



Julius-Maximilians-Universität Würzburg  
Fakultät für Physik und Astronomie  
Lehrstuhl für Theoretische Physik I

# Continuous Time Auxiliary Field Quantum Monte Carlo Impurity Solver

Diplomarbeit  
von

Michael Mützel

März 2008 – März 2009

Betreuer: Prof. Dr. Fakher Assaad

Michael Mützel  
Pilziggrundstr. 111  
97076 Würzburg

Hiermit erkläre ich an Eides statt, dass ich die von mir vorgelegte Arbeit selbstständig verfasst habe, dass ich die verwendeten Quellen, Internet-Quellen und Hilfsmittel vollständig angegeben habe und dass ich die Stellen der Arbeit – einschließlich Tabellen, Karten und Abbildungen –, die anderen Werken oder dem Internet im Wortlaut oder dem Sinn nach entnommen sind, auf jeden Fall unter Angabe der Quelle als Entlehnung kenntlich gemacht habe.

Würzburg, den 8. März 2009

(Unterschrift)

---

Michael Mützel

## Kurzdarstellung

In dieser Arbeit untersuchen wir magnetische Störstellen in metallischen Leitern nach dem Single Impurity Anderson Model. Die Coulomb-Wechselwirkung wird durch eine Hubbard-Stratonovich Transformation nach Einteilchenoperatoren entwickelt. Die Bestimmung der Spur von Operator-Matrizen wird auf die Berechnung von Determinanten überführt. Wir implementieren eine Quanten Monte Carlo Simulation in einem C++ Programm, um die Greensche Funktion der Störstellenelektronen numerisch exakt zu messen. Die Diskretisierung der Zeit wird im Gegensatz zur herkömmlichen Hirsch-Fye Methode aufgehoben, was zu einer Eliminierung des Diskretisierungsfehlers und zu einer höheren numerischen Effizienz führt.

Wir stellen die Methode der Monte Carlo Simulation zur Erzeugung von Markov Ketten vor und zeigen, wie man die Erwartungswerte von Observablen mit zugehörigem statistischen Fehler misst. In verschiedenen Parameterregimes messen wir die Green Funktion und Besetzungszahlen. Im Fall eines kleinen Systems mit nur 2 Badplätzen vergleichen wir mit den Ergebnissen exakter Diagonalisierung.

Wir entwickeln erstmals eine Hubbard-Stratonovich Transformation für Heisenberg-Wechselwirkungen und implementieren sie in unsere Störstellen-Simulation, um Kondo-artige Probleme lösen zu können.

**Schlüsselworte:** Magnetische Störstellen, Single Impurity Anderson Model, Coulomb-Wechselwirkung, Greensche Funktion, Hirsch-Fye Methode, Trotter Zerlegung, Hubbard-Stratonovich Transformation, Monte Carlo Simulation, Kondo-Modell

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einführung</b>	<b>5</b>
1.1	Von Klassischer Physik zu Vielteilchenproblemen: eine kurze Übersicht . . . . .	5
1.2	Magnetische Störstellen . . . . .	6
1.3	Anderson Modell . . . . .	7
<b>2</b>	<b>Green Funktionen</b>	<b>10</b>
2.1	Retardierte Green Funktion . . . . .	10
2.2	Matsubara Green Funktion . . . . .	11
2.3	Freie Green Funktion des Anderson Modells . . . . .	14
<b>3</b>	<b>Continuous Time Hirsch-Fye Methode</b>	<b>16</b>
3.1	Weak Coupling Dyson Entwicklung . . . . .	16
3.2	Hubbard-Stratonovich Zerlegung . . . . .	17
3.3	Von der Spur zur Determinante . . . . .	18
3.4	Ersatzmatrix . . . . .	22
3.5	Inverse Green Funktion . . . . .	23
3.6	Dyson Gleichung . . . . .	26
3.7	Äquivalenz zu weiteren Methoden . . . . .	29
<b>4</b>	<b>Monte Carlo Simulation</b>	<b>32</b>
4.1	Markov Ketten . . . . .	32
4.2	Update Typen . . . . .	36
4.3	Autokorrelation und Jackknife Verfahren . . . . .	38
4.4	Implementierung . . . . .	39
4.5	Mittlere Störungsordnung . . . . .	45
<b>5</b>	<b>Ergebnisse im Anderson Modell</b>	<b>47</b>
5.1	Verifizierung des Algorithmus . . . . .	47
5.2	Autokorrelation und Konvergenzverhalten . . . . .	52
5.3	Weitere Ergebnisse . . . . .	54
<b>6</b>	<b>Kondo Modell</b>	<b>59</b>
6.1	Erweiterte Hubbard-Stratonovich Transformation . . . . .	59
6.2	Volle Green Funktion . . . . .	65
6.3	Implementierung . . . . .	66
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>70</b>
	<b>Literatur</b>	<b>71</b>

# 1 Einführung

## 1.1 Von Klassischer Physik zu Vielteilchenproblemen: eine kurze Übersicht

Schon seit es menschliche Geschichtsschreibung gibt, beschäftigen sich Menschen mit der Entwicklung und Deutung eines Weltbildes. Während früher noch über die Form unserer Erde gestritten wurde, ist der Horizont wissenschaftlicher Erforschung längst gewachsen, förmlich explodiert. Was ist die Gestalt unserer Galaxie? Wie schnell wächst das Universum, und wie sah es kurz nach seiner Entstehung aus? Um diese Fragen beantworten zu können, reicht nicht mehr der Blick durch das Fernglas. Modelle nicht greifbarer Systeme, Prognosen zukünftiger und Berechnungen vergangener Konstellationen müssen am Computer berechnet und simuliert werden. Und dazu benötigen wir letztlich die Kenntnis, nach welchen Regeln sich unsere Welt verhält.

Doch bereits seit Langem wissen wir, dass es zur Verständnis der großen Welt gerade auch nötig ist, die Welt im Kleinen, im Mikroskopischen zu verstehen, weil sie ihren eigenen Gesetzen folgt und viele Phänomene zeigt, welche makroskopisch nicht zu beobachten sind. Als Beispiel mag die Entdeckung des Welle-Teilchen-Dualismus dienen, der sich im Widerspruch des Doppelspaltexperiments von Young im Jahre 1802 und der Beobachtung des photoelektrischen Effekts durch Becquerel 1839 zeigte. Die Beugung am Doppelspalt ist aber nur bei mikroskopisch kleinen Spaltabständen erkennbar. Im Jahr 1925 wurde eine neue Theorie begründet, welche das Verhalten der Materie im atomaren und subatomaren Bereich beschreibt, ohne im Widerspruch zu makroskopischen Beobachtungen zu stehen: die Quantenmechanik [1].

Im Gegensatz zur klassischen Mechanik, die ein Teilchen durch Ort und Impuls als vollständig beschrieben annimmt und damit deterministisch ist, unterscheidet die Quantenmechanik zwischen Zuständen und Observablen, welche als Vektoren und Matrizen dargestellt werden. Zustände beschreiben Teilchen, und über Observablen wie Ort und Impuls können nur Wahrscheinlichkeitsangaben gemacht werden. Die Messung einer Observablen beeinflusst den Zustand eines Systems: ein Eigenzustand wird eingenommen, und der zugehörige Eigenwert der Observablen gemessen [2]. Zeit ist in der Quantenmechanik keine Observable, sondern ein Parameter, und die Zeitentwicklung wird durch die Schrödingergleichung beschrieben [3].

Auch in der Elektronik reichen die makroskopischen Gesetze von Kirchhoff und Ohm bei Weitem nicht aus, um die Physik jenseits großer Ströme und Schaltelemente zu erklären. Erst die Betrachtung der mikroskopischen Bestandteile der Materie, nämlich der Ionen und Elektronen, ermöglicht uns beispielsweise die Erklärung des Quanten-Hall-Effekts [4] oder die Entwicklung elektronischer Bauteile wie Transistoren [5], die etwa für den Bau heutiger Computer unverzichtbar sind. Das Fachgebiet der Physik, welches sich mit elektrischen, magnetischen, aber auch mechanischen Eigenschaften von Metallen, Halbleitern und Isolatoren beschäftigt, die Festkörperphysik, kommt selbstverständlich nicht ohne Quantenmechanik aus.

Die erforderliche Betrachtung einzelner Elektronen und Atomrümpfe in Festkörpern wirft aber schnell Probleme auf, was man an ihrer ungeheueren Menge erkennt: die Anzahl von Atomrümpfen in einem einzelnen Kubikzentimeters eines Metalls liegt in der Größenordnung von  $10^{22}$ , und ebenso die Anzahl freier Elektronen. Die Lösung der Schrödingergleichung für so viele, durch Wechselwirkungen aneinander gekoppelte Teilchen scheint im Allgemeinen unmöglich. Eine Erleichterung stellt der Formalismus der Zweiten Quantisierung dar, welcher als Basis statt  $N$ -Teilchen-Wellenfunktionen mit Besetzungszahlen arbeitet [3]. Zudem werden in den meisten Fällen Approximationen nötig sein, etwa die Beschränkung der Wechselwirkung aller Teilchen auf die benachbarter Teilchen. Das Teilgebiet der Physik, welches sich mit der Untersuchung solcher Systeme befasst, wird auch als Vielteilchenphysik bezeichnet.

## 1.2 Magnetische Störstellen

Wir bleiben in dieser Arbeit in der Vielteilchenphysik und befassen uns mit der Untersuchung einer magnetischen Störstelle in einem metallischen Leiter. Sie beschreibt einen lokalisierten elektronischen Zustand, welcher der Coulomb-Wechselwirkung unterliegt. Das bedeutet, dass die zwei Elektronen entgegengesetzten Spins, die das Pauli-Prinzip für den Zustand erlaubt, sich abstoßen, während die frei beweglichen Elektronen des Leitungsbades dieser Wechselwirkung nicht unterliegen. Die Doppelbesetzung des Zustandes, welche den Gesamtspin 0 besitzt, wird durch diese Abstoßung unterdrückt, während der Zustand bei einfacher Besetzung ein magnetisches Moment besitzt. Eine solche Konstellation kommt unter anderem in Legierungen von Übergangsmetallen vor, wo lokalisierte Elektronen im d-Orbital unterhalb der Valenzschale zum magnetischen Moment beitragen, beispielsweise in  $\text{Fe}_x\text{Au}$  oder  $\text{Fe}_x\text{MoNb}$ .

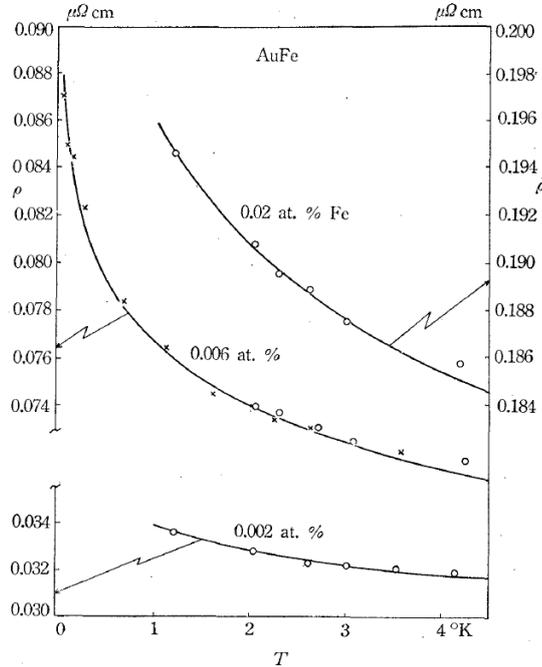


Abbildung 1.1: Vergleich des gemessenen und mit dem Kondo Modell berechneten Widerstands von FeAu-Legierungen für verschiedene Fe-Konzentrationen [7]

Schon seit den 50-er Jahren sind magnetische Störstellen eines der Hauptthemen der Festkörpertheorie. Mit ihrer Hilfe ist es gelungen, das Rätsel um das bei manchen Metallen auftretende Minimum des elektrischen Widerstands bei tiefen Temperaturen  $T$  zumindest teilweise zu lösen. Frühere Modelle erklärten den elektrischen Widerstand auf diese Weise: Elektronen in Metallen bewegen sich wechselwirkungsfrei im idealen Kristallgitter. Thermische Schwingungen des Gitters, sogenannte Phononen, verursachen aber Streuprozesse und damit Reibung. Der daraus resultierende Widerstand fällt mit  $T^5$  ab, wenn das Gitter abkühlt. Auch die Entdeckung der Streuung an Gitterdefekten, eines Fehlers in der Periodizität des idealen Kristalls, kann ein Minimum des Widerstands nicht erklären, denn sie liefert einen annähernd konstanten Beitrag zum Widerstand. J. Kondo entwickelte ein Modell einer magnetischen Störstelle mit einer Wechselwirkung des lokalisierten magnetischen Moments mit dem der *Bad*-Elektronen über die Kopplungskonstante  $J$ , s. Kap. 6. 1964 konnte er mit seiner Lösung dieses *s-d*- oder auch *Kondo* Modells erstmals das Widerstandsverhalten von Metallen bei tiefen Temperaturen in Übereinstimmung mit Experimenten simulieren (Abb. 1.1). Kondos Lösung des Widerstands enthält einen zusätzlichen Term

$$R(T) \sim -\ln(T), \quad (1.1)$$

der zu dem beobachteten Minimum führt. Allerdings kann diese Lösung nicht im Limes  $T \rightarrow 0$  gelten, da sie divergiert. Das Kondo Problem ist daher nach wie vor Gegenstand aktueller Forschung.

Ein weiteres Anwendungsgebiet magnetischer Störstellen liegt in der Untersuchung stark korrelierter Fermionen Systeme, die etwa der Beschreibung von Mott Isolatoren dienen [8]. Zur Lösung solcher Probleme nutzt man die *Dynamical Mean Field Theory* (DMFT). Obgleich auf jedem Gitterplatz eines Systems Coulomb-Wechselwirkung stattfindet, kann das System als eine einzelne magnetische Störstelle in einem effektiven umgebenden Medium dargestellt werden. Dieses Medium besteht dann aus wechselwirkungsfreien Badelektronen, deren Einzelchenenergien in das Störstellenmodell eingehen. Es gibt eine Selbstkonsistenz-Bedingung, welche die Lösung des Störstellenproblems, die Greensche Funktion  $G$  der Störstellenelektronen, mit dem effektiven Medium  $S_{\text{eff}}$ , dem sogenannten Weiss-Feld, verknüpft. So können durch Iterationsverfahren die anfangs gleichermaßen unbekanntes  $G$  und  $S_{\text{eff}}$  schrittweise zu ihrer konvergierenden Lösung angenähert werden [9].

### 1.3 Anderson Modell

Ebenfalls in den frühen 60-er Jahren entwickelte P. W. Anderson ein eigenes Bild einer magnetischen Störstelle. Das nach ihm benannte Anderson Modell wird durch den folgenden Hamiltonian beschrieben [10]:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (1.2)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = & -(\mu - \varepsilon_d - U/2)(n_{d\uparrow} + n_{d\downarrow}) + \sum_{k=1}^N \sum_{\sigma} \frac{V}{\sqrt{N}} (d_{\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}) + \\ & + \sum_{k=1}^N \sum_{\sigma} \varepsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma}, \end{aligned} \quad (1.3)$$

$$\hat{V} = U(n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} - (n_{d\uparrow} + n_{d\downarrow})/2). \quad (1.4)$$

$d_\sigma^\dagger, d_\sigma, n_{d\sigma} = d_\sigma^\dagger d_\sigma$  sind Erzeugungs-, Vernichtungs- bzw. Besetzungszahloperator für das Störstellenelektron mit Spin  $\sigma$ , das in Zukunft nur noch als d-Elektron bezeichnet wird. Die Namensgebung ist auf das oben erwähnte Auftreten in d-Orbitalen zurückzuführen.  $c_{k\sigma}^\dagger, c_{k\sigma}$  sind Erzeugungs- und Vernichtungsoperator für das  $k$ -te Badelektron mit Spin  $\sigma$ , im Folgenden  $k$ -Elektron. Es gibt  $N$  jeweils 2-fach entartete Badzustände.  $\mu$  ist das chemische Potential,  $\varepsilon_d$  die Energie, um die der d-Zustand gegenüber  $\mu$  verschoben ist,  $U$  die Coulomb-Energie, welche aus der Wechselwirkung zweier d-Elektronen resultiert und  $\varepsilon_{k\sigma}$  die Energie des  $k$ -ten Badelektrons mit Spin  $\sigma$ . Der Hamiltonian enthält auch einen Hybridisierungsterm, welcher den Übergang eines d- in einen Bad-Zustand bzw. umgekehrt mit der Energie  $V$  verbindet. Man kann zeigen, dass die Modelle von Kondo und Anderson im Regime kleiner  $J$  äquivalent sind [6].

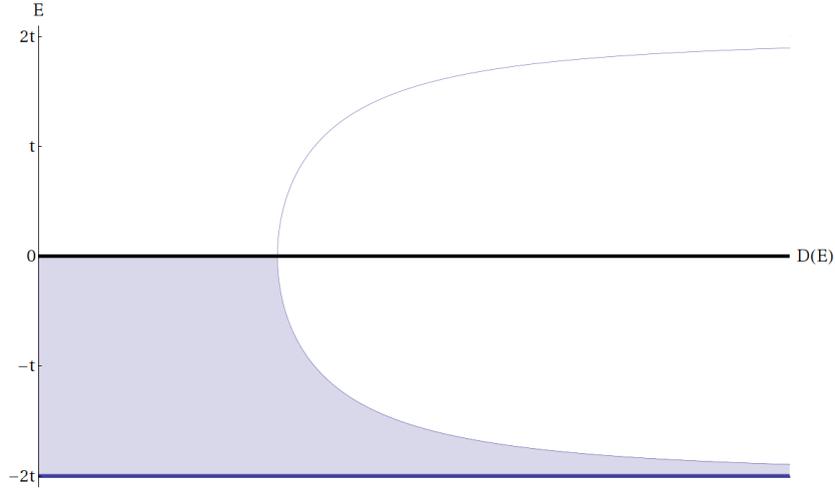


Abbildung 1.2: Zustandsdichte bei  $\mu = 0$ ,  $\varepsilon_d = -U/2$  und  $U = 4t$ . Zu sehen sind der einfach besetzte d-Zustand bei  $E = -2t$ , die d-Doppelbesetzung bei  $E = 0$  und die Badzustände.

Im Bereich

$$\varepsilon_d < 0 \quad \wedge \quad \varepsilon_d + U > 0 \quad (1.5)$$

ist also der einfach besetzte d-Zustand gegenüber Nicht- oder Doppelbesetzung der energetisch bevorzugte Grundzustand, welcher ein magnetisches Moment besitzt. Für die Energien  $\varepsilon_k$  der Badzustände rechnen wir in dieser Arbeit mit der eindimensionalen Tight-Binding Lösung

$$\varepsilon_{k_n} = -\mu - 2t \cos k_n \quad (1.6)$$

$$k_n = \frac{2\pi n}{N}, \quad n = 0, 1, \dots, N-1 \quad (1.7)$$

für ein System mit  $N$  Badplätzen und Leitungsbandbreite  $t$ . Abb. 1.2 zeigt zur Veranschaulichung die Zustandsdichte der Bad- und d-Elektronen bei  $\mu = 0$ ,  $\varepsilon_d = -U/2$  und  $U = 4t$ . Zustände im Bereich der Schraffur sind im Grundzustand besetzt.

Die Diplomarbeit ist folgendermaßen gegliedert. Wir beginnen mit einer Einführung in die Theorie der Green Funktionen, und bestimmen die freie Matsubara Green Funktion im Anderson Modell. Danach leiten wir eine Formel zur Berechnung der Zustandssumme her, welche in der Continuous Time Hirsch Fye Methode verwendet wird. Im darauf folgenden Kapitel

stellen wir die Technik der Monte Carlo Simulation im Allgemeinen vor, mit deren Hilfe Markov Ketten erzeugt werden, welche die Statistik großer Konfigurationsräume im Rahmen eines statistischen Fehlers exakt wiedergeben. Wir zeigen, wie der Algorithmus zur Bestimmung der Green Funktion im Anderson Modell in ein C++ Programm implementiert wird. Im nächsten Kapitel sind Ergebnisse verschiedener Simulationen aufgeführt. Zuletzt folgt die Herleitung eines Algorithmus zur Lösung des Kondo Modells und eine Beschreibung seiner Implementierung.

## 2 Green Funktionen

### 2.1 Retardierte Green Funktion

Ziel dieser Diplomarbeit ist es, die Green Funktion der d-Elektronen zu berechnen. Green Funktionen sind ein wichtiges Werkzeug moderner theoretischer Physik. Im folgenden Abschnitt skizzieren wir kurz, welche Motivation es für ihre Definition gibt.

