-Gitter-Modell, lokale Hybridisierung
 Einteilchen-Spektren $S_{\sigma}^{c,f}(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{k\sigma}^{c,f}(\omega + i\delta)$ mit k längs $[1,1,1]$
 3d-sc, $\mu = 0$. -Halbfüllung, $2t_c = 1$, $t_f = 0$.
 $\epsilon_f = -1.5$, $U = 3.0$, $\epsilon_c = 0$, $\beta = 25$, $V = 0.3 \cdot 245$

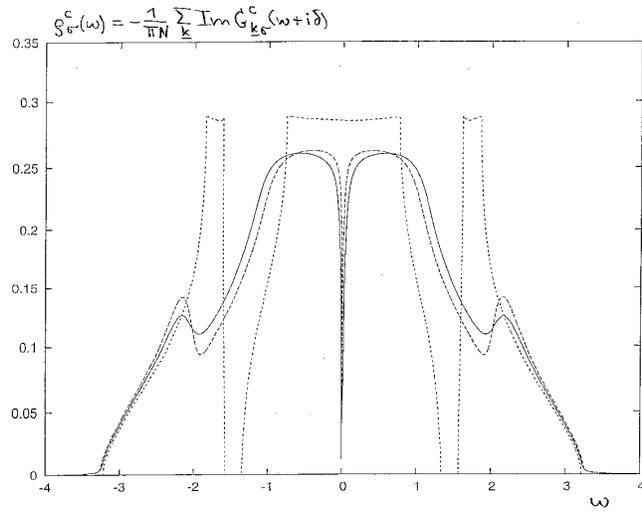
ENCA-LVN



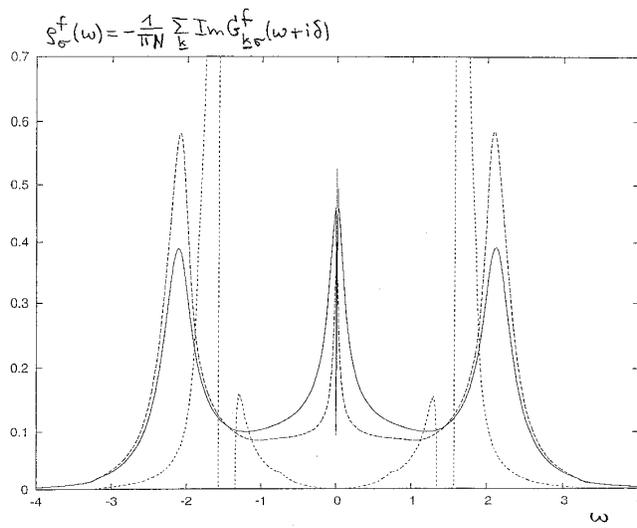
Anderson-Gitter-Modell, lokale Hybridisierung
 3d-sc, $\mu = 0$, -Halbfüllung, $2t_c = 1$, $t_f = 0$.
 $\epsilon_f = -1.5$, $U = 3.0$, $\epsilon_c = 0$, $V = 0.3 \cdot 2.45$

Abb. 21a

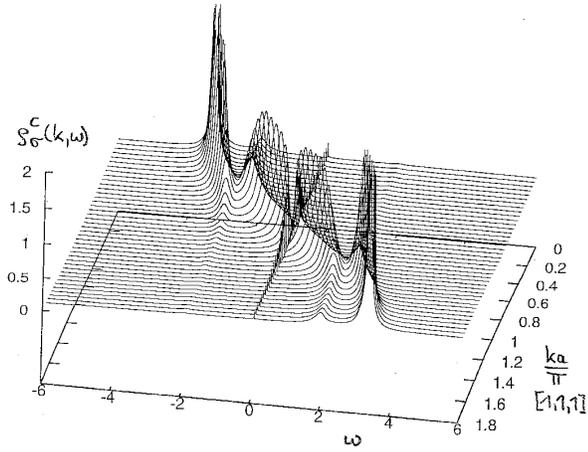
$\beta = 25$. (ENCA)
 100. (SNCA)



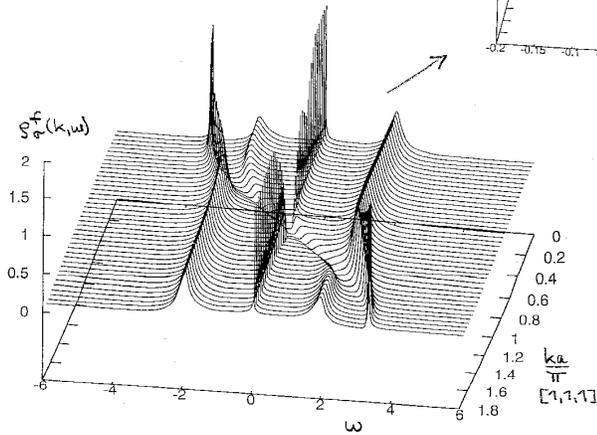
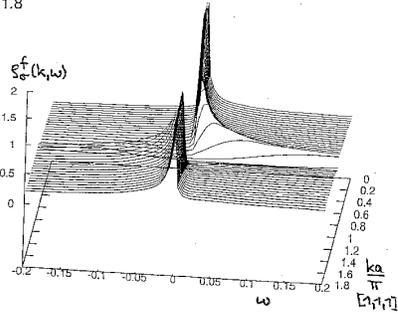
— ENCA-LVN
 --- SNCA-LVN
 Freie Theorie