Die Gleichungen zur Berechnung von thermodynamischen Erwartungswerten [11]

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\sum_n \langle \Psi_n | e^{-\beta \hat{H}} \hat{A} | \Psi_n \rangle}{\sum_n \langle \Psi_n | e^{-\beta \hat{H}} | \Psi_n \rangle} \quad (2.1)$$

setzt die Kenntnis der Eigenzustände  $|\Psi_n\rangle$  des Systems voraus. Diese Zustände sind als Lösung der in der Einleitung erwähnten Schrödingergleichung

$$\hat{H}|\Psi_n(t)\rangle = i\hbar|\dot{\Psi}_n(t)\rangle \quad (2.2)$$

zwar prinzipiell berechenbar, aber können in der Praxis zumeist nicht numerisch exakt bestimmt werden, wegen des schon genannten Problems der hohen Zahl gekoppelter Gleichungen für ein wechselwirkendes Vielteilchenproblem. Viele Probleme lassen sich aber in guter Näherung lösen. Als Beispiel könnte nach der

- elektrischen Leitfähigkeit,
- magnetischen Suszeptibilität oder der
- Wärmeleitfähigkeit

gefragt sein. Diese werden als *Response* Größen bezeichnet, weil sie die Antwort des Systems auf eine äußere Störung wie z.B. ein elektrisches Feld bestimmen. Das ungestörte System mit dem Hamiltonian  $\hat{H}_0$  sei exakt lösbar. Das gestörte System wird dann durch

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{V}(t), \\ \hat{V}(t) &= \hat{B}F(t) \end{aligned}$$

beschrieben, wobei  $\hat{V}$  die energetische Kopplung der Observable  $\hat{B}$  an das externe Feld  $F$  bestimmt. Zur Berechnung des Erwartungswerts der Observable ist es nötig, Gleichung 2.1 zu lösen, welche im Schrödinger Bild auch in dieser Form geschrieben werden kann:

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = \text{Tr} \left( \hat{\rho}(t) \hat{A} \right).$$

$\hat{\rho}(t)$  ist die Dichtematrix zum Zeitpunkt  $t$  und wird durch die Bewegungsgleichung

$$i\hbar\dot{\hat{\rho}}(t) = \left[ \hat{H}_0, \hat{\rho}(t) \right]_- + \left[ \hat{V}(t), \hat{\rho}(t) \right]_-$$

bestimmt. Die Klammern  $[\dots]_-$  geben den Kommutator für fermionische Operatoren an. Nimmt man an, dass das externe Feld zu irgendeinem Zeitpunkt zugeschaltet wird, nimmt die Dichtematrix zu Beginn den Wert des ungestörten Systems an:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_0 = \frac{e^{-\beta \hat{H}_0}}{\text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}_0})}.$$

Wir gehen vom Schrödinger Bild in das von Dirac über mit der Beziehung

$$\hat{\rho}^D(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{\rho}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t}$$

und erhalten die Rekursionsbeziehung

$$\hat{\rho}^D(t) = \hat{\rho}_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [\hat{V}^D(t'), \hat{\rho}^D(t')],$$

die gelöst wird durch

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^D(t) &= \hat{\rho}_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \hat{\rho}_n^D(t), \\ \hat{\rho}_n^D(t) &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n \cdot \\ &\quad \cdot \left[ \hat{V}^D(t_1), \left[ \hat{V}^D(t_2), \left[ \cdots, \left[ \hat{V}^D(t_n), \hat{\rho}_0 \right]_- \cdots \right]_- \right]_- \right]_- \end{aligned}$$

Bei einer kleinen Störung  $\hat{V}$  kann man sich aber auf die erste Ordnung beschränken, da der Beitrag höherer Potenzen von  $\hat{V}$  gegen 0 konvergiert. Daher stammt die Bezeichnung *Linear Response*. Wir erhalten für den Mittelwert der Observablen in dieser Näherung

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{A} \rangle_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \left\langle \left[ \hat{A}^D(t), \hat{B}^D(t') \right]_- \right\rangle_0. \quad (2.3)$$

$\langle \cdots \rangle_0$  steht für einen Erwartungswert im freien System, in welchem die Störung noch ausgeschaltet ist. Nach obiger Annahme kann dieses System exakt behandelt werden, und somit können wir die Response-Größen in linearer Approximation bestimmen [12].

In Gleichung 2.3 gilt durch die gegebenen Integrationsgrenzen stets  $t' < t$ . Wir definieren die sogenannte *retardierte Green Funktion* zu

$$G_{AB}^{\text{ret}}(t, t') = -\Theta(t - t') \left\langle \left[ \hat{A}(t), \hat{B}(t') \right]_- \right\rangle_0 \quad (2.4)$$

und können damit Gleichung 2.3 einfacher schreiben als

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{A} \rangle_0 + \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' F(t') G_{AB}^{\text{ret}}(t, t').$$

## 2.2 Matsubara Green Funktion

Vergleichen wir den Boltzmann Faktor zur Berechnung thermodynamischer Erwartungswerte in Gl. 2.1,  $e^{-\beta \hat{H}}$ , mit dem Zeitentwicklungsoperator  $e^{i \hat{H} t}$ , fällt ihre ähnliche Form auf. Betrachtet man Temperatur und Zeit als Real- und Imaginärteil einer komplexen Variable, kann ihre

Entwicklung analog behandelt werden. Diese Technik wurde maßgeblich von *T. Matsubara* entwickelt [13].

Es empfiehlt sich, eine neue Green Funktion in imaginärer Zeit  $\tau$  zu definieren, die sogenannte Matsubara Green Funktion

$$G_{AB}^m(\tau, \tau') = \langle T \hat{A}(\tau) \hat{B}(\tau') \rangle. \quad (2.5)$$

$\hat{A}, \hat{B}$  seien fermionische Erzeugungs- oder Vernichtungsoperatoren, und  $T$  ein Zeitordnungsoperator. Dann gilt

$$T \hat{A}(\tau) \hat{B}(\tau') = \hat{A}(\tau) \hat{B}(\tau'), \quad \text{falls } \tau > \tau', \quad (2.6)$$

$$T \hat{A}(\tau) \hat{B}(\tau') = -\hat{B}(\tau') \hat{A}(\tau), \quad \text{falls } \tau < \tau', \quad (2.7)$$

$$T \hat{A}(\tau) \hat{A}^\dagger(\tau') = \hat{A}(\tau) \hat{A}^\dagger(\tau'), \quad \text{falls } \tau = \tau'. \quad (2.8)$$

$$(2.9)$$

Sowohl für die Green Funktion als auch den Zeitordnungsoperator existieren verschiedene Definitionen, die sich im globalen Vorzeichen oder der Zeitordnungsregel bei Gleichzeitigkeit unterscheiden. In dieser Arbeit behalten wir stets die oben aufgeführten Definitionen bei.

$\tau$  nimmt Werte im Intervall  $[-\beta, \beta]$  an. In diesem Bereich gilt

$$G_{AB}^m(\tau, \tau') = -G_{AB}^m(\tau - \beta, \tau'), \quad \text{falls } \tau > \tau' \text{ und } \tau - \beta < \tau', \quad (2.10)$$

$$G_{AB}^m(\tau, \tau') = -G_{AB}^m(\tau + \beta, \tau'), \quad \text{falls } \tau < \tau' \text{ und } \tau + \beta > \tau'. \quad (2.11)$$

Wir beweisen dies zuerst für den Fall  $\tau > \tau'$  und  $\tau - \beta < \tau'$ :

$$G_{AB}^m(\tau, \tau') = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[ e^{-\beta \hat{H}} T \hat{A}(\tau) \hat{B}(\tau') \right] \quad (2.12)$$

$$= \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[ e^{-\beta \hat{H}} e^{\tau \hat{H}} \hat{A} e^{-\tau \hat{H}} e^{\tau' \hat{H}} \hat{B} e^{-\tau' \hat{H}} \right], \quad (2.13)$$

wobei wir den Zeitordnungsoperator angewandt und die Zeitentwicklung im Heisenberg Bild zur Darstellung der Operatoren verwendet haben. Unter Nutzung der Zyklizität der Spur und des Einfügens einer Identität erhalten wir

$$G_{AB}^m(\tau, \tau') = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[ e^{-\beta \hat{H}} e^{\tau' \hat{H}} \hat{B} e^{-\tau' \hat{H}} e^{(\tau - \beta) \hat{H}} \hat{A} e^{(\beta - \tau) \hat{H}} \right] \quad (2.14)$$

$$= -\frac{1}{Z} \text{Tr} \left[ e^{-\beta \hat{H}} T \hat{A}(\tau - \beta) \hat{B}(\tau') \right] \quad (2.15)$$

$$= -G_{AB}^m(\tau - \beta, \tau'). \quad (2.16)$$

Das Einfügen des Zeitentwicklungsoperators erfüllt die Bedingungen an  $\tau$  und  $\tau'$  nach der Regel 2.7.

Analog verläuft der Beweis für den zweiten Fall  $\tau < \tau'$  und  $\tau + \beta > \tau'$ :

$$G_{AB}^m(\tau, \tau') = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[ e^{-\beta \hat{H}} T \hat{A}(\tau) \hat{B}(\tau') \right] \quad (2.17)$$

$$= -\frac{1}{Z} \text{Tr} \left[ e^{-\beta \hat{H}} e^{\tau' \hat{H}} \hat{B} e^{-\tau' \hat{H}} e^{\tau \hat{H}} \hat{A} e^{-\tau \hat{H}} \right] \quad (2.18)$$

$$= -\frac{1}{Z} \text{Tr} \left[ e^{-\beta \hat{H}} e^{(\tau + \beta) \hat{H}} \hat{A} e^{-(\tau + \beta) \hat{H}} e^{\tau' \hat{H}} \hat{B} e^{-\tau' \hat{H}} \right] \quad (2.19)$$

$$= -\frac{1}{Z} \text{Tr} \left[ e^{-\beta \hat{H}} T \hat{A}(\tau + \beta) \hat{B}(\tau') \right] \quad (2.20)$$

$$= -G_{AB}^m(\tau + \beta, \tau'). \quad (2.21)$$

Wir können auch zeigen, dass die Green Funktion nur von der Zeitdifferenz  $\tau - \tau'$  abhängig ist. Exemplarisch beweisen wir dies für den Fall  $\tau > \tau'$ :

$$G_{AB}^m(\tau + \delta, \tau' + \delta) = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[ e^{-\beta \hat{H}} e^{(\tau+\delta)\hat{H}} \hat{A} e^{-(\tau+\delta)\hat{H}} e^{(\tau'+\delta)\hat{H}} \hat{B} e^{-(\tau'+\delta)\hat{H}} \right] \quad (2.22)$$

$$= \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[ e^{-\beta \hat{H}} e^{\delta \hat{H}} e^{\tau \hat{H}} \hat{A} e^{-\tau \hat{H}} e^{-\delta \hat{H}} e^{\delta \hat{H}} e^{\tau' \hat{H}} \hat{B} e^{-\tau' \hat{H}} e^{-\delta \hat{H}} \right] \quad (2.23)$$

$$= \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[ e^{-\beta \hat{H}} e^{\tau \hat{H}} \hat{A} e^{-\tau \hat{H}} e^{\tau' \hat{H}} \hat{B} e^{-\tau' \hat{H}} \right] \quad (2.24)$$

$$= G_{AB}^m(\tau, \tau'). \quad (2.25)$$

Zum Beweis haben wir lediglich die Zyklizität der Spur und die Kommutierbarkeit von  $\hat{H}$  mit sich selbst benutzt.

Es ist üblich, die Matsubara Green Funktion als periodisch anzunehmen mit der Periodenlänge  $2\beta$ . Sie kann durch eine Fourier Reihe entwickelt werden nach [14]

$$G_{AB}^m(\tau - \tau') = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n(\tau - \tau')} G_{AB}^m(i\omega_n). \quad (2.26)$$

Man bezeichnet  $\omega_n$  als Matsubara-Frequenz. Die Annahme

$$\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta} \quad (2.27)$$

erfüllt die Gleichungen 2.10 und 2.11.

Es besteht auch eine Verknüpfung zwischen den Matsubara Frequenzen und der Besetzungsdichte  $n_F$  der Energie  $E$ , welche eine Eigenenergie des freien Systems sei.  $n_F(E)$  wird für Fermionen mit der Fermi Funktion berechnet und kann als Reihe zerlegt werden [15]:

$$n_F(E) = \frac{1}{e^{\beta E} + 1} \quad (2.28)$$

$$= \frac{1}{2} + \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)i\pi/\beta - E} e^{i\omega_n 0^+} \quad (2.29)$$

$$= \frac{1}{2} + \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{i\omega_n - E} e^{i\omega_n 0^+}. \quad (2.30)$$

Der Faktor  $e^{i\omega_n 0^+}$  wurde eingefügt, damit die Reihe konvergiert. Mit der Definition der freien Matsubara Green Funktion

$$G^m(E, i\omega) := \frac{1}{E - i\omega_n} \quad (2.31)$$

erhalten wir

$$n_F(E) = \frac{1}{2} - \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} G^m(E, i\omega) e^{i\omega_n 0^+}. \quad (2.32)$$

Die Matsubara Green Funktion hat keine direkte physikalische Bedeutung wie die retardierte Green Funktion. Bei Kenntnis von  $G^m$  kann  $G^{\text{ret}}$  aber abgeleitet werden [15].

## 2.3 Freie Green Funktion des Anderson Modells

Bislang haben wir uns mit der Green Funktion zweier allgemeiner Operatoren  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  beschäftigt. Wir ersetzen sie in diesem Abschnitt durch die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren der d-Elektronen und schreiben kurz

$$G(\tau) := G_{dd^\dagger}^m(\tau - 0) \quad (2.33)$$

bzw. als fouriertransformierte Funktion der Matsubara-Frequenz

$$G(i\omega) := G_{dd^\dagger}^m(i\omega). \quad (2.34)$$

Besteht der Hamiltonian eines Teilchens ausschließlich aus reinen Einteilchen Energien, gibt es einen einfachen Zugang zur Green Funktion über die Resolventen Methode [16]. Im Fall des Anderson Modells müssen wir uns auf den ungestörten Hamiltonian in Gleichung 1.3 beschränken, da der Coulomb Term  $\hat{V}$  eine Zweiteilchen Wechselwirkung darstellt. Wir erhalten so die *freie* Green-Funktion  $G_0(i\omega)$  aus der Beziehung

$$(i\omega - \hat{H}_0) G_0(i\omega) = -\mathbf{1}. \quad (2.35)$$

Diese ist eine Operator Gleichung in Matrizenform. Wir können sie von links und rechts mit Eigenzuständen des Hamiltonians in *Bra*- und *Ket*-Notation multiplizieren, um Elemente der Matrizen zu erhalten. Auf diese Weise lassen sich durch Variation der gewählten Matrixelemente mehrere Gleichungen aufstellen. Da der Hamiltonian blockdiagonal bezüglich des Spins ist, d.h. er enthält keine Wechselwirkungen zwischen Elektronen verschiedenen Spins, können wir beide Blöcke getrennt behandeln. Der Einfachheit wegen wird der Index  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  unterdrückt. Wir beginnen mit  $\langle k|$  und  $|d\rangle$  und wenden den Hamilton Operator auf den linken Bra-Zustand an:

$$\langle k| (i\omega - \hat{H}_0) G_0(i\omega) |d\rangle = -\langle k|d\rangle \quad (2.36)$$

$$\begin{aligned} i\omega \langle k| G_0(i\omega) |d\rangle - \langle k| \left( -(\mu - \varepsilon_d - U/2)(n_{d\uparrow} + n_{d\downarrow}) + \right. \\ \left. + \sum_l \frac{V}{\sqrt{N}} (d^\dagger c_l + c_l^\dagger d) + \sum_l \varepsilon_l c_l^\dagger c_l \right) G_0(i\omega) |d\rangle = 0 \end{aligned} \quad (2.37)$$

$$i\omega \langle k| G_0(i\omega) |d\rangle - \frac{V}{\sqrt{N}} \langle d| G_0(i\omega) |d\rangle - \varepsilon_k \langle k| G_0(i\omega) |d\rangle = 0 \quad (2.38)$$

$$\frac{V}{\sqrt{N}} \frac{1}{i\omega - \varepsilon_k} \langle d| G_0(i\omega) |d\rangle - \langle k| G_0(i\omega) |d\rangle = 0. \quad (2.39)$$

Eine weitere Gleichung erhalten wir bei der Multiplikation mit  $\langle d|$  und  $|d\rangle$ :

$$\langle d| (i\omega - \hat{H}_0) G_0(i\omega) |d\rangle = -\langle d|d\rangle \quad (2.40)$$

$$\begin{aligned} i\omega \langle d| G_0(i\omega) |d\rangle - \langle d| \left( -(\mu - \varepsilon_d - U/2)(n_{d\uparrow} + n_{d\downarrow}) + \right. \\ \left. + \sum_l \frac{V}{\sqrt{N}} (d^\dagger c_l + c_l^\dagger d) + \sum_l \varepsilon_l c_l^\dagger c_l \right) G_0(i\omega) |d\rangle = -1 \end{aligned} \quad (2.41)$$

$$(i\omega + \mu + \varepsilon_d - U/2) \langle d| G_0(i\omega) |d\rangle - \sum_l \frac{V}{\sqrt{N}} \langle l| G_0(i\omega) |d\rangle = -1. \quad (2.42)$$

Wir setzen Gleichung 2.39 in Gleichung 2.42 ein und kommen zu einem geschlossenen Ausdruck für  $\langle d | G_0(i\omega) | d \rangle$ , welches wir im folgenden Teil dieser Arbeit kurz als  $G_0(i\omega)$  bezeichnen:

$$G_0(i\omega)(i\omega + \mu - \varepsilon_d - U/2) = -\mathbb{1} + \sum_k \frac{V^2}{N} \frac{1}{i\omega - \varepsilon_k} G_0(i\omega) \quad (2.43)$$

$$G_0(i\omega) = -\frac{\mathbb{1}}{i\omega + \mu - \varepsilon_d - U/2 - \sum_k \frac{V^2}{N} \frac{1}{i\omega - \varepsilon_k}}. \quad (2.44)$$

Wir haben damit die freie Matsubara Green Funktion der d-Elektronen im Anderson Modell gelöst. In unserem Algorithmus zur Lösung des Störstellenproblems werden wir jedoch die Green Funktion in Abhängigkeit der imaginären Zeit  $\tau$  benötigen, welche nach Gleichung 2.26 durch Fouriertransformation unserer frequenzabhängigen Lösung berechnet werden kann. Wir nutzen die Kenntnis des asymptotischen Verhaltens von  $G_0(i\omega)$ ,

$$\lim_{n \rightarrow \pm\infty} G_0(i\omega_n) = -\frac{1}{i\omega_n}. \quad (2.45)$$

Obwohl  $G_0(i\omega_n)$  also zu 0 konvergiert, kann die unendliche Reihe nicht durch eine endliche approximiert werden. Denn  $G(\tau)$  besitzt Sprungstellen bei  $0, \beta, -\beta, 2\beta, \dots$ , und nicht stetige Funktionen können nur durch unendliche Fourierreihen transformiert werden. Wir umgehen das Problem, indem wir die Fouriertransformierte der Asymptote von  $G_0(i\omega_n)$  addieren und sogleich wieder subtrahieren, was eine Äquivalenzumformung ist. Die Reihe, welche die Differenz von  $G_0(i\omega_n)$  und deren Asymptote aufsummiert, konvergiert schnell zu 0 und kann in guter Näherung durch eine endliche Reihe ersetzt werden. Die Fourierreihe der Asymptote selbst ist aber auch als unendliche Reihe exakt lösbar, und kann den Charakter der Sprungstellen tragen. Wir erhalten

$$G(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n \tau} G(i\omega_n) \quad (2.46)$$

$$\approx \frac{1}{\beta} \sum_{n=-N}^N e^{-i\omega_n \tau} \left( G(i\omega_n) + \frac{1}{i\omega_n} \right) - \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n \tau} \frac{1}{i\omega_n}, \quad (2.47)$$

$$\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n \tau} \frac{1}{i\omega_n} = -\Theta(\tau) \frac{1}{2} + \Theta(-\tau) \frac{1}{2}, \quad (2.48)$$

$$G(\tau) \approx \frac{1}{\beta} \sum_{n=-N}^N e^{-i\omega_n \tau} \left( G(i\omega_n) + \frac{1}{i\omega_n} \right) + \frac{1}{2} \quad \text{falls } \tau \geq 0. \quad (2.49)$$

In der Implementierung des Algorithmus verwenden wir als Zahl der Matsubara Frequenzen  $N = 10^4$ .

## 3 Continuous Time Hirsch-Fye Methode

Im letzten Kapitel haben wir gezeigt, wie die Green-Funktion der d-Elektronen im freien Anderson Modell exakt bestimmt werden kann. Ziel ist aber die Lösung des gestörten Anderson Modells, d.h. mit dem Wechselwirkungsterm  $\hat{V}$  in Gl. 1.4. Wir verwenden dazu die *Continuous Time Auxiliary Field* (CTAUX) Methode. Sie wird auch als *Continuous Time Hirsch-Fye* Methode bezeichnet, weil Sie mit Ausnahme der Aufhebung der Zeitdiskretisierung analog zur berühmten Methode von J. E. Hirsch und R. M. Fye ist, welche 1986 vorgestellt wurde [17]. Verglichen mit dieser ist die Continuous Time Methode wesentlich effizienter, da sie frei von Diskretisierungsfehlern ist und somit keine Extrapolationen zu  $\Delta\tau = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon$  nötig macht. Außerdem verzichtet sie auf die statischen Matrizengrößen in der zeitdiskretisierten Variante, welche in der Regel deutlich größer sind, als die durchschnittlichen dynamischen Matrizengrößen bei kontinuierlicher Zeit [18].

### 3.1 Weak Coupling Dyson Entwicklung

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[ e^{-\beta \hat{H}} \hat{A} \right] \quad (3.1)$$

Anknüpfend an obige Gleichung zur Berechnung des Mittelwerts der Observablen  $\hat{A}$  beginnen wir unsere Überlegungen mit der kanonischen Zustandssumme, wie sie aus der Thermodynamik bekannt ist. Wir fügen zunächst einen Faktor  $1 = e^{-K} e^K$  ein.  $K$  ist eine Zahl, welche wir in der Implementierung der Methode üblicherweise zu  $K = 1$  wählen. Der Sinn dieser Maßnahme wird sich später erschließen.

$$Z = \text{Tr} \left[ e^{-\beta \hat{H}} \right] \quad (3.2)$$

$$= e^{-K} \text{Tr} \left[ e^{-\beta(\hat{H}_0 + \hat{V} - K/\beta)} \right] \quad (3.3)$$

$$= e^{-K} \text{Tr} \left[ e^{-\beta \hat{H}_0} T e^{-\int_0^\beta d\tau (\hat{V}(\tau) - K/\beta)} \right]. \quad (3.4)$$

Im letzten Schritt haben wir eine Weak Coupling Dyson Zerlegung des Exponentialoperators durchgeführt, die auch für nicht kommutierende Operatoren gilt [19]. Da der Vorfaktor  $e^{-K}$  eine Zahl ist, kein Operator, wird er sich bei Mittelwertberechnungen (s. Gl. 3.1) stets kürzen, sodass wir ihn gefahrlos weglassen können. Wir führen nun eine Reihenentwicklung der zweiten Exponentialfunktion durch.

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_{\tau_{n-1}}^\beta d\tau_n \left( \frac{K}{\beta} \right)^n \cdot \text{Tr} \left[ e^{-(\beta - \tau_n) \hat{H}_0} \left( \mathbf{1} - \frac{\beta \hat{V}}{K} \right) \cdots e^{-(\tau_2 - \tau_1) \hat{H}_0} \left( \mathbf{1} - \frac{\beta \hat{V}}{K} \right) e^{-\tau_1 \hat{H}_0} \right]. \quad (3.5)$$

Der Faktor  $\frac{1}{n!}$  der Reihenentwicklung der Exponentialfunktion kürzt sich mit dem Faktor  $n!$ , welchen wir aus der Umformulierung der Zeitordnung erhalten. Es gilt nämlich

$$\int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_n T = n! \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_{\tau_{n-1}}^\beta d\tau_n. \quad (3.6)$$

## 3.2 Hubbard-Stratonovich Zerlegung

Wir haben nun eine Reihen- bzw. Integraldarstellung der Zustandssumme erhalten. Was uns daran stört ist, dass sie nach wie vor Zweiteilchenoperatoren in Form von  $\hat{V}$  enthält (vgl. Gl. 1.4). Wir führen eine Hubbard-Stratonovich Zerlegung durch [20], wobei wir uns folgende Relationen zu Nutze machen:

$$\frac{\hat{V}^2}{U^2} = (n_{d\uparrow}n_{d\downarrow} - (n_{d\uparrow} + n_{d\downarrow})/2)^2 \quad (3.7)$$

$$= n_{d\uparrow}n_{d\downarrow} + \frac{1}{4}n_{d\uparrow} + \frac{1}{4}n_{d\downarrow} + \frac{1}{2}n_{d\uparrow}n_{d\downarrow} - 2n_{d\uparrow}n_{d\downarrow} \quad (3.8)$$

$$= -\frac{1}{2}(n_{d\uparrow}n_{d\downarrow} - (n_{d\uparrow} + n_{d\downarrow})/2) \quad (3.9)$$

$$= -\frac{1}{2}\hat{V}, \quad (3.10)$$

$$\frac{\hat{V}}{U} = -\frac{1}{2}(n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow})^2. \quad (3.11)$$

Damit gilt

$$\mathbb{1} - \frac{\beta\hat{V}}{K} = \frac{1}{2} \sum_{s=\pm 1} e^{\gamma s(n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow})} \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow \mathbb{1} - \frac{\beta\hat{V}}{K} &= \frac{1}{2} \left( \mathbb{1} + \gamma(n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow}) + \frac{\gamma^2}{2!}(n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow})^2 + \frac{\gamma^3}{3!}(n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow})^3 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\gamma^4}{4!}(n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow})^4 + \cdots + \mathbb{1} - \gamma(n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow}) + \frac{\gamma^2}{2!}(n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow})^2 - \right. \\ &\quad \left. - \frac{\gamma^3}{3!}(n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow})^3 + \frac{\gamma^4}{4!}(n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow})^4 - \cdots \right) \end{aligned} \quad (3.13)$$

$$\Leftrightarrow \mathbb{1} - \frac{\beta\hat{V}}{K} = \mathbb{1} + \frac{\gamma^2}{2!}(n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow})^2 + \frac{\gamma^4}{4!}(n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow})^4 + \frac{\gamma^6}{6!}(n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow})^6 + \cdots \quad (3.14)$$

$$\Leftrightarrow \mathbb{1} - \frac{\beta\hat{V}}{K} = \mathbb{1} - 2\frac{\hat{V}}{U} \left( \frac{\gamma^2}{2!} + \frac{\gamma^4}{4!} + \frac{\gamma^6}{6!} + \cdots \right) \quad (3.15)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\beta U}{2K} = \left( \frac{\gamma^2}{2!} + \frac{\gamma^4}{4!} + \frac{\gamma^6}{6!} + \cdots \right) \quad (3.16)$$

$$\Leftrightarrow \mathbb{1} + \frac{\beta U}{2K} = \cosh \gamma \quad (3.17)$$

$$\Leftrightarrow \gamma = \operatorname{acosh} \left( \mathbb{1} + \frac{\beta U}{2K} \right). \quad (3.18)$$

Die Operatordifferenz  $n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow}$  entspricht dem Magnetisierungsoperator  $m_d$ , daher wird auch von einem *Auxiliary Field* gesprochen.  $s$  ändert das Vorzeichen der Wechselwirkung und wird als *Auxiliary Spin* bezeichnet.

Es ist uns somit gelungen, die Zweiteilchenoperatoren in Gleichung 3.5 durch eine Summe von Einteilchen-Exponentialoperatoren auszudrücken. Wir schreiben

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_n=\pm 1} \int_0^{\beta} d\tau_1 \cdots \int_{\tau_{n-1}}^{\beta} d\tau_n \left(\frac{K}{2\beta}\right)^n \cdot \text{Tr} \left[ e^{-(\beta-\tau_n)\hat{H}_0} e^{\gamma s_n(n_{d\uparrow}-n_{d\downarrow})} \cdots e^{-(\tau_2-\tau_1)\hat{H}_0} e^{\gamma s_1(n_{d\uparrow}-n_{d\downarrow})} e^{-\tau_1\hat{H}_0} \right]. \quad (3.19)$$

### 3.3 Von der Spur zur Determinante

Im letzten Abschnitt haben wir das Ziel erreicht, die Zustandssumme ausschließlich als Funktion von Einteilchenoperatoren zu schreiben, denn nur solche enthalten der freie Hamiltonian  $\hat{H}_0$  und die Hilfsfelder. Wir führen eine kürzere Schreibweise ein

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_n=\pm 1} \int_0^{\beta} d\tau_1 \cdots \int_{\tau_{n-1}}^{\beta} d\tau_n \left(\frac{K}{2\beta}\right)^n \text{Tr} [U_n], \quad (3.20)$$

$$U_n(\{s_i, \tau_i\}) = \prod_{i=n}^1 e^{-\Delta\tau_i \hat{H}_0} e^{\gamma s_i(n_{d\uparrow}-n_{d\downarrow})}, \quad (3.21)$$

$$\Delta\tau_i = \begin{cases} \tau_{i+1} - \tau_i & \text{falls } i < n \\ \beta - \tau_n + \tau_1 & \text{falls } i = n \end{cases} \quad (3.22)$$

und betrachten die Exponentialoperatoren genauer. Der Hamiltonian des Systems enthält keine Terme mit gemischtem Spin, sodass wir die Spuren zerlegen können:

$$\text{Tr} [U_n] = \text{Tr} \left[ \prod_{i=n}^1 e^{-\Delta\tau_i \sum_{\sigma} \hat{H}_{0\sigma}} e^{\gamma s_i(n_{d\uparrow}-n_{d\downarrow})} \right] \quad (3.23)$$

$$= \text{Tr} \left[ \prod_{i=n}^1 \prod_{\sigma} e^{-\Delta\tau_i \hat{H}_{0\sigma}} e^{\gamma s_i(-1)^{\sigma} n_{d\sigma}} \right], \quad (3.24)$$

$$(-1)^{\sigma} = \begin{cases} 1 & \text{falls } \sigma = \uparrow \\ -1 & \text{falls } \sigma = \downarrow \end{cases} \quad (3.25)$$

$$\text{Tr} [U^{\uparrow} U^{\downarrow}] = \sum_{\{n_{i\uparrow}\}, \{n_{i\downarrow}\}} \langle \{n_{i\uparrow}\} \{n_{i\downarrow}\} | U^{\uparrow} U^{\downarrow} | \{n_{i\uparrow}\} \{n_{i\downarrow}\} \rangle \quad (3.26)$$

$$= \sum_{\{n_{i\uparrow}\}} \langle \{n_{i\uparrow}\} | U^{\uparrow} | \{n_{i\uparrow}\} \rangle \sum_{\{n_{i\downarrow}\}} \langle \{n_{i\downarrow}\} | U^{\downarrow} | \{n_{i\downarrow}\} \rangle \quad (3.27)$$

$$= \text{Tr} [U^{\uparrow}] \text{Tr} [U^{\downarrow}]. \quad (3.28)$$

Zudem betrachten wir den Matrix-Charakter des Hamiltonians, den wir bisher nur in skalarer Form gesehen haben. Unter Verwendung von Vektor- und Matrixmultiplikation kann man ihn

auch auf folgende Weise definieren:

$$\hat{H}_{0\sigma} = \sum_{i,j} \mathbf{c}_{i\sigma}^\dagger (h_0^\sigma)_{i,j} \mathbf{c}_{j\sigma}, \quad (3.29)$$

$$\mathbf{c}_{i\sigma} = \begin{cases} d_\sigma & \text{falls } i = 0 \\ c_{i\sigma} & \text{falls } i > 0 \end{cases} \quad (3.30)$$

$$h_0^\sigma = \begin{pmatrix} -\mu + \varepsilon_d + \frac{U}{2} & v & v & \cdots & v \\ v & \varepsilon_1 & & & \\ v & & \varepsilon_2 & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ v & & & & \varepsilon_{N_s-1} \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

Dabei ist  $N_s$  die Anzahl der Zustände im System. Analog können wir auch schreiben

$$\gamma_{s_i} (-1)^\sigma n_{d\sigma} = \sum_{i,j} \mathbf{c}_{i\sigma}^\dagger (v_{s_i}^\sigma)_{i,j} \mathbf{c}_{j\sigma}, \quad (3.32)$$

$$v_{s_i}^\sigma = \begin{pmatrix} \gamma_{s_i} (-1)^\sigma & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \quad (3.33)$$

Um die Spur in Gl. 3.20 zu berechnen, ist die Kenntnis der Eigenzustände des Systems erforderlich. Wie bereits erwähnt, ist dies für ein Vielteilchensystem in der Regel numerisch nicht umsetzbar. Wir suchen deshalb nach einer Möglichkeit, die Berechnung der Spur zu umgehen. Wenn es möglich ist, die Spur als Determinante zu schreiben,

$$\text{Tr} [U_n] = \prod_{\sigma} \det [\mathbb{1} + B^\sigma], \quad (3.34)$$

$$B^\sigma = \prod_{i=n}^1 e^{-\Delta\tau_i h_0^\sigma} e^{v_{s_i}^\sigma}, \quad (3.35)$$

ist unser Ziel erreicht, die Determinante ist exakt lösbar, da  $B$  keine Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren mehr enthält, sondern ausschließlich Zahlen. Wir beweisen nun, dass Gl. 3.34 gültig ist. Dazu führen wir zunächst den Formalismus der Slater-Determinanten ein. Ausgehend von Gl. 3.29 transformieren wir den Hamiltonian in eine diagonale Form:

$$\hat{H}_0 = \sum_x \lambda_{x,x} \gamma_x^\dagger \gamma_x, \quad (3.36)$$

$$\gamma_x = \sum_y U_{x,y}^\dagger c_y, \quad (3.37)$$

$$\gamma_x^\dagger = \sum_y c_y^\dagger U_{y,x}, \quad (3.38)$$

$$U^\dagger h_0 U = \lambda, \quad (3.39)$$

$$|\Psi\rangle := \gamma_{\alpha_1}^\dagger \gamma_{\alpha_2}^\dagger \cdots \gamma_{\alpha_{N_P}}^\dagger |0\rangle = \prod_{n=1}^{N_P} \left( \sum_x c_x^\dagger U_{x,\alpha_n} \right) |0\rangle \quad (3.40)$$

$$= \prod_{n=1}^{N_P} \left( \mathbf{c}^\dagger P \right)_n |0\rangle. \quad (3.41)$$

Die rechte Seite in der letzten Gl. wird als Slater-Determinante bezeichnet. Der  $N_P$ -Teilchen Zustand  $|\Psi\rangle$  wird durch  $P$  vollständig definiert, eine rechteckige Matrix mit  $N_s$ -Zeilen und  $N_P$ -Spalten. Sei nun  $T$  eine (anti-)hermitesche Hamilton Matrix. Slater-Determinanten besitzen diese für uns wichtigen Eigenschaften:

$$e^{\mathbf{c}^\dagger T \mathbf{c}} \prod_{n=1}^{N_P} (\mathbf{c}^\dagger P)_n |0\rangle = \prod_{n=1}^{N_P} (\mathbf{c}^\dagger e^T P)_n |0\rangle, \quad (3.42)$$

$$\langle \Psi | \tilde{\Psi} \rangle = \left\langle 0 \left| \prod_{n=1}^{N_P} (P^\dagger \mathbf{c})_n \prod_{\tilde{n}=1}^{N_P} (\mathbf{c}^\dagger \tilde{P})_{\tilde{n}} \right| 0 \right\rangle = \det [P^\dagger \tilde{P}]. \quad (3.43)$$

Wir beginnen mit dem Beweis der ersten Eigenschaft. Sei nun  $U^\dagger T U = \lambda$ . Dann gilt

$$e^{\mathbf{c}^\dagger T \mathbf{c}} \prod_{n=1}^{N_P} (\mathbf{c}^\dagger P)_n |0\rangle = e^{\gamma^\dagger \lambda \gamma} \prod_{n=1}^{N_P} (\gamma^\dagger U P)_n |0\rangle \quad (3.44)$$

$$= \sum_{y_1, \dots, y_{N_P}} e^{\sum_x \lambda_{x,x} \gamma_x^\dagger \gamma_x} \gamma_{y_1}^\dagger \dots \gamma_{y_{N_P}}^\dagger |0\rangle (UP)_{y_1,1} \dots \dots (UP)_{y_{N_P},N_P} \quad (3.45)$$

$$= \sum_{y_1, \dots, y_{N_P}} e^{\sum_x \lambda_{x,x} (\sum_{n=1}^{N_P} \delta_{x,y_n})} \gamma_{y_1}^\dagger \dots \gamma_{y_{N_P}}^\dagger |0\rangle (UP)_{y_1,1} \dots \dots (UP)_{y_{N_P},N_P} \quad (3.46)$$

$$= \sum_{y_1, \dots, y_{N_P}} e^{\lambda_{y_1,y_1}} \gamma_{y_1}^\dagger \dots e^{\lambda_{y_{N_P},y_{N_P}}} \gamma_{y_{N_P}}^\dagger |0\rangle (UP)_{y_1,1} \dots \dots (UP)_{y_{N_P},N_P} \quad (3.47)$$

$$= \prod_{n=1}^{N_P} (\gamma^\dagger e^\lambda U P)_n |0\rangle \quad (3.48)$$

$$= \prod_{n=1}^{N_P} (\mathbf{c}^\dagger U^\dagger e^\lambda U P)_n |0\rangle \quad (3.49)$$

$$= \prod_{n=1}^{N_P} (\mathbf{c}^\dagger e^T P)_n |0\rangle \quad (3.50)$$

In der 3. Zeile haben wir die statt der Besetzungszahloperatoren  $\hat{n}_x = \gamma_x^\dagger \gamma_x$  Deltafunktionen eingesetzt, da nur die Zustände besetzt sind, welche aus dem Vakuum Zustand  $|0\rangle$  durch  $\gamma_{y_1}^\dagger \dots \gamma_{y_{N_P}}^\dagger$  erzeugt werden. Anschließend haben wir Exponentialfunktion der Summe in Faktoren zerlegt, deren Exponenten Zahlen sind, keine Matrizen, und beliebig verschoben werden können. Auf den Beweis der zweiten Eigenschaft verzichten wir an dieser Stelle [21].

Wir gehen zurück und setzen an die rechte Seite der Gl. 3.34 an. Zunächst schreiben wir die Determinante als Summe permutierender Matrixelemente. Die Kronecker-Deltas stehen für

die Elemente der zu  $B$  addierten Einheitsmatrix.

$$\begin{aligned}
\det [\mathbf{1} + B] &= \sum_{\pi} (-1)^{\pi} \left( \delta_{\pi(1),1} + B_{\pi(1),1} \right) \cdots \left( \delta_{\pi(N_s),N_s} + B_{\pi(N_s),N_s} \right) \quad (3.51) \\
&= \sum_{\pi} (-1)^{\pi} \delta_{\pi(1),1} \cdots \delta_{\pi(N_s),N_s} + \\
&\quad + \sum_x \sum_{\pi} (-1)^{\pi} B_{\pi(x),x} \delta_{\pi(1),1} \cdots \delta_{\pi(x-1),x-1} \delta_{\pi(x+1),x+1} \cdots \delta_{\pi(N_s),N_s} + \\
&\quad + \sum_{y>x} \sum_{\pi} (-1)^{\pi} B_{\pi(x),x} B_{\pi(y),y} \delta_{\pi(1),1} \cdots \delta_{\pi(x-1),x-1} \delta_{\pi(x+1),x+1} \cdots \\
&\quad \cdots \delta_{\pi(y-1),y-1} \delta_{\pi(y+1),y+1} \cdots \delta_{\pi(N_s),N_s} + \\
&\quad + \cdots + \sum_{\pi} (-1)^{\pi} B_{\pi(1),1} \cdots B_{\pi(N_s),N_s} \quad (3.52)
\end{aligned}$$

Wir benutzen die Projektionsmatrizen  $P$ , die uns schon bei den Slater-Determinanten begegnet sind, um die Determinante einfacher schreiben zu können. Es gilt

$$P_i^x = \delta_{i,x}, \quad (3.53)$$

$$P^{x\dagger} B P^x = B_{x,x}, \quad (3.54)$$

$$P_{i,j}^{x,y} = \delta_{i,x} \delta_{j,0} + \delta_{i,y} \delta_{j,1}, \quad (3.55)$$

$$P^{x,y\dagger} B P^{x,y} = \begin{pmatrix} B_{x,x} & B_{x,y} \\ B_{y,x} & B_{y,y} \end{pmatrix}, \quad (3.56)$$

$$\det [P^{x,y\dagger} B P^{x,y}] = B_{x,x} B_{y,y} - B_{x,y} B_{y,x}, \quad (3.57)$$

⋮

Wir sehen, dass sich Gl. 3.52 mit Hilfe dieser Projektionsmatrizen deutlich einfacher schreiben lässt:

$$\det [\mathbf{1} + B] = 1 + \sum_x \det [P^{x\dagger} B P^x] + \sum_{y>x} \det [P^{x,y\dagger} B P^{x,y}] + \cdots + \det [\mathbf{1} B \mathbf{1}]. \quad (3.58)$$

Diese Determinanten können leicht in Erwartungswerte umgeformt werden. Wir führen dies explizit für die 2. Ordnung von  $B$  durch, andere Ordnungen können analog berechnet werden. Wir formulieren zuerst die Zustände zu Slater-Determinanten um, und verwenden dann nacheinander Gl. 3.42 und 3.43.

$$\left\langle 0 \left| c_x c_y U c_y^\dagger c_x^\dagger \right| 0 \right\rangle = \left\langle 0 \left| \prod_{n=1}^2 \left( P^{x,y\dagger} \mathbf{c} \right)_n U \prod_{n=1}^2 \left( \mathbf{c}^\dagger P^{x,y} \right)_n \right| 0 \right\rangle \quad (3.59)$$

$$= \left\langle 0 \left| \prod_{n=1}^2 \left( P^{x,y\dagger} \mathbf{c} \right)_n \prod_{n=1}^2 \left( \mathbf{c}^\dagger B P^{x,y} \right)_n \right| 0 \right\rangle \quad (3.60)$$

$$= \det [P^{x,y\dagger} B P^{x,y}]. \quad (3.61)$$

Wir erhalten also aus Gl. 3.58

$$\det [\mathbf{1} + B] = 1 + \sum_x \left\langle 0 \left| c_x U c_x^\dagger \right| 0 \right\rangle + \sum_{y>x} \left\langle 0 \left| c_x c_y U c_y^\dagger c_x^\dagger \right| 0 \right\rangle + \cdots \quad (3.62)$$

$$= \text{Tr} [U], \quad (3.63)$$

was zu beweisen war. Die Vielteilchen-Spur der Matrix  $U$  kann durch eine Determinante ausgedrückt werden. Die Zustandssumme hat nun die Form

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_n=\pm 1} \int_0^{\beta} d\tau_1 \cdots \int_{\tau_{n-1}}^{\beta} d\tau_n \left(\frac{K}{2\beta}\right)^n \prod_{\sigma} \det[\mathbb{1} + B^{\sigma}], \quad (3.64)$$

$$B^{\sigma} = \prod_{i=n}^1 B_n^{\sigma} = \prod_{i=n}^1 e^{-\Delta\tau_i h_0^{\sigma}} e^{v_{s_i}^{\sigma}}. \quad (3.65)$$