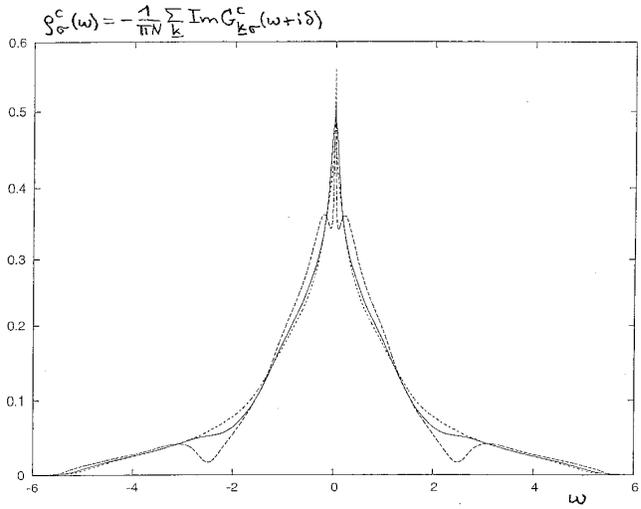
Anderson-Gitter-Modell, lokale Hybridisierung
 Einteilchen-Spektren $S_{\sigma}^{c,f}(k,\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{k\sigma}^{c,f}(\omega+i\delta)$ mit k längs $[\pi, \pi, \pi]$
 3d-sc, $\mu=0$ -Halbfüllung, $2t_c=1$, $t_f=0$.



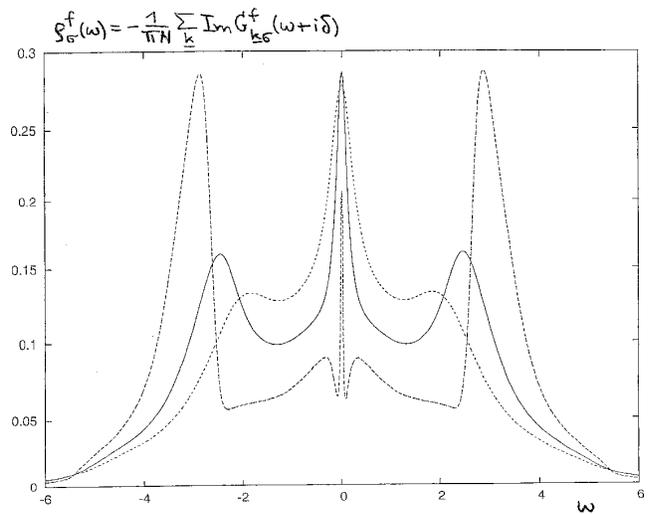
$E_f = -1.5$, $U = 3.0$
 $\epsilon_c = 0$, $\gamma = 0.3 \cdot 2.45$
 $\beta = 200$. SNCA-LVN



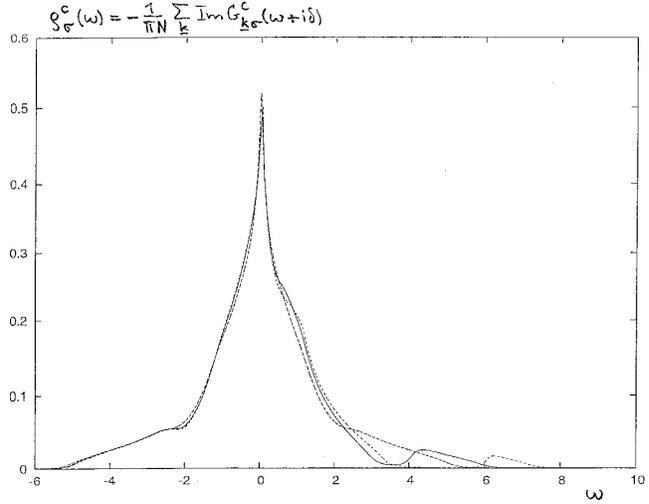
Anderson-Gitter-Modell, lokale Hybridisierung
 3d-sc, $\mu=0$. - Halbfüllung, $2t_c=1, t_f=0$.
 $\epsilon_f = -\frac{1}{2}U, \epsilon_c=0, V=0.5 \cdot 2.45$ SNCA-LVN



$U=2.0, \beta=7.5$
3.0 25.
4.5 150.



Anderson-Gitter-Modell, lokale Hybridisierung
 3d-sc, $\mu = 0$, $2t_c = 1$, $t_f = 0$.
 $\epsilon_f = -1.5$, $\epsilon_c = 0$, $\beta = 10$, $V = 0.5 \cdot 2.45$ SNCA-LVN



$U = 3.0$
 5.0
 7.0