### 3.4 Ersatzmatrix

Bislang können wir die Zustandssumme durch Berechnung der Determinante einer  $N_s \times N_s$ -Matrix lösen, welche wiederum durch ein  $n$ -faches Produkt gebildet wird bei  $n$ -ter Störungsordnung. Im nächsten Schritt zeigen wir, dass wir die Matrix  $\mathbb{1} + B^{\sigma}$  auch durch eine größere Matrix  $O^{\sigma}$  ersetzen können. Warum wir dies machen, erklären wir im nächsten Abschnitt dieses Kapitels. Die Matrix  $O^{\sigma}$  hat die Form

$$O^{\sigma} = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{N_s} & & & & & & B_1^{\sigma} \\ -B_2^{\sigma} & \mathbb{1}_{N_s} & & & & & \\ & -B_3^{\sigma} & \mathbb{1}_{N_s} & & & & \\ & & \ddots & \ddots & & & \\ & & & \ddots & \ddots & & \\ & & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & & -B_n^{\sigma} & \mathbb{1}_{N_s} \end{pmatrix}_{nN_s \times nN_s}. \quad (3.66)$$

Bevor wir die Determinante von  $O^{\sigma}$  berechnen, vereinbaren wir, den Spin-Index zu vernachlässigen, da die Rechnung für Spin-Up und Spin-Down identisch ist. Wir beginnen mit einer Vorüberlegung zur Matrix  $A = O - \mathbb{1}$ , welche wir als  $n \times n$ -Blockmatrix betrachten. Die Vorzeichen der Blöcke  $B_2$  bis  $B_n$  sind in die Blöcke selbst multipliziert, sodass jeder Block ein positives Vorzeichen hat. Aufgrund des Nebendiagonal-Charakters der Matrix  $O$  gilt

$$A_{xy} = B_x \delta_{x,(y+1)\%n} \quad (3.67)$$

$$(A^m)_{xy} = \sum_{i_1=1}^n \cdots \sum_{i_{m-1}=1}^n A_{xi_1} A_{i_1 i_2} \cdots A_{i_{m-1} y} \quad (3.68)$$

$$= \sum_{i_1=1}^n \cdots \sum_{i_{m-1}=1}^n \delta_{x,(i_1+1)\%n} \delta_{i_1,(i_2+1)\%n} \cdots \delta_{i_{m-1},(y+1)\%n} B_x B_{i_1} \cdots B_{i_{m-1}} \quad (3.69)$$

$$= \sum_{i_1=1}^n \cdots \sum_{i_{m-2}=1}^n \delta_{x,(i_1+1)\%n} \delta_{i_1,(i_2+1)\%n} \cdots \delta_{i_{m-2},(y+2)\%n} B_x B_{i_1} \cdots \\ \cdots B_{i_{m-2}} B_{(y+1)\%n} \quad (3.70)$$

$\vdots$

$$= \delta_{x,(y+m)\%n} B_{(y+m)\%n} \cdots B_{(y+2)\%n} B_{(y+1)\%n} \quad (3.71)$$

Das Symbol  $\%$  bezeichnet die Modulo Funktion. Damit berechnen wir folgende Spur

$$\text{Tr}[A^m] = \delta_{x,(x+m)\%n} \text{Tr} [B_{(y+m)\%n} \cdots B_{(y+2)\%n} B_{(y+1)\%n}] \quad (3.72)$$

$$= \sum_r \delta_{rn,mn} \text{Tr} [(B_n \cdots B_1)^r] (-1)^{r(n-1)}. \quad (3.73)$$

Der Faktor  $n$  kommt von  $n$  gleichen Diagonal-Blöcken, über welche die Spur gebildet wird. Die Summe über  $\delta_{rn,m}$  erfasst den periodischen Charakter der alten Deltafunktionen  $\delta_{x,(x+m)\%n}, \dots$ , und der Faktor  $(-1)^{r(n-1)}$  berücksichtigt das negative Vorzeichen der  $B_{i \neq 1}$ , welches wir wieder aus den  $B$ -Blöcken ausklammern. Nun können wir die Determinante der Matrix  $O$  berechnen zu [21]

$$\det [O] = e^{\text{Tr} \ln[\mathbb{1}+A]} \quad (3.74)$$

$$= e^{\text{Tr} \left[ \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^{m+1}}{m} A^m \right]} \quad (3.75)$$

$$= e^{\sum_{m=1}^{\infty} \text{Tr}[A^m]} \quad (3.76)$$

$$= e^{\sum_{m=1}^{\infty} \sum_{r=1}^{\infty} \delta_{rn,m} \frac{n}{m} (-1)^{m+1} (-1)^{r(n-1)} \text{Tr}[(B_n \cdots B_1)^r]} \quad (3.77)$$

$$= e^{\sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r} (-1)^{rn+m-r+1} \text{Tr}[(B_n \cdots B_1)^r]} \quad (3.78)$$

$$= e^{\sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^{-r+1}}{r} \text{Tr}[(B_n \cdots B_1)^r]} \quad (3.79)$$

$$= e^{\sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^{r+1}}{r} \text{Tr}[(B_n \cdots B_1)^r]} \quad (3.80)$$

$$= e^{\text{Tr} \ln[\mathbb{1}+B_n \cdots B_1]} \quad (3.81)$$

$$= \det [\mathbb{1} + B_n \cdots B_1]. \quad (3.82)$$

Wir haben eine Reihenentwicklung der Logarithmusfunktion dabei 2-mal verwendet. Den Exponenten von  $-1$  konnten wir manipulieren auf Grund der Tatsache, dass es bei Potenzen von  $-1$  nur auf Gerad- oder Ungeradzahligkeit des Exponenten ankommt. Somit ist bewiesen, dass wir die Determinante  $\det [\mathbb{1} + B^\sigma]$  durch  $\det [O^\sigma]$  in der Form aus Gl. 3.66 ersetzen können. Wir schreiben die Zustandssumme

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_n=\pm 1} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_{\tau_{n-1}}^\beta d\tau_n \left( \frac{K}{2\beta} \right)^n \prod_{\sigma} \det [O^\sigma]. \quad (3.83)$$

### 3.5 Inverse Green Funktion

Wie wir später zeigen werden, besteht eine Relation zwischen der Matrix  $O$  und der Green-funktionsmatrix

$$G = \begin{pmatrix} G(\tau_1, \tau_1) & G(\tau_1, \tau_2) & \cdots & G(\tau_1, \tau_n) \\ G(\tau_2, \tau_1) & G(\tau_2, \tau_2) & \cdots & G(\tau_2, \tau_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G(\tau_n, \tau_1) & G(\tau_n, \tau_2) & \cdots & G(\tau_n, \tau_n) \end{pmatrix}_{nN_s \times nN_s}, \quad (3.84)$$

$$G(\tau_i, \tau_j) = \begin{pmatrix} G_{dd}(\tau_i, \tau_j) & G_{dk_1}(\tau_i, \tau_j) & \cdots & G_{dk_{N_s-1}}(\tau_i, \tau_j) \\ G_{k_1d}(\tau_i, \tau_j) & G_{k_1k_1}(\tau_i, \tau_j) & \cdots & G_{k_1k_{N_s-1}}(\tau_i, \tau_j) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{k_{N_s-1}d}(\tau_i, \tau_j) & G_{k_{N_s-1}k_1}(\tau_i, \tau_j) & \cdots & G_{k_{N_s-1}k_{N_s-1}}(\tau_i, \tau_j) \end{pmatrix}. \quad (3.85)$$

Bevor wir zu Eigenschaften von  $G$  kommen, wenden wir uns zeitabhängigen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren im Heisenberg Bild zu. Für die Zeitentwicklungsoperatoren verwenden wir erneut die Matrizendarstellung für eine allgemeine Hamilton-Matrix  $A$ :

$$c_x(\tau) = e^{\tau \mathbf{c}^\dagger \mathbf{A} \mathbf{c}} c_x e^{-\tau \mathbf{c}^\dagger \mathbf{A} \mathbf{c}}. \quad (3.86)$$

Dann gilt für die zeitliche Ableitung

$$\frac{\partial c_x(\tau)}{\partial \tau} = e^{\tau \mathbf{c}^\dagger A \mathbf{c}} \left[ \mathbf{c}^\dagger A \mathbf{c}, c_x \right] e^{-\tau \mathbf{c}^\dagger A \mathbf{c}} \quad (3.87)$$

$$= - \sum_z A_{x,z} c_z(\tau). \quad (3.88)$$

Im letzten Schritt haben wir die Kommutationsregeln der Operatoren verwendet und die Zeitabhängigkeit von Operatoren nach Gl. 3.86 berücksichtigt. Die Differentialgleichung wird erfüllt durch den Ansatz

$$c_x(\tau) = \left( e^{-A\tau} \mathbf{c} \right)_x, \quad (3.89)$$

$$c_x^\dagger(\tau) = \left( \mathbf{c}^\dagger e^{A\tau} \right)_x, \quad (3.90)$$

wie man leicht überprüfen kann. Bei entsprechender Wahl der Matrix  $A = h_0$  können wir folgern

$$c_x(\tau_1) = U^{-1}(\tau_1, \tau_2) c_x U(\tau_1, \tau_2) = (B(\tau_1, \tau_2) \mathbf{c})_x \quad (3.91)$$

$$c_y^\dagger(\tau_2) = U^{-1}(\tau_2, \tau_1) c_y^\dagger U(\tau_2, \tau_1) = \left( \mathbf{c}^\dagger B^{-1}(\tau_2, \tau_1) \right)_y \quad (3.92)$$

Wir sehen, dass auch  $B$  eine Art Zeitentwicklungsoperator ist, allerdings mit anderer Syntax als  $U$ . Mit Hilfe der beiden letzten Gleichungen, können wir eine Reihe von Relationen zwischen  $G$  und  $B$  aufstellen. Wir beginnen mit einer zweizeitigen Green Funktion bei  $\tau_1 > \tau_2$

$$G(\tau_1, \tau_2)_{x,y} = \left\langle T c_x(\tau_1) c_y^\dagger(\tau_2) \right\rangle = \left\langle c_x(\tau_1) c_y^\dagger(\tau_2) \right\rangle \quad (3.93)$$

$$= \frac{\text{Tr} \left[ U(\beta, \tau_1) c_x U(\tau_1, \tau_2) c_y^\dagger U(\tau_2, 0) \right]}{\text{Tr} [U(\beta, 0)]} \quad (3.94)$$

$$= \frac{\text{Tr} \left[ U(\beta, \tau_2) U^{-1}(\tau_1, \tau_2) c_x U(\tau_1, \tau_2) c_y^\dagger U(\tau_2, 0) \right]}{\text{Tr} [U(\beta, 0)]} \quad (3.95)$$

$$= \frac{\text{Tr} \left[ U(\beta, \tau_2) (B(\tau_1, \tau_2) \mathbf{c})_x c_y^\dagger U(\tau_2, 0) \right]}{\text{Tr} [U(\beta, 0)]} \quad (3.96)$$

$$= [B(\tau_1, \tau_2) G(\tau_2, \tau_2)]_{x,y} \quad (3.97)$$

Dabei haben wir die Tatsache verwendet, dass  $B$  eine Matrix ist, kein Operator, und deshalb aus der Spur nach vorne gezogen werden kann. Für  $\tau_1 < \tau_2$  kommen wir auf

$$G(\tau_1, \tau_2)_{x,y} = - \left\langle c_y^\dagger(\tau_2) c_x(\tau_1) \right\rangle \quad (3.98)$$

$$= - \frac{\text{Tr} \left[ U(\beta, \tau_2) c_y^\dagger U(\tau_2, \tau_1) c_x U(\tau_1, 0) \right]}{\text{Tr} [U(\beta, 0)]} \quad (3.99)$$

$$= - \frac{\text{Tr} \left[ U(\beta, \tau_1) U^{-1}(\tau_2, \tau_1) c_y^\dagger U(\tau_2, \tau_1) c_x U(\tau_1, 0) \right]}{\text{Tr} [U(\beta, 0)]} \quad (3.100)$$

$$= - \frac{\text{Tr} \left[ U(\beta, \tau_1) \left( \mathbf{c}^\dagger B^{-1}(\tau_2, \tau_1) \right)_y c_x U(\tau_1, 0) \right]}{\text{Tr} [U(\beta, 0)]} \quad (3.101)$$

$$= - \left[ (\mathbf{1} - G(\tau_1, \tau_1)) B^{-1}(\tau_2, \tau_1) \right]_{x,y}. \quad (3.102)$$

Die nächste Verknüpfung zwischen  $G$  und  $B$  betrifft gleichzeitige Green Funktionen

$$\begin{aligned} B(\tau_1, \tau_2) G(\tau_2, \tau_2) B^{-1}(\tau_1, \tau_2) &= B(\tau_1, \tau_2) \left\langle U(\beta, \tau_2) c_x c_y^\dagger U(\tau_2, 0) \right\rangle B^{-1}(\tau_1, \tau_2) \\ &= \left\langle U(\beta, \tau_2) U^{-1}(\tau_1, \tau_2) c_x U(\tau_1, \tau_2) U^{-1}(\tau_1, \tau_2) \right. \\ &\quad \left. c_y^\dagger U(\tau_1, \tau_2) U(\tau_2, 0) \right\rangle \end{aligned} \quad (3.103)$$

$$= \left\langle U(\beta, \tau_1) c_x c_y^\dagger U(\tau_1, 0) \right\rangle \quad (3.104)$$

$$= G(\tau_1, \tau_1). \quad (3.105)$$

Im 2. Schritt haben wir die  $B$ -Matrizen zu den Erzeugern und Vernichtern verschoben und Gl. 3.91 sowie 3.92 verwendet, und danach die Zeitentwicklungsoperatoren zusammengefasst. Um noch eine 4. Relation herzuleiten, berechnen wir den Mittelwert einer allgemeinen Observablen  $\hat{O} = \mathbf{c}^\dagger A \mathbf{c}$

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\text{Tr} [U(\beta, \tau) \hat{O} U(\tau, 0)]}{\text{Tr} [U(\beta, 0)]} \Big|_{\eta=0} \quad (3.106)$$

$$= \frac{\partial}{\partial \eta} \ln \text{Tr} [U(\beta, \tau) e^{\eta \hat{O}} U(\tau, 0)] \Big|_{\eta=0} \quad (3.107)$$

$$= \frac{\partial}{\partial \eta} \ln \det [\mathbf{1} + B(\beta, \tau) e^{\eta A} B(\tau, 0)] \Big|_{\eta=0} \quad (3.108)$$

$$= \frac{\partial}{\partial \eta} \text{Tr} \ln [\mathbf{1} + B(\beta, \tau) e^{\eta A} B(\tau, 0)] \Big|_{\eta=0} \quad (3.109)$$

$$= \text{Tr} [B(\tau, 0) [\mathbf{1} + B(\beta, 0)]^{-1} B(\beta, \tau) A] \quad (3.110)$$

$$= \text{Tr} \left[ \frac{\mathbf{1} + B(\tau, 0) B(\beta, \tau)}{\mathbf{1} + B(\tau, 0) B(\beta, \tau)} B(\tau, 0) [\mathbf{1} + B(\beta, 0)]^{-1} B(\beta, \tau) A \right] \quad (3.111)$$

$$= \text{Tr} \left[ \frac{B(\tau, 0) + B(\tau, 0) B(\beta, 0)}{\mathbf{1} + B(\tau, 0) B(\beta, \tau)} [\mathbf{1} + B(\beta, 0)]^{-1} B(\beta, \tau) A \right] \quad (3.112)$$

$$= \text{Tr} \left[ \frac{B(\tau, 0) B(\beta, \tau)}{\mathbf{1} + B(\tau, 0) B(\beta, \tau)} A \right] \quad (3.113)$$

$$= \text{Tr} \left[ \left( \mathbf{1} - \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{1} + B(\tau, 0) B(\beta, \tau)} \right) A \right] \quad (3.114)$$

Dieses Ergebnis verwenden wir, um eine Verknüpfung von  $B$  mit gleichzeitigen Green Funktionen zu bestimmen

$$G(\tau_1, \tau_1)_{x,y} = \left\langle c_x(\tau_1) c_y^\dagger(\tau_1) \right\rangle \quad (3.115)$$

$$= \left\langle \mathbf{1} - c_y^\dagger(\tau) c_x(\tau) \right\rangle \quad (3.116)$$

$$= 1 - \text{Tr} \left[ \left( \mathbf{1} - \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{1} + B(\tau, 0) B(\beta, \tau)} \right)_{x,y} \right] \quad (3.117)$$

$$= (\mathbf{1} + B(\tau, 0) B(\beta, \tau))_{x,y}^{-1}. \quad (3.118)$$

Nun haben wir die nötigen Relationen angesammelt, um die Multiplikation  $OG$  durchführen zu können. Wir zeigen exemplarisch den Fall für 2. Störungsordnung, d.h.  $O$  ist eine  $2 \times 2$

Blockmatrix.

$$OG = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & B(\tau_1, 0) \\ -B(\tau_2, \tau_1) & \mathbf{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G(\tau_1, \tau_1) & G(\tau_1, \tau_2) \\ G(\tau_2, \tau_1) & G(\tau_2, \tau_2) \end{pmatrix}, \quad (3.119)$$

$$(OG)_{0,0} = G(\tau_1, \tau_1) + B(\tau_1, 0)G(\tau_2, \tau_1) \quad (3.120)$$

$$= (\mathbf{1} + B(\tau_1, 0)B(\tau_2, \tau_1))G(\tau_1, \tau_1) \quad (3.121)$$

$$= G^{-1}(\tau_1, \tau_1)G(\tau_1, \tau_1) = \mathbf{1}. \quad (3.122)$$

Die weiteren Matrixelemente berechnen sich zu

$$(OG)_{0,1} = G(\tau_1, \tau_2) + B(\tau_1, 0)G(\tau_2, \tau_2) \quad (3.123)$$

$$= -(\mathbf{1} - G(\tau_1, \tau_1))B^{-1}(\tau_2, \tau_1) + \\ + B(\tau_1, 0)B(\tau_2, \tau_1)G(\tau_1, \tau_1)B^{-1}(\tau_2, \tau_1) \quad (3.124)$$

$$= \left(-G^{-1}(\tau_1, \tau_1) + \mathbf{1} + B(\tau_1, 0)B(\tau_2, \tau_1)\right) \cdot \\ \cdot G(\tau_1, \tau_1)B^{-1}(\tau_2, \tau_1) \quad (3.125)$$

$$= \left(-G^{-1}(\tau_1, \tau_1) + G^{-1}(\tau_1, \tau_1)\right)G(\tau_1, \tau_1)B^{-1}(\tau_2, \tau_1) \quad (3.126)$$

$$= 0, \quad (3.127)$$

$$(OG)_{1,0} = -B(\tau_2, \tau_1)G(\tau_1, \tau_1) + G(\tau_2, \tau_1) \quad (3.128)$$

$$= -G(\tau_2, \tau_1) + G(\tau_2, \tau_1) = 0. \quad (3.129)$$

Wir berechnen noch das letzte Matrixelement und erhalten

$$(OG)_{1,1} = -B(\tau_2, \tau_1)G(\tau_1, \tau_2) + G(\tau_2, \tau_2) \quad (3.130)$$

$$= B(\tau_2, \tau_1)(\mathbf{1} - G(\tau_1, \tau_1))B^{-1}(\tau_2, \tau_1) + G(\tau_2, \tau_2) \quad (3.131)$$

$$= \mathbf{1} - G(\tau_2, \tau_2) + G(\tau_2, \tau_2) = \mathbf{1}, \quad (3.132)$$

$$OG = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & \mathbf{1} \end{pmatrix} \quad (3.133)$$

$$O = G^{-1}. \quad (3.134)$$

Gl. 3.134 ist auch für andere Matrixengrößen bzw. Störungsordnungen gültig [21]. Wir erkennen, dass die Einführung der Matrix  $O$ , welche zunächst das Berechnen einer um den Faktor  $N_s$  größeren Determinante nötig macht, die Lösung der Zustandssumme direkt mit der Green Funktion verknüpft:

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_n=\pm 1} \int_0^{\beta} d\tau_1 \cdots \int_{\tau_{n-1}}^{\beta} d\tau_n \left(\frac{K}{2\beta}\right)^n \prod_{\sigma} \det \left[ \left(G_{\sigma}^{\{\tau_i, s_i\}}\right)^{-1} \right]. \quad (3.135)$$

### 3.6 Dyson Gleichung

Man muss beachten, dass in Gl. 3.135 die volle gestörte Green Funktion eingeht. In Abschnitt 2.3 haben wir dagegen nur die freie Green Funktion bestimmt. Unser Ziel ist es daher, die volle Green Funktion als Funktion der freien anzugeben. Eine solche Abhängigkeit wird als

Dyson Gleichung bezeichnet. Um eine Dyson Gleichung zu erhalten, betrachten wir die Matrix  $\tilde{O} = e^{-v}O$ . Spin Indizes sind zunächst unterdrückt.  $e^v$  ist definiert als Diagonalmatrix

$$e^v = \begin{pmatrix} e^{v_{s_1}} & & \\ & \ddots & \\ & & e^{v_{s_n}} \end{pmatrix}. \quad (3.136)$$

Durch einfache Matrizenmultiplikation erhalten wir

$$\tilde{O} = e^{-v}O = \begin{pmatrix} e^{-v_1} & & & & e^{-\Delta\tau_1 h_0} \\ e^{-\Delta\tau_2 h_0} & e^{-v_2} & & & \\ & e^{-\Delta\tau_3 h_0} & e^{-v_3} & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & e^{-\Delta\tau_n h_0} & e^{-v_n} \end{pmatrix} \quad (3.137)$$

Mit verschiedenen  $e^v$  erzeugte Matrizen  $O$  unterscheiden sich nur auf der Diagonalen voneinander. Die Differenz von  $O$  und  $O'$  lautet wegen dieser speziellen Form

$$\tilde{O} - \tilde{O}' = e^{-v} - e^{-v'}. \quad (3.138)$$

Damit gilt

$$\tilde{G} = \tilde{O}^{-1} = (\tilde{O}' + \tilde{O} - \tilde{O}')^{-1} \quad (3.139)$$

$$= \tilde{O}'^{-1} - \tilde{O}'^{-1} (\tilde{O} - \tilde{O}') \tilde{O}^{-1} \quad (3.140)$$

$$= \tilde{G}' - \tilde{G}' (e^{-v} - e^{-v'}) \tilde{G}. \quad (3.141)$$

Um wieder auf die Green Funktion zu kommen substituieren wir  $\tilde{G} = Ge^v$  bzw.  $\tilde{G}' = G'e^{v'}$  und erhalten

$$Ge^v = G'e^{v'} - G'e^{v'} (e^{-v} - e^{-v'}) Ge^v, \quad (3.142)$$

$$G = G' - G' + G'e^{v'}e^{-v} - G'e^{v'} (e^{-v} - e^{-v'}) G \quad (3.143)$$

$$= G' + G' (e^{v'}e^{-v} - \mathbf{1}) - G' (e^{v'}e^{-v} - \mathbf{1}) G \quad (3.144)$$

$$= G' + G'\Delta - G'\Delta G, \quad (3.145)$$

$$\Delta = e^{v'}e^{-v} - \mathbf{1}, \quad (3.146)$$

$$G = \frac{G' + G'\Delta}{\mathbf{1} + G'\Delta}. \quad (3.147)$$

Wir wählen nun im Speziellen als  $G'$  die freie Green Funktion  $G_0$  mit Störung  $e^{v'} = e^0 = \mathbf{1}$ . Die Dyson Gleichung der inversen Green Funktion erhält dann eine einfache Form wegen

$$\Delta = e^{-v} - \mathbf{1}, \quad (3.148)$$

$$G^{-1} = G_0^{-1} \frac{\mathbf{1} + G_0\Delta}{\mathbf{1} + \Delta} \quad (3.149)$$

$$= G_0^{-1} (e^v + G_0 (e^{-v} - \mathbf{1}) e^v) \quad (3.150)$$

$$= G_0^{-1} (e^v - G_0 (e^v - \mathbf{1})). \quad (3.151)$$

Die Berechnung der inversen Green Funktion ist rechenaufwendig, weshalb wir sie vermeiden wollen. Wir dividieren daher unsere Zustandssumme durch die des freien Systems  $Z_0$ .  $Z_0$  ist eine Zahl, so dass dieser Dividend sich bei der Bestimmung von thermodynamischen Mittelwerten kürzt. Auf der anderen Seite können wir auch  $Z_0$  analog zu  $Z$  entwickeln und erhalten mit der Definition von  $\Delta\tau_i$  in Gl. 3.22

$$Z_0 = \text{Tr} \left[ e^{-\beta\hat{H}_0} \right] \quad (3.152)$$

$$= \text{Tr} \left[ \prod_{i=n}^1 e^{-\Delta\tau_i\hat{H}_0} \right] \quad \forall n \in \{0, 1, \dots\} \quad (3.153)$$

$$= \prod_{\sigma} \det \left[ \left( G_{0\sigma}^{\{\tau_i\}} \right)^{-1} \right] \quad \forall \{\tau_i\}. \quad (3.154)$$

Wir können also in jeder  $\{\tau_i, s_i\}$ -Konfiguration den Faktor  $G_{0\sigma}^{-1}$  in Gl. 3.151 weglassen, da er sich bei Division  $\frac{Z}{Z_0}$  in Gl. 3.135 nach

$$\prod_{\sigma} \frac{\det \left[ \left( G_{\sigma}^{\{\tau_i, s_i\}} \right)^{-1} \right]}{\det \left[ \left( G_{0\sigma}^{\{\tau_i\}} \right)^{-1} \right]} = \prod_{\sigma} \frac{\det \left[ \left( G_{0\sigma}^{\{\tau_i\}} \right)^{-1} \left( e^{v_{\sigma}^{\{s_i\}}} - G_{0\sigma}^{\{\tau_i\}} \left( e^{v_{\sigma}^{\{s_i\}}} - \mathbf{1} \right) \right) \right]}{\det \left[ \left( G_{0\sigma}^{\{\tau_i\}} \right)^{-1} \right]} \quad (3.155)$$

$$= \prod_{\sigma} \det \left[ e^{v_{\sigma}^{\{s_i\}}} - G_{0\sigma}^{\{\tau_i\}} \left( e^{v_{\sigma}^{\{s_i\}}} - \mathbf{1} \right) \right] \quad (3.156)$$

kürzt. Nun betrachten wir die neue Matrix, deren Determinante berechnet werden muss. Wegen der Diagonalform von  $e^{v_{\sigma}^{\{s_i\}}}$  und der Tatsache, dass nur die dd-Elemente der Matrix  $e^{v_{\sigma}^{\{s_i\}}} - \mathbf{1}$  von 0 verschieden sind, hat sie die folgende Form. Wir bezeichnen dabei mit  $G_{ij}^{0\sigma}$  das  $i, j$ -Element der freien Greenfunktion im Spin  $\sigma$  Block.

$$e^{v_{\sigma}^{\{s_i\}}} - G_{0\sigma}^{\{\tau_i\}} \left( e^{v_{\sigma}^{\{s_i\}}} - \mathbf{1} \right) = \begin{pmatrix} e^{\gamma s_1(-1)^{\sigma}} (G_{dd}^{0\sigma}(\tau_1, \tau_1) - 1) & 0 & \dots & e^{\gamma s_n(-1)^{\sigma}} G_{dd}^{0\sigma}(\tau_1, \tau_n) & 0 & \dots \\ e^{\gamma s_1(-1)^{\sigma}} G_{k_1 d}^{0\sigma}(\tau_1, \tau_1) & -1 & \dots & e^{\gamma s_n(-1)^{\sigma}} G_{k_1 d}^{0\sigma}(\tau_1, \tau_n) & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots \\ e^{\gamma s_1(-1)^{\sigma}} G_{dd}^{0\sigma}(\tau_n, \tau_1) & 0 & \dots & e^{\gamma s_n(-1)^{\sigma}} (G_{dd}^{0\sigma}(\tau_n, \tau_n) - 1) & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots \\ e^{\gamma s_1(-1)^{\sigma}} G_{k_{N_s-1} d}^{0\sigma}(\tau_n, \tau_1) & 0 & \dots & e^{\gamma s_n(-1)^{\sigma}} G_{k_{N_s-1} d}^{0\sigma}(\tau_n, \tau_n) & \dots & -1 \end{pmatrix}_{nN_s \times nN_s} \quad (3.157)$$

Durch schrittweises Vertauschen von Zeilen und Spalten formen wir um zu der Matrix

$$A = \begin{pmatrix} e^{\gamma s_1(-1)^{\sigma}} (G_{dd}^{0\sigma}(\tau_1, \tau_1) - 1) & \dots & e^{\gamma s_n(-1)^{\sigma}} G_{dd}^{0\sigma}(\tau_1, \tau_n) & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e^{\gamma s_1(-1)^{\sigma}} G_{dd}^{0\sigma}(\tau_n, \tau_1) & \dots & e^{\gamma s_n(-1)^{\sigma}} (G_{dd}^{0\sigma}(\tau_n, \tau_n) - 1) & 0 & \dots & 0 \\ e^{\gamma s_1(-1)^{\sigma}} G_{k_1 d}^{0\sigma}(\tau_1, \tau_1) & \dots & e^{\gamma s_n(-1)^{\sigma}} G_{k_1 d}^{0\sigma}(\tau_1, \tau_n) & -1 & & \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \ddots & \\ e^{\gamma s_1(-1)^{\sigma}} G_{k_{N_s-1} d}^{0\sigma}(\tau_n, \tau_1) & \dots & e^{\gamma s_n(-1)^{\sigma}} G_{k_{N_s-1} d}^{0\sigma}(\tau_n, \tau_n) & & & -1 \end{pmatrix}_{nN_s \times nN_s} \quad (3.158)$$

Wir schreiben  $A$  in Blockform zu

$$A = - \begin{pmatrix} \mathbf{G}_{\mathbf{d}\mathbf{d}} & \mathbf{0} \\ \mathbf{G}_{\mathbf{k}\mathbf{d}} & -\mathbf{1} \end{pmatrix}. \quad (3.159)$$

Da Zeilen und Spalten stets paarweise vertauscht wurden, ändert sich das Vorzeichen der Determinante nicht. Es gilt also

$$\det \left[ e^{v_{\sigma}^{\{s_i\}}} - G_{0\sigma}^{\{\tau_i\}} \left( e^{v_{\sigma}^{\{s_i\}}} - \mathbf{1} \right) \right] = \det [A] = \pm \det [\mathbf{G}_{\mathbf{d}\mathbf{d}}]. \quad (3.160)$$

Mit Hilfe des Entwicklungssatzes für Determinanten lässt sich die letzte Gleichheit leicht zeigen. Dazu entwickeln wir  $\det [A]$  nach der letzten Spalte. Da alle Elemente bis auf das  $nN_s$ -te gleich 0 sind, erhalten wir lediglich einen Term, nämlich die Determinante des linken oberen  $(nN_s - 1) \times (nN_s - 1)$ -Blocks der Matrix multipliziert mit einem Faktor  $-1$ . Die resultierende Determinante entwickeln wir wieder nach der letzten Spalte. Dieses Verfahren wiederholen wir  $(nN_s - n)$ -mal, wobei wir jeweils nur einen Term erhalten. Der einzige Term bleibt  $\det [\mathbf{G}_{\mathbf{d}\mathbf{d}}]$  mit dem Faktor  $\pm 1$ . Das Vorzeichen hängt von der Zahl der Zustände  $N_s$  und der Ordnung  $n$  ab. Da wir zur Bestimmung von  $Z$  die zwei Determinanten mit unterschiedlichen  $\sigma$  multiplizieren, spielt dieses Vorzeichen keine Rolle.

Da in Gl. 3.151 nur die dd-Elemente von  $e^{v_{\sigma}^{\{s_i\}}}$  von 0 verschieden sind, gilt die Dyson Gleichung auch für  $G_{dd}$  statt der vollen  $G$  Matrix. Da die Determinante der  $\mathbf{G}_{\mathbf{d}\mathbf{d}}$  Matrix nach Gl. 3.160 zur Bestimmung der Zustandssumme ausreicht, reduzieren wir gegenüber Gl. 3.135 die Matrix der Green Funktion auf die dd-Elemente und erhalten mit Gl. 3.156

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_n=\pm 1} \int_0^{\beta} d\tau_1 \cdots \int_{\tau_{n-1}}^{\beta} d\tau_n \left( \frac{K}{2\beta} \right)^n \prod_{\sigma} \det \left[ N_{\sigma}^{-1} (\{\tau_i, s_i\}) \right], \quad (3.161)$$

$$N_{\sigma}^{-1} (\{\tau_i, s_i\}) = e^{v_{\sigma}^{\{s_i\}}} - G_{0\sigma}^{\{\tau_i\}} \left( e^{v_{\sigma}^{\{s_i\}}} - \mathbf{1} \right), \quad (3.162)$$

$$G_{0\sigma}^{\{\tau_i\}} = \begin{pmatrix} G_{dd}^{0\sigma}(\tau_1, \tau_1) & \cdots & G_{dd}^{0\sigma}(\tau_1, \tau_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{dd}^{0\sigma}(\tau_n, \tau_1) & \cdots & G_{dd}^{0\sigma}(\tau_n, \tau_n) \end{pmatrix}_{n \times n}, \quad (3.163)$$

$$e^{v_{\sigma}^{\{s_i\}}} = \begin{pmatrix} e^{\gamma(-1)^{\sigma} s_1} & & \\ & \ddots & \\ & & e^{\gamma(-1)^{\sigma} s_n} \end{pmatrix}_{n \times n}. \quad (3.164)$$

### 3.7 Äquivalenz zu weiteren Methoden

Bevor wir uns im nächsten Kapitel der numerischen Umsetzung des CTAUX Algorithmus in einer Monte Carlo Simulation zuwenden, stellen wir eine weitere Lösungsmethode des Problems der magnetischen Störstelle vor, die *Diagrammatic Determinantal Quantum Monte Carlo* Methode oder kurz DDQMC. Der Hamiltonian lautet

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}', \quad (3.165)$$

$$\hat{V}' = U (n_{d\uparrow} - 1/2) (n_{d\downarrow} - 1/2). \quad (3.166)$$

Die Coulomb Wechselwirkung  $\hat{V}'$  ist bis auf eine Konstante gleich der Formulierung im Anderson Modell in Gl. 1.4. Auch diese Methode bedient sich der Auxiliary Fields. Die Störung  $\hat{V}'$  wird ersetzt durch

$$\hat{V} = \frac{U}{2} \sum_{s=\pm 1} (n_{d\uparrow} - 1/2 - s\delta) (n_{d\downarrow} - 1/2 + s\delta) \quad (3.167)$$

welche wiederum bis auf eine Konstante  $V'$  gleicht. Auch hier bezeichnet man  $s$  als Auxiliary Spin. Ähnlich wie bei der CTAUX Methode führt man eine Störungsentwicklung durch, drückt einen Erwartungswert durch eine Determinante aus und erhält [22]

$$\begin{aligned} \frac{Z}{Z_0} &= \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\beta} d\tau_1 \sum_{i_1, s_1} \cdots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n \sum_{i_n, s_n} \left(-\frac{U}{2}\right)^n \prod_{\sigma} \det [M_{\sigma}(C_n)], \quad (3.168) \\ M_{\sigma}(C_n) &= \begin{pmatrix} G_{i_1, i_1}^0(\tau_1, \tau_1) - \alpha_{\sigma}(s_1) & \cdots & G_{i_1, i_n}^0(\tau_1, \tau_n) \\ G_{i_2, i_1}^0(\tau_2, \tau_1) & \cdots & G_{i_2, i_n}^0(\tau_2, \tau_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{i_n, i_1}^0(\tau_n, \tau_1) & \cdots & G_{i_n, i_n}^0(\tau_n, \tau_n) - \alpha_{\sigma}(s_n) \end{pmatrix}, \\ G_{i,j}^0(\tau_1, \tau_2) &= \langle T c_i^{\dagger}(\tau_1) c_j(\tau_2) \rangle_0, \\ \alpha_{\sigma}(s) &= \frac{1}{2} + \sigma\delta. \end{aligned}$$

Wir wollen nun zeigen, unter welchen Bedingungen beide Methoden äquivalent sind. Das sind sie, wenn Ihre Hamiltonians äquivalent sind, d.h. bis auf eine Konstante gleich. Mit Gl. 3.11 gilt

$$\hat{V} - \frac{K}{\beta} = -\frac{K}{2\beta} \sum_{s=\pm 1} \left(1 + (\cosh \alpha - 1) m_d^2\right), \quad (3.169)$$

$$\cosh \alpha - 1 = \frac{\beta U}{2K}. \quad (3.170)$$

Auch Gl. 3.167 können wir mit der Magnetisierung  $m_d = n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow}$  umformulieren zu

$$\hat{V} = \frac{U}{2} \sum_{s=\pm 1} \left( \left(\frac{1}{4} - \delta^2\right) - \frac{1}{2} m_d^2 \right) \quad (3.171)$$

$$= \frac{U}{2} \left(\frac{1}{4} - \delta^2\right) \sum_{s=\pm 1} \left(1 + \frac{1}{2(\delta^2 - \frac{1}{4})} m_d^2\right). \quad (3.172)$$

Den Term, in welchem  $s$  in 1. Potenz vorkommt, haben wir weggelassen, da er durch die Summierung wegfällt. Wir vergleichen Gl. 3.169 und 3.172. Beim Vergleich der Vorfaktoren der Summe und auch des Koeffizienten von  $m_d^2$  ergibt sich

$$-\frac{K}{2\beta} = \frac{U}{2} \left(\frac{1}{4} - \delta^2\right), \quad (3.173)$$

$$\iff \delta^2 = \frac{K}{\beta U} + \frac{1}{4} \quad (3.174)$$

Das bedeutet, dass bei entsprechender Wahl der Parameter  $K$  bzw.  $\delta$  die beiden Methoden äquivalent sind. Es müssen somit nicht nur die gemessenen Mittelwerte der beiden Algorithmen innerhalb der Fehlergrenzen miteinander übereinstimmen, sondern auf Grund der Äquivalenz auch das mittlere Vorzeichen und die Autokorrelationszeit [23].

Wie schon zu Beginn dieses Kapitels erwähnt wurde, gleicht die hier vorgestellte Continuous Time Methode der herkömmlichen Hirsch-Fye Methode [HFQMC] bis auf die Aufhebung der Zeitdiskretisierung. Bei HFQMC stehen also weniger  $\{\tau_i, s_i\}$ -Konfigurationen zur Verfügung, die aber eine Teilmenge der Konfigurationen in CTAUX sind. Durch die Beschränkungen, in CTAUX nur eine konstante Zahl an Vertices zu erlauben, deren Zeiten  $\tau_i$  äquidistant im Intervall  $[0, \beta]$  zu verteilen und als Konfigurationsänderungen nur Flips der Spins  $s_i$  zuzulassen, kann die CTAUX Methode auf HFQMC reduziert werden. Auch ohne diese Beschränkungen sind beide Methoden äquivalent, wenn die Störungsordnung in beiden gegen  $\infty$  geht [23].

Wir haben gezeigt, unter welchen Bedingungen die 3 Algorithmen zur Lösung magnetischer Störstellenprobleme, CTAUX, DDQMC und HFQMC, äquivalent sind. Im Folgenden Teil dieser Arbeit befassen wir uns wieder ausschließlich mit der Continuous Time Auxiliary Field Methode.

## 4 Monte Carlo Simulation

Ein Blick zurück auf Gl. 3.161 zeigt uns, dass es unendlich viele  $\{\tau_i, s_i\}$ -Konfigurationen gibt. Es ist also unmöglich, den kompletten Konfigurationsraum  $\Omega$  zur Messung von Observablen  $O$  in der Form

$$\langle O \rangle_P = \int_{\Omega} dx P(x) O(x) \quad (4.1)$$

zu durchlaufen. Daher machen wir Gebrauch von einer stochastischen Methode, der sogenannten Monte Carlo Simulation.

### 4.1 Markov Ketten

Eine Monte Carlo Simulation erzeugt eine Kette von  $N$  Konfigurationen  $x_i$ , welche ihrem statistischen Gewicht entsprechend auftreten, d. h.

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x_i - x) = P(x). \quad (4.2)$$

Der gemessene Mittelwert der Observablen  $O$  in der Simulation lautet dann

$$X := \langle O \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O(x_i) \quad (4.3)$$

und ist gaussverteilt um den tatsächlichen Mittelwert  $\langle \bar{O} \rangle$  mit einer Breite von  $\sigma$ ,

$$P(X) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(X - \langle \bar{O} \rangle)^2}{2\sigma^2}}, \quad (4.4)$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{N} \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O^2(x_i) - \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O(x_i) \right)^2 \right). \quad (4.5)$$

Diese Verteilung  $P(X)$  entspricht dem Zentralen Grenzwertsatz und gilt für große  $N$  und statistisch unabhängige  $O(x_i)$  [24]. Unser Ziel ist es nun, die gemäß Gl. 4.2 verteilten Konfigurationen  $x_i$  zu erzeugen. Wir führen das Konzept der Markov Ketten ein, in welchem eine Konfiguration durch Modifikation ihrer direkt vorhergehenden Konfiguration gebildet wird, unabhängig von weiter zurückliegenden Konfigurationen. Mit der Übergangswahrscheinlichkeit  $T_{y,x}$  von einer Konfiguration  $x$  nach  $y$  lautet die Mastergleichung für die zeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$P_{t+1}(y) = \sum_x T_{y,x} P_t(x). \quad (4.6)$$

Da die Konfiguration  $x$  mit Wahrscheinlichkeit 1 in irgendeine Konfiguration  $y$  übergehen muss gilt

$$\sum_y T_{y,x} = 1, \quad (4.7)$$

und da es sich bei  $T$  um eine Wahrscheinlichkeit handelt, gilt auch  $T_{y,x} \geq 0$ . Zudem muss sicher gestellt sein, dass die Markov Kette jede Konfiguration erreichen kann, bzw.

$$\forall_{x,y} \exists_s (T^s)_{x,y} > 0, \quad (4.8)$$

was auch als Ergodizität bezeichnet wird. Die letzte Bedingung an die Markov Kette ist ein spezieller Fall der Mastergleichung. Die gewünschte Verteilung  $P_t = P$  soll wieder in  $P$  übergehen,

$$\sum_x T_{y,x} P(x) = P(y). \quad (4.9)$$

Diese Bedingung heißt auch Stationarität. Sie ist automatisch erfüllt, wenn  $T$  in detaillierter Balance ist, d. h.

$$T_{y,x} P(x) = T_{x,y} P(y). \quad (4.10)$$

Zum Beweis führen wir auf beiden Seiten eine Summation über  $x$  durch, verwenden Gl. 4.7 und zeigen, dass auch Gl. 4.9 erfüllt ist:

$$\sum_x T_{y,x} P(x) = \sum_x T_{x,y} P(y), \quad (4.11)$$

$$\sum_x T_{y,x} P(x) = P(y). \quad (4.12)$$

Erzeugt man eine Markov Kette von  $n$  Konfigurationen  $x_1, \dots, x_n$  mit der Vorschrift  $P(x_n \rightarrow x_{n+1}) = T_{x_{n+1}, x_n}$ , so sind im Limes  $n \rightarrow \infty$  die Konfigurationen gemäß  $P(x_i)$  verteilt und unabhängig vom Ausgangspunkt  $x_1$ ,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n (T^t)_{x, x_1} = P(x). \quad (4.13)$$

Dies beweisen wir im Folgenden. Wir treffen noch die zusätzliche Einschränkung, dass  $T$  eine reguläre Matrix ist, d. h.  $\exists_{s \in \mathbb{N}} \forall_{x,y} (T^s)_{x,y} > 0$ . Reguläre Matrizen sind stets ergodisch, nicht aber umgekehrt. Der Beweis kann auf allgemeine ergodische Matrizen ausgedehnt werden, worauf wir in dieser Arbeit aber verzichten. Wir führen zunächst einen reellwertigen Vektor  $\mathbf{a}_t$  ein mit  $\mathbf{a}_{t+1} = \mathbf{a}_t T$  und den Abstand  $d_t = \max(\mathbf{a}_t) - \min(\mathbf{a}_t)$ . Aus

$$(\mathbf{a}_{t+1})_x = \sum_y (\mathbf{a}_t)_y T_{y,x} \quad (4.14)$$

$$\leq \max(\mathbf{a}_t) \sum_y T_{y,x} = \max(\mathbf{a}_t), \quad (4.15)$$

$$(\mathbf{a}_{t+1})_x \geq \min(\mathbf{a}_t) \sum_y T_{y,x} = \min(\mathbf{a}_t) \quad (4.16)$$

$$(4.17)$$

folgt  $d_{t+1} \leq d_t$ . Um die zeitliche Entwicklung von  $d_t$  weiter einzugrenzen definieren wir

$$a_M := (\mathbf{a}_t)_M = \max(\mathbf{a}_t), \quad (4.18)$$

$$a_m := (\mathbf{a}_t)_m = \min(\mathbf{a}_t), \quad (4.19)$$

$$(\mathbf{a}^M)_i := \sum_{j \neq m} \delta_{i,j} a_M + \delta_{i,m} a_m, \quad (4.20)$$

$$(\mathbf{a}^m)_i := \sum_{j \neq M} \delta_{i,j} a_m + \delta_{i,M} a_M, \quad (4.21)$$

$$\forall_{x,y} (T^N)_{x,y} \geq \varepsilon > 0. \quad (4.22)$$

Die letzte Ungleichung gilt auf Grund der Regularität von  $T$ . Es gelten dann

$$(\mathbf{a}_{t+N})_x = (\mathbf{a}_t T^N)_x \leq (\mathbf{a}^M T^N)_x \quad (4.23)$$

$$= a_M \sum_{y \neq m} T_{y,x}^N + a_m T_{m,x}^N \quad (4.24)$$

$$= a_M - (a_M - a_m) T_{m,x}^N \quad (4.25)$$

$$\leq a_M - (a_M - a_m) \varepsilon, \quad (4.26)$$

$$(\mathbf{a}_{t+N})_x \geq (\mathbf{a}^m T^N)_x \quad (4.27)$$

$$= a_m + (a_M - a_m) T_{M,x}^N \quad (4.28)$$

$$\geq a_m + (a_M - a_m) \varepsilon \quad (4.29)$$

und

$$d_{t+N} \leq a_M - (a_M - a_m) \varepsilon - a_m - (a_M - a_m) \varepsilon \quad (4.30)$$

$$= d_t (1 - 2\varepsilon). \quad (4.31)$$

Daraus kann man folgern, dass  $d_t$  zumindest exponentiell mit  $t$  abfällt,

$$d_t \leq b e^{-\frac{t}{\tau}}, \quad b, \tau \in \mathbb{R} > 0. \quad (4.32)$$

Da im  $\lim_{t \rightarrow \infty} d_t = 0$ , sind alle Einträge des Vektors  $\mathbf{a}_t$  gleich, und wegen  $\mathbf{a}_{t+1} = \mathbf{a}_t T$  ebenso jeweils alle Einträge von  $T$  in einer Zeile,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} T^t = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \cdots & \alpha_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_{N_x} & \cdots & \alpha_{N_x} \end{pmatrix}. \quad (4.33)$$

Aus Gl. 4.7 folgt

$$\sum_x \alpha_x = 1 \quad (4.34)$$

und wegen der Regularität von  $T$  auch  $\forall_x \alpha_x \geq 0$ . Also kann  $\alpha$  als Wahrscheinlichkeit interpretiert werden. Mit Gl. 4.32 folgt auch

$$(T^t)_{x,y} = \alpha_x + \Delta_t \quad \text{mit} \quad |\Delta_t| \leq b e^{-\frac{t}{\tau}}. \quad (4.35)$$

Für jeden Vektor  $\mathbf{v}$  gilt im  $\lim_{t \rightarrow \infty} T^t \mathbf{v} = \alpha$ .  $\alpha$  erfüllt also die Stationaritätsbedingung in Gl. 4.9.  $\alpha$  ist die stationäre Wahrscheinlichkeitsverteilung im Gleichgewicht,  $\alpha_x = P(x)$ . Nun können wir zeigen, dass Gl. 4.13 erfüllt ist:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n (T^t)_{x,x_1} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n (P(x) + \Delta_t) \quad (4.36)$$

$$= P(x) + \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n \Delta_t \quad (4.37)$$

$$= P(x) \quad (4.38)$$

Die von der Markov Kette erzeugten Konfigurationen  $x_i$  sind also gemäß der Wahrscheinlichkeit  $P(x_i)$  verteilt. Was uns jetzt noch fehlt, ist eine explizite Konstruktion von  $T$ , welche die Bedingung der detaillierten Balance in Gl. 4.10 erfüllt. Wir schreiben  $T_{x,y}$  als Produkt  $T_{x,y} = T_{x,y}^0 a_{x,y}$ , wobei  $T_{x,y}^0$  die Wahrscheinlichkeit ist, das Update  $x \rightarrow y$  vorzuschlagen, und  $a_{x,y}$  die Wahrscheinlichkeit, dass das vorgeschlagene Update akzeptiert wird. Um die Simulationszeit gering zu halten ist es klar, dass man nie ein Update vorschlägt, welches die Konfiguration nicht ändert. Nur durch Nicht-Akzeptieren eines Updates bleibt die Konfiguration konstant:

$$T_{x,y} = \begin{cases} T_{x,y}^0 a_{x,y} & \text{falls } x \neq y, \\ \sum_{z \neq x} T_{z,y}^0 (1 - a_{z,y}) & \text{falls } x = y \end{cases} \quad (4.39)$$

Eine weitere Forderung ist die Ergodizität der Updates, d. h. jede Konfiguration muss für die Markov Kette erreichbar sein. Andererseits ist es in einer Computersimulation am besten umsetzbar, bei jedem Update nur geringfügige Änderungen der Konfiguration vorzunehmen. Um dennoch ergodisch zu sein, kann man auch verschiedene Update Typen definieren, welche mit der Wahrscheinlichkeit  $\lambda$  gewählt werden,

$$T = \sum_i \lambda_i T^{(i)}, \quad \sum_i \lambda_i = 1. \quad (4.40)$$

Die detaillierte Balance muss dennoch gelten. Gehen wir davon aus, dass für jedes Paar von Konfigurationen höchstens ein Update Typ den Übergang von  $x \rightarrow y$  direkt, also in einem einzigen Update, ermöglicht, lautet die detaillierte Balance

$$\lambda_i T_{y,x}^{(i)0} a_{y,x} P(x) = \lambda_j T_{x,y}^{(j)0} a_{x,y} P(y). \quad (4.41)$$

Es gilt dann

$$a_{x,y} = \mathcal{F} \left( \frac{\lambda_i T_{y,x}^{(i)0} P(x)}{\lambda_j T_{x,y}^{(j)0} P(y)} \right) = \mathcal{F}(Z), \quad (4.42)$$

$$a_{y,x} = \mathcal{F} \left( \frac{\lambda_j T_{x,y}^{(j)0} P(y)}{\lambda_i T_{y,x}^{(i)0} P(x)} \right) = \mathcal{F} \left( \frac{1}{Z} \right), \quad (4.43)$$

$$Z = \frac{\lambda_i T_{y,x}^{(i)0} P(x)}{\lambda_j T_{x,y}^{(j)0} P(y)}. \quad (4.44)$$

Detaillierte Balance bedeutet mit diesen Definitionen nichts anderes als

$$\frac{\mathcal{F}(Z)}{\mathcal{F}\left(\frac{1}{Z}\right)} = Z. \quad (4.45)$$

Es gibt verschiedene Realisierungen der Funktion  $\mathcal{F}$ , welche diese Bedingung erfüllen. Eine ist als *Metropolis* Algorithmus bekannt und lautet

$$\mathcal{F}(Z) = \min(1, Z). \quad (4.46)$$

Man kann durch eine Fallunterscheidung leicht zeigen, dass sie Gl. 4.45 erfüllt. Für  $Z \leq 1$  gilt

$$\min(1, Z) = Z \quad \wedge \quad \min\left(1, \frac{1}{Z}\right) = 1, \quad (4.47)$$

$$\frac{\mathcal{F}(Z)}{\mathcal{F}\left(\frac{1}{Z}\right)} = \frac{Z}{1} = Z, \quad (4.48)$$

und für  $Z > 1$

$$\min(1, Z) = 1 \quad \wedge \quad \min\left(1, \frac{1}{Z}\right) = \frac{1}{Z}, \quad (4.49)$$

$$\frac{\mathcal{F}(Z)}{\mathcal{F}\left(\frac{1}{Z}\right)} = \frac{1}{\frac{1}{Z}} = Z. \quad (4.50)$$

## 4.2 Update Typen

Betrachten wir erneut Gl. 3.161 im Hinblick auf die Technik der Monte Carlo Simulation, erkennen wir, dass die Summen bzw. Integrale  $\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_n=\pm 1} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_{\tau_{n-1}}^\beta d\tau_n$  den Konfigurationsraum  $\{\tau_i, s_i\}$  aufspannen, während  $\left(\frac{K}{2\beta}\right)^n \prod_\sigma \det[N_\sigma^{-1}\{\tau_i, s_i\}] = P(\{\tau_i, s_i\})$  das statistische Gewicht einer Konfiguration ist. Man kann zeigen, dass die Gewichte im Single Impurity Anderson Modell immer  $\geq 0$  sind [18]. Die Vorgehensweise, eine Markov Kette von Konfigurationen mit Metropolis Updates zu erzeugen, ist folgende.

Zu Beginn benötigt man einen Startpunkt der Markov Kette. Der Einfachheit wegen wählen wir die einfachste aller Möglichkeiten, die 0-te Störungsordnung  $n = 0$  ohne Auxiliary Spin.

Die Updates müssen ergodisch sein, also vom Startpunkt aus jede denkbare  $\{\tau_i, s_i\}$ -Konfiguration erreichen können. Wir setzen das mit 3 Update Typen um, mit denen wir eine Konfiguration  $C_n$  der Ordnung  $n$  wie folgt modifizieren:

**Spin Einfügen,**  $C_n \rightarrow C_{n+1}$ . Man wählt zufällig einen Spin  $s_{n+1} = \pm 1$ , welchen man zu einer ebenfalls zufällig gewählten Zeit  $\tau_{n+1} \in [0, \beta)$  einfügt und damit die Störungsordnung auf  $n+1$  anhebt. Die Wahrscheinlichkeit, einen bestimmten Spin  $\uparrow$  oder  $\downarrow$  einzufügen, ist wegen der Zahl der Möglichkeiten gleich  $\frac{1}{2}$ . Die Wahrscheinlichkeit, eine bestimmte Zeit zu wählen, ist auf Grund der Breite des Intervalls gleich der Wahrscheinlichkeitsdichte  $\frac{1}{\beta}$ . Somit ist die gesamte Vorschlagswahrscheinlichkeit

$$T_{C_n \rightarrow C_{n+1}}^0 = \frac{1}{2\beta}. \quad (4.51)$$

**Spin Entfernen,**  $C_n \rightarrow C_{n-1}$ . Man wählt einen aus Spin und entsprechender Zeit bestehenden Vertex  $(\tau_j, s_j)$  zufällig aus dem Ensemble der  $\{\tau_i, s_i\}$ , und entfernt ihn, verringert also die Störungsordnung um 1. Wegen der Zahl der Wahlmöglichkeiten  $j = 1, \dots, n$  ist die Vorschlagswahrscheinlichkeit, einen bestimmten Vertex zu entfernen, gleich

$$T_{C_n \rightarrow C_{n-1}}^0 = \frac{1}{n}. \quad (4.52)$$

**Spin Flip,**  $C_n \rightarrow C'_n$ . Man wählt aus dem Ensemble der  $\{\tau_i, s_i\}$  zufällig einen Vertex, dessen Spin man umklappt,  $s_j \rightarrow -s_j$ . Auch hier ist Wahrscheinlichkeit, einen bestimmten Vertex für den Spin Flip vorzuschlagen, auf Grund der Wahlmöglichkeiten gleich

$$T_{C_n \rightarrow C'_n}^0 = \frac{1}{n}. \quad (4.53)$$

Die beiden ersten Update Typen reichen schon aus, um Ergodizität zu gewährleisten. Der 3. Typ hat sich als günstig erwiesen, da dieses Update von einem Computer schneller als die beiden anderen durchgeführt werden kann, und man schneller die nötigen Updates zur Überwindung der Autokorrelation aufeinanderfolgender Konfigurationen erreicht. Auf Autokorrelation werden wir im nächsten Abschnitt dieses Kapitels eingehen.

Soll also ein Update durchgeführt werden, wählt man zuerst zufällig einen Update Typ entsprechend seiner Wahrscheinlichkeit aufzutreten,  $\lambda$ . Wir setzen in der Praxis

$$\lambda_{\text{add}} = \lambda_{\text{remove}} < \lambda_{\text{flip}}. \quad (4.54)$$

Dann wird zufällig ein bestimmter Vertex entsprechend der obigen Beschreibung für den jeweiligen Update Typ gewählt. Bis zu diesem Moment ist die Änderung der Konfiguration nur ein Vorschlag. Ob sie tatsächlich durchgeführt wird, entscheidet das Ziehen einer weiteren Zufallszahl  $r \in [0, 1)$  und die Prüfung

$$r \leq \min\left(1, a_{C_n \rightarrow C'_n}\right). \quad (4.55)$$

Die Akzeptanzwahrscheinlichkeit  $a_{C_n \rightarrow C'_n}$  lautet nach Gl. 4.42 mit den entsprechenden Vorschlagswahrscheinlichkeiten und Gewichten für das Spin Einfügen

$$a_{C_n \rightarrow C_{n+1}} = \prod_{\sigma} \frac{\frac{1}{n+1} \left(\frac{K}{2\beta}\right)^{n+1} \det \left[ \left(N_{\sigma}^{(n+1)}\right)^{-1} \right]}{\frac{1}{2\beta} \left(\frac{K}{2\beta}\right)^n \det \left[ \left(N_{\sigma}^{(n)}\right)^{-1} \right]} \quad (4.56)$$

$$= \frac{K}{n+1} \prod_{\sigma} \frac{\det \left[ \left(N_{\sigma}^{(n+1)}\right)^{-1} \right]}{\det \left[ \left(N_{\sigma}^{(n)}\right)^{-1} \right]}, \quad (4.57)$$

für das Spin Entfernen

$$a_{C_{n+1} \rightarrow C_n} = \prod_{\sigma} \frac{\frac{1}{2\beta} \left(\frac{K}{2\beta}\right)^n \det \left[ \left(N_{\sigma}^{(n)}\right)^{-1} \right]}{\frac{1}{n+1} \left(\frac{K}{2\beta}\right)^{n+1} \det \left[ \left(N_{\sigma}^{(n+1)}\right)^{-1} \right]} \quad (4.58)$$

$$= \frac{n+1}{K} \prod_{\sigma} \frac{\det \left[ \left(N_{\sigma}^{(n)}\right)^{-1} \right]}{\det \left[ \left(N_{\sigma}^{(n+1)}\right)^{-1} \right]} \quad (4.59)$$

und für den Spin Flip

$$a_{C_n \rightarrow C'_n} = \prod_{\sigma} \frac{\frac{1}{n} \left(\frac{K}{2\beta}\right)^n \det \left[ \left(N_{\sigma}^{(n)}\right)^{-1} \right]}{\frac{1}{n} \left(\frac{K}{2\beta}\right)^n \det \left[ \left(N_{\sigma}^{(n)}\right)^{-1} \right]} \quad (4.60)$$

$$= \prod_{\sigma} \frac{\det \left[ \left(N_{\sigma}^{(n)}\right)^{-1} \right]}{\det \left[ \left(N_{\sigma}^{(n)}\right)^{-1} \right]}. \quad (4.61)$$

Nur wenn die Ungleichung 4.55 erfüllt ist, wird der Markov Kette die neue Konfiguration  $C'_n$  angehängt, andernfalls wird die alte Konfiguration  $C_n$  wiederholt.

### 4.3 Autokorrelation und Jackknife Verfahren

Wir wissen nun, wie man eine Markov Kette mit statistisch richtig gewichteten Konfigurationen  $\{\tau_i, s_i\}$  erzeugt. Bevor wir über Gl. 4.3 Observablen im Monte Carlo Mittel messen, müssen wir uns Gedanken zur Korrelation der Konfigurationen machen. Bedingung für den Zentralen Grenzwertsatz (Gl. 4.4) ist nämlich, dass die gemessenen Observablen  $O(\{\tau_i, s_i\})$  statistisch unabhängig sind, d. h. die Konfigurationen unkorreliert. Offensichtlich sind aber 2 unmittelbar aufeinander folgende Konfigurationen korreliert, da ja im Modell der Markov Kette jedes Glied eine Funktion des vorhergehenden Glieds ist. Und auch weiter auseinanderliegende Konfigurationen sind korreliert, da durch die begrenzten Updatemöglichkeiten nur ein Teil des Konfigurationsraums innerhalb einer endlichen Zahl von Updates erreichbar ist. Beispielsweise kann die Störungsordnung in  $N_U$  Updates maximal um  $N_U$  steigen. Die Stärke der Korrelation hängt also von den gewählten Update Typen ab. Es gibt ein definiertes Maß für die Korrelation der Observable  $O$  im Abstand  $t$ ,

$$C_O(t) = \frac{\frac{1}{N} \sum_{s=1}^N O(x_s) O(x_{s+t}) - \left(\frac{1}{N} \sum_{s=1}^N O(x_s)\right)^2}{\frac{1}{N} \sum_{s=1}^N O^2(x_s) - \left(\frac{1}{N} \sum_{s=1}^N O(x_s)\right)^2}. \quad (4.62)$$

Wir nehmen einen anderen Weg, um die Autokorrelation und gleichzeitig auch den statistischen Fehler der Monte Carlo Messung zu bestimmen. Denn auch der nach Gl. 4.5 berechnete Fehler stimmt nur für den Fall, dass die Observablen unkorreliert sind. Vernachlässigt man die Korrelation, unterschätzt man den wahren Fehler. Um den Einfluss der Korrelation zu eliminieren, fassen wir die Messdaten in sogenannte Bins  $O_{B,n}$  zusammen,

$$O_{B,n} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k O_{(n-1)k+i}, \quad n = 1, \dots, N_B, \quad kN_B = N. \quad (4.63)$$

Der Mittelwert dieser Bins gleicht natürlich dem Mittelwert  $\bar{O}$  der Einzelmessungen. Die Analyse des Stichprobenfehlers

$$\sigma^2 = \frac{\sigma_B^2}{N_B} = \frac{1}{N_B(N_B - 1)} \sum_{n=1}^{N_B} (O_{B,n} - \bar{O})^2 \quad (4.64)$$

nähert sich asymptotisch dem wahren Fehler, da für steigende Binsgrößen die Korrelation der Bins immer geringer wird. Ist das nicht der Fall, können wir keine sinnvolle Aussage über die Observable treffen, da Gl. 4.13 nicht erfüllt ist. Durch Ermittlung des Fehlers als Funktion von  $N_B$  kann man den  $\lim_{N_B \rightarrow \infty} \sigma_{N_B}$  extrapolieren, und erhält so den wahren statistischen Fehler der Monte Carlo Messung. Die Autokorrelationszeit bestimmt sich näherungsweise zu  $\lim_{N_B \rightarrow \infty} \frac{k\sigma_{N_B}^2}{2\sigma_t^2}$ , wobei  $\sigma_t$  der nach Gl. 4.5 bestimmte Fehler in trivialer, die Korrelation vernachlässigender Abschätzung ist.

Ein weiteres Verfahren zur Abschätzung des Messfehlers ist die Jackknife Methode. Es ist geeignet, um die statistischen Fehler von Funktionen  $f$  einer oder mehrerer Variablen zu bestimmen. Zu bestimmen sei

$$\langle O' \rangle = f(\langle O_1 \rangle, \dots, \langle O_n \rangle). \quad (4.65)$$

Um den Fehler dieser Messung zu bestimmen, bildet man die Jackknife Observablen durch Bildung von Mittelwerten unter Auslassung jeweils eines Messwerts.

$$O_{J,m} = f\left(\frac{1}{N-1} \sum_{i=1, \dots, N \neq m} O_1(x_i), \dots, \frac{1}{N-1} \sum_{i=1, \dots, N \neq m} O_n(x_i)\right), \quad m = 1, \dots, N. \quad (4.66)$$

Der Mittelwert der  $O_{J,n}$  gleicht ebenfalls  $\langle O' \rangle$ . Die Jackknife Observablen sind viel stärker korreliert, doch das Verhältnis zum Fehler der eigentlichen Observablen ist bekannt [25]. Der Messfehler bestimmt sich so zu

$$\sigma^2 = \frac{N-1}{N} \sum_{m=1}^N (O_{J,m} - \bar{O})^2. \quad (4.67)$$

## 4.4 Implementierung

In Kapitel 3 haben wir gezeigt, wie die Zustandssumme des Anderson Modells durch Berechnung einer Reihe von Determinanten im Konfigurationsraum  $\{\tau_i, s_i\}$  gelöst werden kann. In den vorigen Abschnitten dieses Kapitels folgte die Erklärung, wie man eine Markov Kette erzeugt, um mit einer endlichen Zahl an Messungen den Mittelwert der Observable in einem unendlich großen Konfigurationsraum statistisch exakt ermitteln zu können. Da wir zur Reduzierung des statistischen Fehlers sehr viele Updates der Konfigurationen durchführen wollen, ist es unerlässlich, mit Computerhilfe zu rechnen.

Zur numerischen Umsetzung haben wir ein C++ Programm geschrieben. Der Ablauf des Programms wird in Abb. 4.1 grob skizziert. Nach dem Programmstart werden die Parameter aus einer Textdatei eingelesen. Parameter sind sowohl physikalische zur Beschreibung der magnetischen Störstelle wie  $U, \beta$ , usw., als auch numerische wie die Größe der Bins.

Noch vor dem Start der Markov Kette werden Vorausberechnungen durchgeführt, s. Abb. 4.2. Nach Berechnung der Einteilchenenergien aller Badzustände, s. Gl. 1.6, kann nach Gl. 2.44 die freie Green Funktion als Funktion von Matsubara Frequenzen bestimmt werden. Eine anschließende Fouriertransformation liefert die Green Funktion als Funktion der imaginären Zeit  $\tau$  an  $N_\tau$  Stützstellen. Ist die Zahl  $N_\omega$  der Matsubara Frequenzen zu gering, sind Oszillationen der zeitabhängigen Green Funktion um die tatsächlichen Werte zu beobachten. Wir wählen

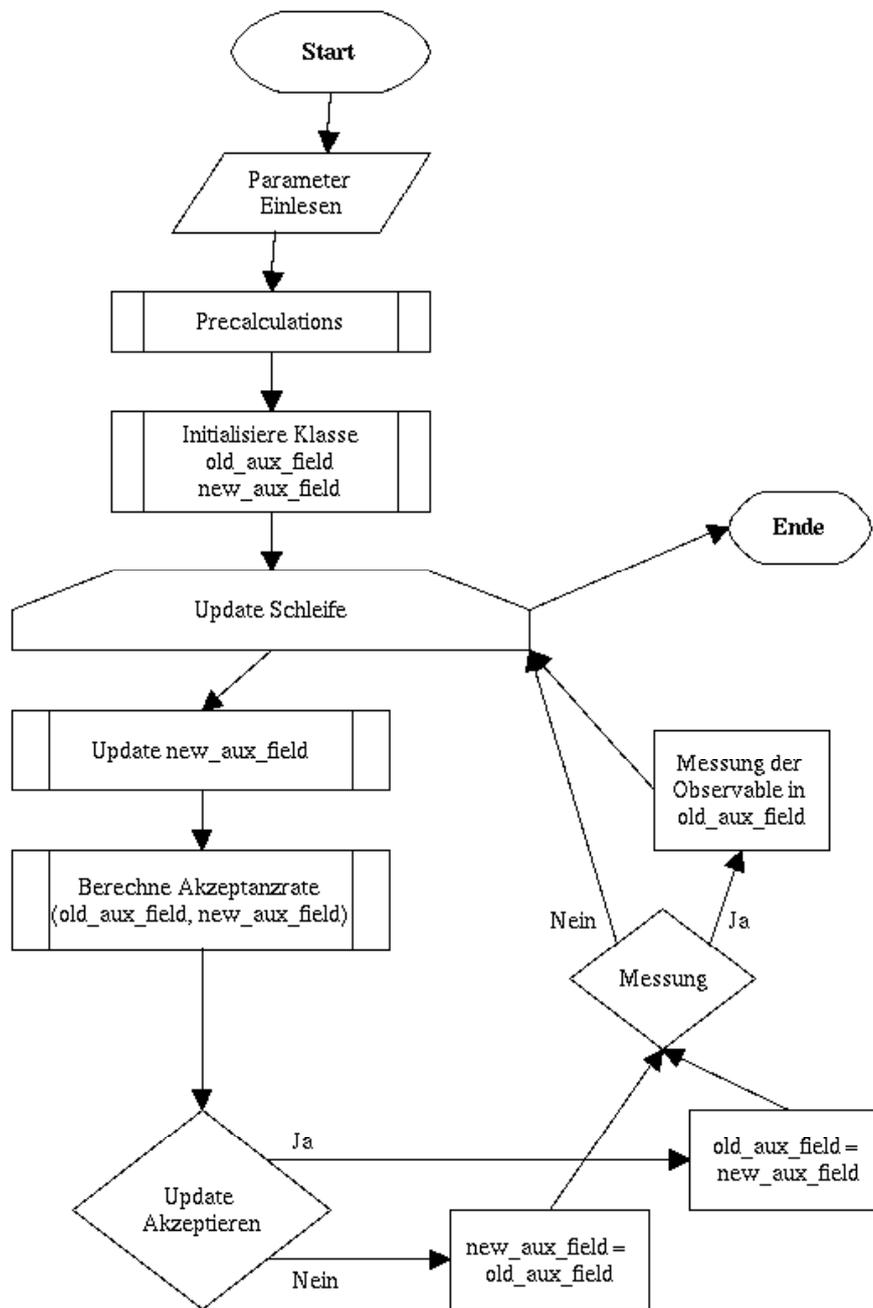


Abbildung 4.1: Skizze des Programmablaufs zur Messung der Green Funktion im Anderson Modell

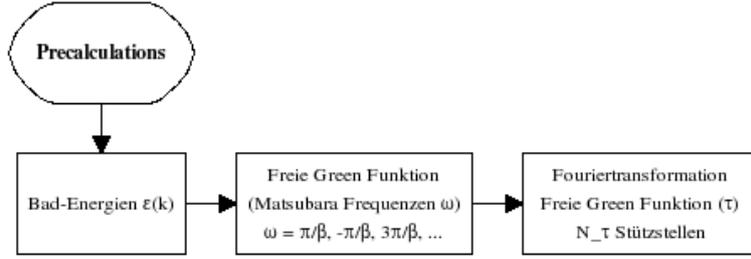


Abbildung 4.2: Skizze des Programmmoduls zur Durchführung der Vorausberechnungen

$N_\omega = 10^4$  und  $N_\tau = 10^5$ . Diese in der numerischen Umsetzung erforderliche Diskretisierung der Zeit ist feinschrittig genug, um in unseren Simulationen ausreichend geringe Messfehler zu erreichen. Bei steigenden Werten von  $\beta$  sollte  $N_\tau$  ebenfalls erhöht werden, um die Schrittweite der Stützstellen gering zu halten. Die Werte von  $G(\tau_i)$  werden in einem Vektor gespeichert. Da der freie Hamiltonian keine Spinabhängigkeit enthält, gleichen sich  $G_{0\uparrow}$  und  $G_{0\downarrow}$ , weshalb wir nur einen Vektor berechnen und speichern.

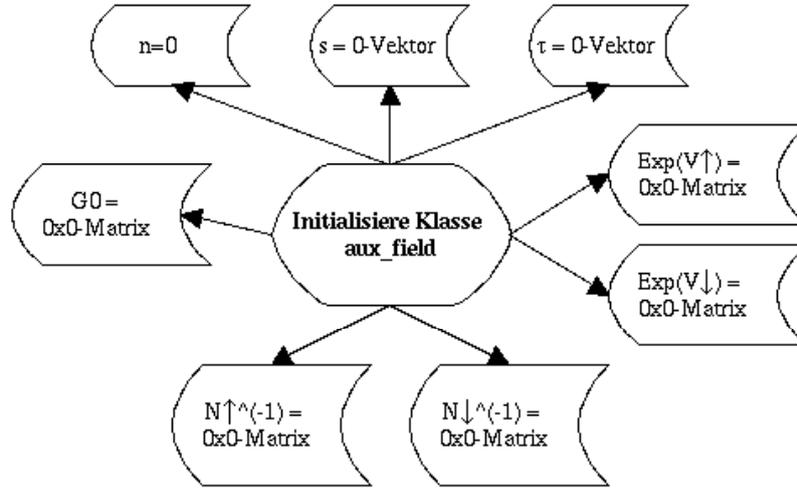


Abbildung 4.3: Skizze der in der Klasse Aux Field gespeicherten Informationen nach der Initialisierung

Dieser Vektor sowie die weiteren nötigen Parameter werden an zwei Instanzen der Klasse *Aux Field* übergeben. Diese Instanzen beinhalten alle nötigen Informationen zur Beschreibung der  $\{\tau_i, s_i\}$ -Konfiguration und ihres statistischen Gewichts, also die Störungsordnung  $n$ , einen Vektor der Vertex Zeiten  $\{\tau_i\}$ , die Matrizen  $G_0^{\{\tau_i\}}$  sowie  $e^{v_{\{s_i\}}}$  und  $N_\sigma^{-1}(\{\tau_i, s_i\})$  jeweils für Spin  $\uparrow$  und  $\downarrow$ , s. Abb. 4.3. Außerdem wird bei der Initialisierung  $e^{\pm\gamma}$  nach Gl. 3.18 berechnet, welche bei jedem Update zum Einfügen eines neuen Spins zum Aufbau der  $e^{v_{\{s_i\}}}$ -Matrix benötigt werden. Entsprechend der Vereinbarung, die Markov Kette bei der 0-ten Störungsordnung zu beginnen, haben nach der Initialisierung die gespeicherten Vektoren und Matrizen 0 bzw.  $0 \times 0$  Elemente.

Dann beginnt die Update Schleife, welche die Markov Kette generiert. Am Anfang jedes Update Zyklus steht jeweils die zufällige Wahl eines der 3 Update Typen. Spin Flips werden

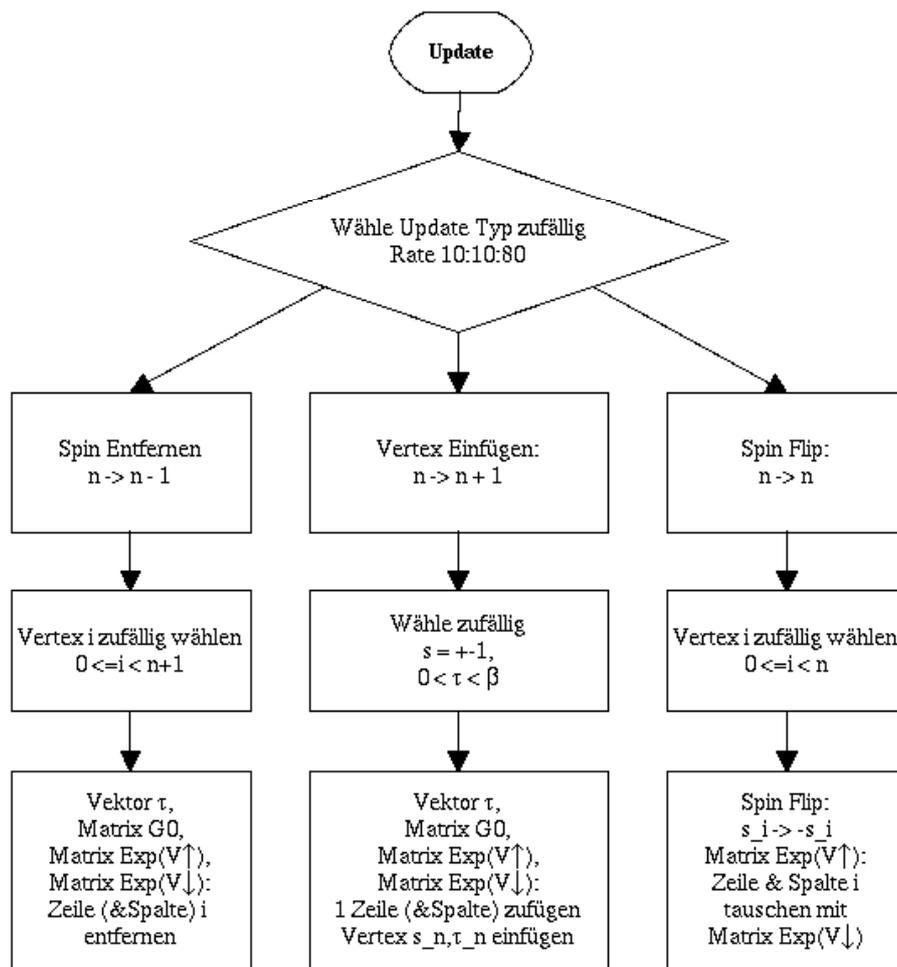


Abbildung 4.4: Skizze des Programmmoduls zum Vorschlagen einer neuen Konfiguration

bevorzugt gewählt, weil dieser Update Typ am schnellsten berechnet wird. Dann erfolgt der Vorschlag einer neuen Konfiguration und die Anpassung des Vektors  $\{\tau_i\}$  und der Matrizen  $G_0^{\{\tau_i\}}$  sowie  $e^{\{s_i\}}$ , s. Abb. 4.4.

Beim Einfügen eines neuen Spins werden  $\tau$  und  $s$  zufällig aus den jeweiligen Wertebereichen gewählt,  $n$  um 1 erhöht und  $\tau$  dem  $\{\tau_i\}$ -Vektor angehängt. Um  $G_0^{\{\tau_i\}}$  gemäß Gl. 3.163 um eine Zeile und Spalte zu erweitern, werden die  $G_0(\tau_j, \tau_k) = G_0(\tau_j - \tau_k)$  Werte aus dem Vektor der im voraus berechneten  $G_0(\tau_l)$  kopiert. Ist  $\tau_j - \tau_k$  nicht in der Liste der  $\tau_l$ , wird die nächste kleinere Zeit gewählt. Negative  $\tau_j - \tau_k$  Werte werden nach Gl. 2.10 und 2.11 auf positive zurückgeführt. Die  $e^{\{s_i\}}$ -Matrizen werden um eine Zeile und Spalte aus Nullen und  $e^{\pm\gamma}$  auf dem Diagonalelement erweitert. Zur Verbesserung der Geschwindigkeit erfolgt jedes Einfügen am Ende des  $\{\tau_i\}$ -Vektors bzw. in den letzten Zeilen und Spalten der Matrizen, anstatt sie zeitlich einzuordnen. Dies entspricht einem Vertauschen der Reihenfolge von Operatoren. Da in den Matrizen je gleich viele Zeilen und Spalten getauscht werden, ändert dies das Vorzeichen nicht.

Beim Entfernen eines Spins wird  $n$  um 1 verringert und zufällig eine Zahl  $j \in 0, \dots, n$  gezogen. Die  $j$ -te Zeit des Vektors  $\{\tau_i\}$  sowie die  $j$ -ten Zeilen und Spalten der Matrizen  $G_0^{\{\tau_i\}}$  und  $e^{\{s_i\}}$  werden gelöscht und somit der  $j$ -te Vertex entfernt. In der 0-ten Störungsordnung wird keine Änderung durchgeführt.

Das Umklappen eines Spins wirkt sich nur auf die Störungsmatrizen  $e^{\{s_i\}}$  aus. Das Ändern des Spins  $s_j \rightarrow -s_j$  entspricht dem Vertauschen des  $jj$  Elements von  $e^{\{s_i\}}$  mit dem von  $e^{\{s_i\}}$ , da wegen des Faktors  $(-1)^\sigma$  in Gl. 3.164 die entsprechenden Exponenten in beiden Matrizen stets unterschiedliche Vorzeichen haben. Bei  $n = 0$  erfolgt keine Änderung.

Die beschriebene Änderung der Vektoren und Matrizen wird zunächst nur in der Klasse `new_aux_field` durchgeführt. Es folgt die Prüfung, ob das vorgeschlagene Update akzeptiert werden soll, s. Abb. 4.5. Nach Gl. 4.57-4.61 hängt die Akzeptanzwahrscheinlichkeit sowohl vom Typ des Updates ab, als auch vom Gewicht der alten und neuen Konfiguration, was die Berechnung der Determinante von  $N_\sigma^{-1}(\{\tau_i, s_i\})$  mit der Dyson Gleichung (Gl. 3.151) nötig macht. Der Update Typ wird durch Vergleich der Störungsordnungen ermittelt. Gemäß der Metropolis Methode wird das Update akzeptiert, wenn eine Zufallszahl geringer als die Akzeptanzwahrscheinlichkeit ist. In diesem Fall übernimmt die Klasse `old_aux_field` die Konfiguration von `new_aux_field` einschließlich aller gespeicherter Matrizen und Vektoren. Wird das Update verworfen, wird umgekehrt `old_aux_field` auf `new_aux_field` kopiert, damit das nächste Update wieder von der gleichen Konfiguration wie der von `old_aux_field` ausgeht.

Danach kann eine Messung in der Konfiguration von `old_aux_field` erfolgen, was aber nicht nach jedem Update der Fall sein muss. Unter anderem ist es sinnvoll, die erste Messung erst nach einer größeren Zahl von Updates durchzuführen, um die Abhängigkeit von der Startkonfiguration zu verringern. Und es kann zeitsparend sein, auf rechenaufwendige Messungen in kurz aufeinanderfolgenden und damit stark korrelierten Konfigurationen zu verzichten, und stattdessen erst nach einer festgelegten Schrittweite von schnellen Updates zu messen. Diese Einstellungen können durch Messparameter festgelegt werden.

Die Messung selbst ist die Bestimmung der Green Funktion in der jeweiligen Konfiguration

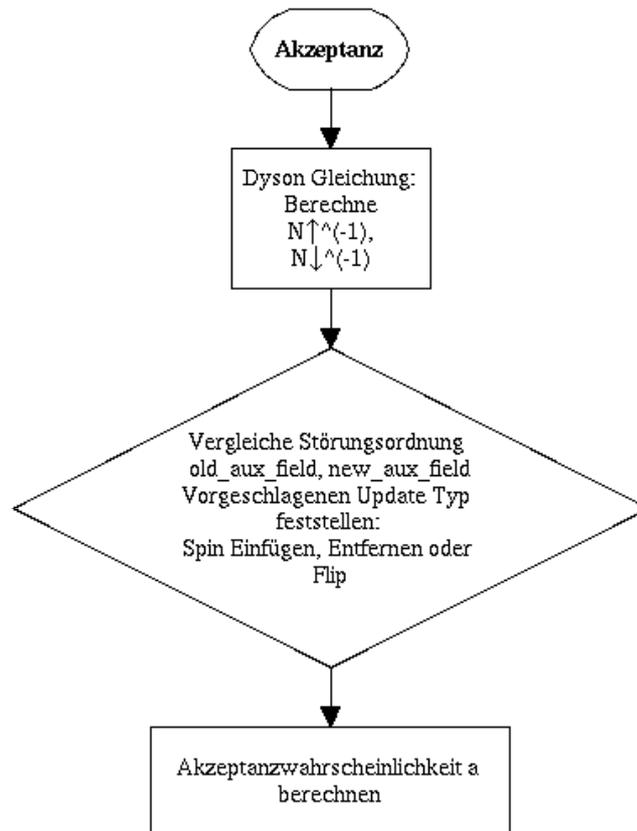


Abbildung 4.5: Skizze des Programmmoduls zur Berechnung der Akzeptanzwahrscheinlichkeit

$\{\tau_i, s_i\}$ . Wir bedienen uns der Gleichung

$$G_{\sigma}^{\{\tau_i, s_i\}}(\tau, \tau') = G_{0\sigma}(\tau, \tau') + \sum_{k,l=0}^{n-1} G_{0\sigma}(\tau, \tau_k) \left( \left( e^{v_{\{s_i\}}^{\sigma}} - \mathbb{1} \right) N_{\sigma}(\{\tau_i, s_i\}) \right)_{kl} G_{0\sigma}(\tau_l, \tau'), \quad (4.68)$$

welche äquivalent zur Dyson Gleichung (Gl. 3.151) ist [18]. Wir benötigen zur Messung der vollen Green Funktion also die Matrix  $e^{v_{\{s_i\}}^{\sigma}}$ , welche die Auxiliary Spins enthält, die schon im voraus berechnete freie Green Funktion und die Inverse der Matrix  $N_{\sigma}(\{\tau_i, s_i\})$ , welche selbst schon zur Berechnung der Determinante für die Akzeptanzwahrscheinlichkeit bestimmt wurde. Die Green Funktion, welche in der Regel an einer Reihe von Stützstellen gemessen wird, kann direkt in eine Datei ausgegeben oder mit aufeinanderfolgenden Messungen zu Bins zusammengefasst werden.

Das Programm endet, wenn eine vorgegebene Zahl an Messungen durchgeführt wurde. Mittelwert und statistischer Fehler der Messung können nach der im Abschnitt 4.3 vorgestellten Methode aus den in Dateien gespeicherten Messwerten bestimmt werden.

## 4.5 Mittlere Störungsordnung

Die mittlere Störungsordnung  $\langle n \rangle$  ist eine wichtige Eigenschaft der Monte Carlo Simulation. Die Größe der im Algorithmus gespeicherten Matrizen ist  $n \times n$ , und da bei jedem Update die Determinante, und bei jeder Messung die Inverse der Matrix  $N_{\sigma}^{-1}(\{\tau_i, s_i\})$  berechnet werden muss, skaliert die Rechendauer der Updates mit  $\mathcal{O}(\langle n^3 \rangle)$  [18]. Eine geringe Störungsordnung führt dementsprechend zu einer kurzen Rechenzeit.

Wir berechnen  $\langle n \rangle$  über Gl. 3.1 und 3.20 zu

$$\begin{aligned} \langle n \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{m=0}^{\infty} \left( \frac{K}{2\beta} \right)^m \frac{1}{m!} \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_m=\pm 1} \int_0^{\beta} d\tau_1 \cdots \int_0^{\beta} d\tau_m \cdot \\ &\quad \cdot \text{Tr} \left[ \prod_{i=m}^1 e^{-\Delta\tau_i \hat{H}_0} e^{\gamma s_i (n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow})} \right]_m. \end{aligned} \quad (4.69)$$

Der Faktor  $\frac{1}{m!}$  ergibt zusammen mit den gegenüber Gl. 3.20 veränderten Integrationsgrenzen eine äquivalente Darstellung der Zeitordnung. Den Bruch  $\frac{m}{m!}$  kürzen wir zu  $\frac{1}{(m-1)!}$ . Der erste Summand verschwindet wegen des Faktors  $m = 0$ , so dass wir  $m-1 = l$  substituieren können.

$$\begin{aligned} \langle n \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{K}{2\beta} \left( \frac{K}{2\beta} \right)^l \frac{1}{l!} \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_l=\pm 1} \int_0^{\beta} d\tau_1 \cdots \int_0^{\beta} d\tau_l \cdot \\ &\quad \cdot \text{Tr} \left[ \prod_{i=l}^1 e^{-\Delta\tau_i \hat{H}_0} e^{\gamma s_i (n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow})} \sum_{s=\pm 1} \int_0^{\beta} d\tau e^{-\Delta\tau \hat{H}_0} e^{\gamma s (n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow})} \right]. \end{aligned} \quad (4.70)$$

Im Vergleich mit Gl. 4.69 können wir erkennen, dass die ersten  $l$  Summationen, Integrale, Zeitentwicklungsoperatoren und Koeffizienten als Gewicht zu einer neuen Observable aufgefasst

werden können:

$$\langle n \rangle = \frac{K}{2\beta} \sum_{s=\pm 1} \int_0^\tau d\tau \langle e^{\gamma s (n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow})} \rangle \quad (4.71)$$

$$= \langle K - \beta \hat{V} \rangle \quad (4.72)$$

$$= K - \beta U \left( \langle n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \rangle - \frac{1}{2} \langle n_{d\uparrow} + n_{d\downarrow} \rangle \right). \quad (4.73)$$

Im letzten Schritt haben wir  $\hat{V}$  aus Gl. 1.4 eingesetzt. Wir haben also eine Relation zwischen der mittleren Störungsordnung und mittleren Besetzungszahlen bzw. Doppelbesetzungswahrscheinlichkeit hergeleitet. Diese kann genutzt werden, um bei Kenntnis der Besetzungszahlen die Störungsordnung vorher zu bestimmen, und dementsprechend den Parameter  $K$  so zu wählen, dass eine endliche, geringe Störungsordnung zu erwarten ist. Eine andere Anwendung der Relation ist die Prüfung der Messergebnisse, welche die Relation im Rahmen der Messfehler erfüllen müssen.

Wir sehen auch, dass die mittlere Störungsordnung linear mit  $K$  anwächst. Die Simulationsdauer sinkt also mit abnehmendem  $K$ . Auf der anderen Seite nimmt  $\gamma$  mit steigendem  $K$  ab, s. Gl. 3.18. Damit nimmt auch der Energieunterschied der Auxiliary Spins  $\uparrow$  und  $\downarrow$  ab, was Spin Flips erleichtert, und die Tendenz zur Polarisierung der Spins verringert.  $K$ -Werte in der Größenordnung von 1 haben sich als günstig erwiesen [18].

## 5 Ergebnisse im Anderson Modell

Wir haben gezeigt, auf welche Weise wir die Green Funktion der d-Elektronen im Anderson Modell messen können. Über einen einfachen Zusammenhang bestimmen wir auch die Besetzungszahlen. In jeder  $\{\tau_i, s_i\}$ -Konfiguration gilt für die Besetzungszahl

$$\langle n_{d\sigma} \rangle_{\{\tau_i, s_i\}} = \langle d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} \rangle_{\{\tau_i, s_i\}} \quad (5.1)$$

mit Gl. 2.8

$$\langle n_{d\sigma} \rangle_{\{\tau_i, s_i\}} = 1 - G_{\sigma}^{\{\tau_i, s_i\}}(0). \quad (5.2)$$

Ebenso können wir die Wahrscheinlichkeit für die Doppelbesetzung der Störstelle bestimmen, sie ist

$$\langle n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \rangle_{\{\tau_i, s_i\}} = \left(1 - G_{\uparrow}^{\{\tau_i, s_i\}}(0)\right) \left(1 - G_{\downarrow}^{\{\tau_i, s_i\}}(0)\right). \quad (5.3)$$

Alle Messwerte werden durch Gl. 4.3 berechnet, und ihre statistischen Fehler durch das in Abschnitt 4.3 beschriebene Binning Verfahren.

### 5.1 Verifizierung des Algorithmus

Um die Arbeitsweise unseres Algorithmus zu verifizieren, beginnen wir mit der Simulation eines kleinen Systems, welches auch mit exakter Diagonalisierung lösbar ist. Wir erhalten so exakte Referenzwerte, mit denen wir die simulierten Messwerte vergleichen können. Wir wählen die Zahl der Zustände  $N_s = 3$ , und die weiteren Parameter zu  $U = 4$ ,  $V = 0.75\sqrt{2}$ ,  $t = 1$ ,  $\mu = 0$  und  $\varepsilon_d = -2$ . Die inverse Temperatur  $\beta$  ist variabel im Bereich zwischen 0.1 und 10.

Die Konstellation  $\varepsilon_d = -\frac{U}{2}$  und  $\mu = 0$  wird als Halbfüllung bezeichnet. Die Zustandsdichte der Badelektronen ist symmetrisch um die Energie  $\mu = 0$ , s. Abb. 1.2, so dass die Hälfte der Zustände, welche alle negative Energien besitzen, im Grundzustand besetzt ist, und die Hälfte mit positiven Energien nicht. Bei endlichen Temperaturen gibt es Anregungen in höherenergetische Zustände, aber die Zahl der Elektronen bleibt konstant. Der Erwartungswert der Besetzungszahl von Badelektronen ist also  $\frac{1}{2}$ . Gleiches gilt für die d-Elektronen, denn sowohl der doppelbesetzte als auch der nicht besetzte Zustand haben die Energie 0, so dass beide Besetzungen gleich wahrscheinlich sind.

Tabelle 5.1 zeigt die Besetzungsdichte der d-Zustände in Abhängigkeit von  $\beta$ . Die Halbfüllung ist innerhalb der statistischen Fehler eindeutig erfüllt.

In Abb. 5.1 sehen wir den Vergleich der gemessenen Doppelbesetzungswahrscheinlichkeiten mit den Ergebnissen aus exakter Diagonalisierung. Bei sehr kleinen Werten von  $\beta$ , also hohen Temperaturen, ist die Coulomb Abstoßung auf der Störstelle klein gegenüber der thermischen Energie, so dass die Doppelbesetzung nur schwach unterdrückt wird. Im Limes  $T \rightarrow \infty$  ist  $\langle n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \rangle = \langle n_{d\uparrow} \rangle \langle n_{d\downarrow} \rangle = \frac{1}{4}$ . Auch diese Messungen sind mit den Referenzwerten vereinbar.

$\beta$	$\langle n_d \rangle$
0.1	$0.5 \pm 0.0000325269$
0.5	$0.5 \pm 0.000106066$
1	$0.5 \pm 0.000219203$
1.5	$0.5 \pm 0.00240416$
2	$0.5 \pm 0.000707107$
2.5	$0.5 \pm 0.000989949$
3	$0.5 \pm 0.00169706$
3.5	$0.5 \pm 0.00233345$
4	$0.5 \pm 0.00353553$
5	$0.5 \pm 0.00445477$
10	$0.5 \pm 0.046669$

Tabelle 5.1: Besetzungsdichte der d-Elektronen bei  $N_s = 3$ ,  $U = 4$ ,  $V = 0.75\sqrt{2}$ ,  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $\varepsilon_d = -2$

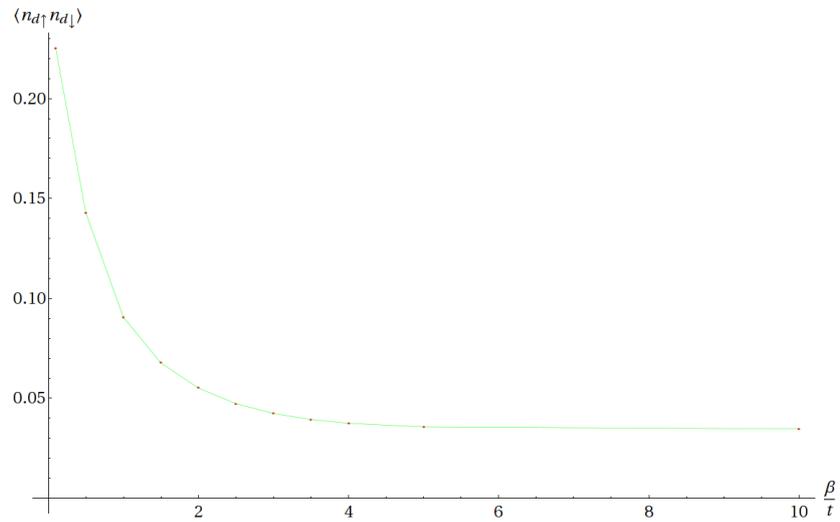


Abbildung 5.1: Doppelbesetzungswahrscheinlichkeit bei  $N_s = 3$ ,  $U = 4$ ,  $V = 0.75\sqrt{2}$ ,  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $\varepsilon_d = -2$ . Grün sind Werte der exakten Diagonalisierung eingezeichnet, rot die Messwerte.

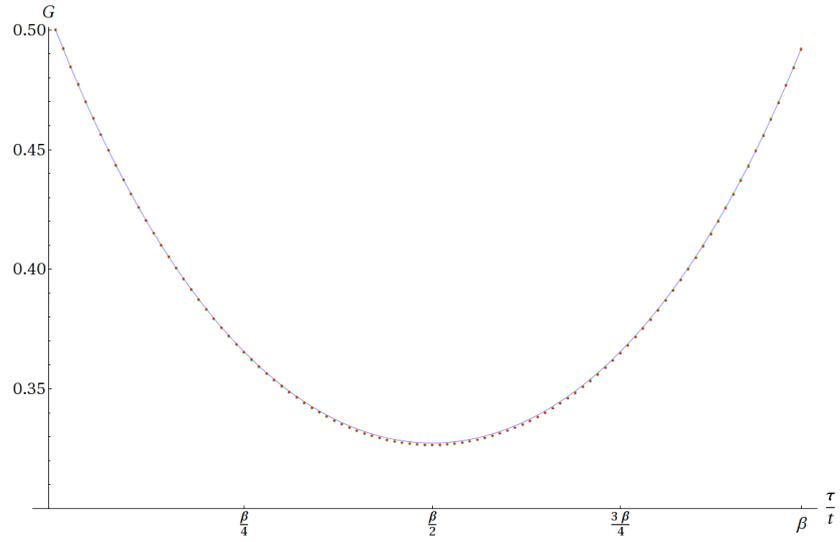


Abbildung 5.2: Green Funktion bei  $N_s = 3$ ,  $U = 4$ ,  $V = 0.75\sqrt{2}$ ,  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $\varepsilon_d = -2$  und  $\beta = 1$ . Die blaue Kurve sind Werte der exakten Diagonalisierung, die grünen Messpunkte  $G_\uparrow$  und die roten  $G_\downarrow$ .

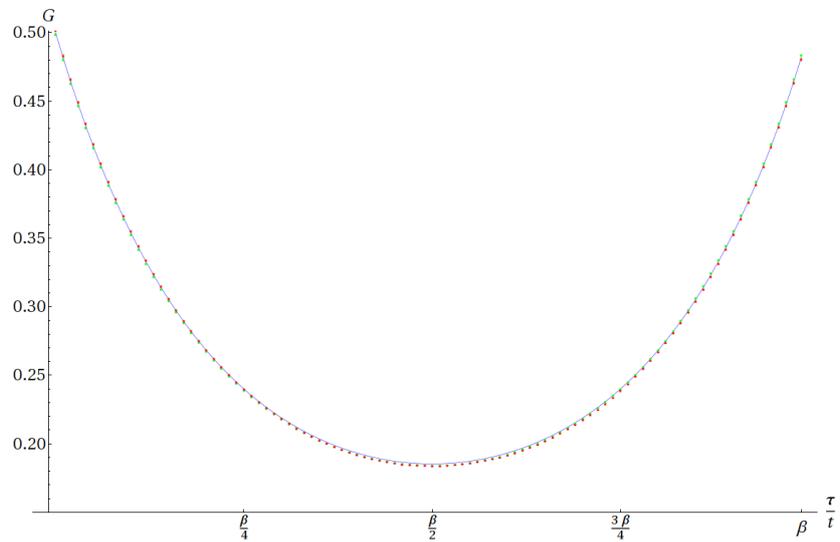


Abbildung 5.3: Green Funktion bei  $N_s = 3$ ,  $U = 4$ ,  $V = 0.75\sqrt{2}$ ,  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $\varepsilon_d = -2$  und  $\beta = 2$ . Die blaue Kurve sind Werte der exakten Diagonalisierung, die grünen Messpunkte  $G_\uparrow$  und die roten  $G_\downarrow$ .

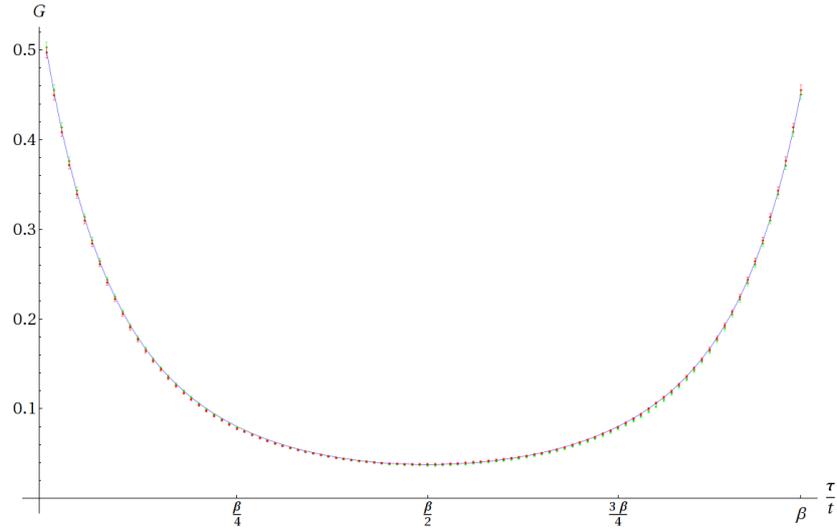


Abbildung 5.4: Green Funktion bei  $N_s = 3$ ,  $U = 4$ ,  $V = 0.75\sqrt{2}$ ,  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $\varepsilon_d = -2$  und  $\beta = 5$ . Die blaue Kurve sind Werte der exakten Diagonalisierung, die grünen Messpunkte  $G_\uparrow$  und die roten  $G_\downarrow$ .

Die Abb. 5.2-5.4 zeigen die Verläufe der Green Funktion im Intervall  $0 \leq \tau < \beta$ . Bei Half-füllung, was zugleich Teilchen-Loch Symmetrie bedeutet, sind die Green Funktionen in diesem Intervall stets symmetrisch um  $\tau = \frac{\beta}{2}$ . Da der Hamiltonian 1.2 spinentartet ist, ist das exakte Ergebnis der Green Funktion ebenfalls spinunabhängig. Abweichungen der beiden Messungen  $G_\uparrow$  und  $G_\downarrow$ , wie sie schwach in Abb. 5.4 erkannt werden können, sind auf Polarisierung der Auxiliary Spins zurückzuführen. Die Messwerte sind aber im Rahmen der Fehler mit den aus exakter Diagonalisierung bestimmten Werten vereinbar.

Mit Gl. 4.73 und den mit exakter Diagonalisierung bestimmten Besetzungszahlen berechnen wir die zu erwartende mittlere Störungsordnung. Abb. 5.5 zeigt den Vergleich mit den Messwerten. Auch diese stimmen mit den exakten Werten im Rahmen der Fehler überein. Bei hohen Werten von  $\beta$  verläuft die Störungsordnung nahezu linear, während bei  $\beta < 1$  die Linearität durch die starke Änderung der Doppelbesetzungswahrscheinlichkeit verletzt ist.

Alle Messergebnisse stimmen im Rahmen der Messfehler mit den Referenzergebnissen aus exakter Diagonalisierung überein. Die Richtigkeit des Algorithmus zur Lösung des Anderson Modells ist damit stichhaltig belegt.

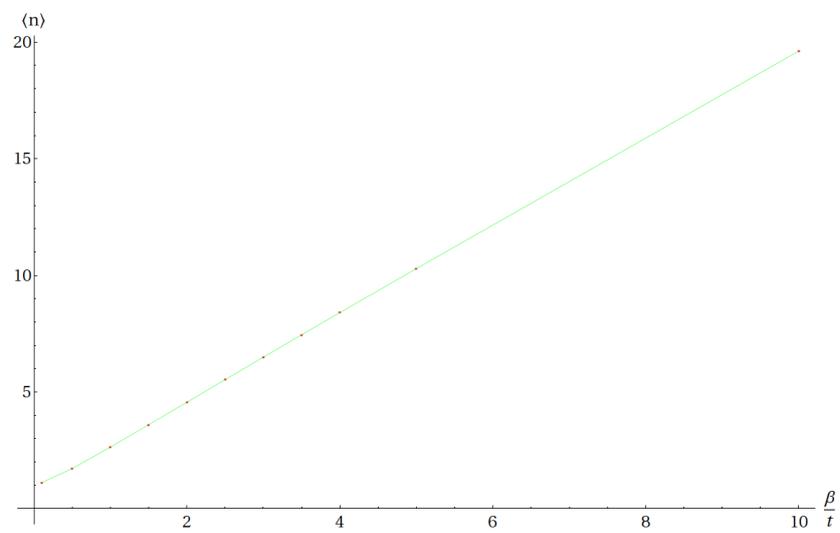


Abbildung 5.5: Mittlere Störungsordnung bei  $N_s = 3$ ,  $U = 4$ ,  $V = 0.75\sqrt{2}$ ,  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $\varepsilon_d = -2$ . Werte der exakten Diagonalisierung sind grün eingezeichnet, die Messwerte in rot.

## 5.2 Autokorrelation und Konvergenzverhalten

Wie in Kapitel 4 beschrieben wurde, sind lange Markov Ketten nötig, um den Einfluss der Startkonfiguration auf das Messergebnis gering zu halten. In diesem Abschnitt untersuchen wir die bereits gezeigte Messung mit  $N_s = 3$ ,  $U = 4$ ,  $V = 0.75\sqrt{2}$ ,  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $\varepsilon_d = -2$  und  $\beta = 1$  hinsichtlich des Konvergenzverhaltens der Observable und ihres statistischen Fehlers.

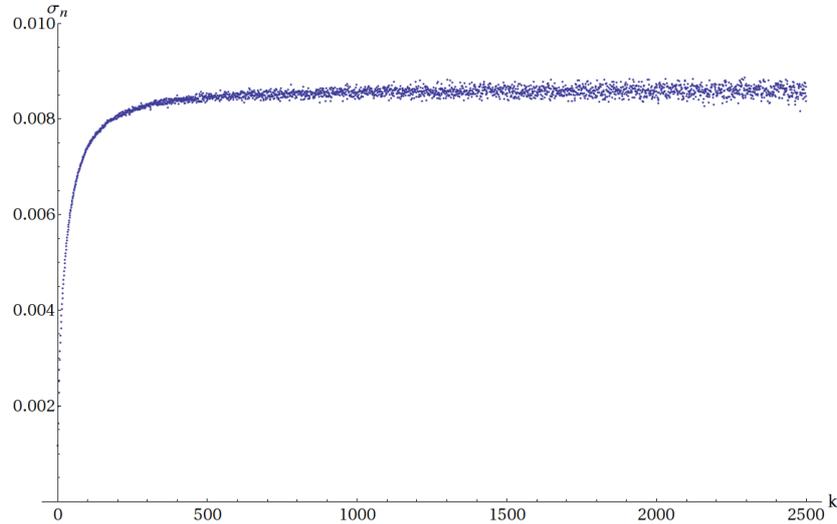


Abbildung 5.6: Statistischer Fehler der mittleren Störungsordnung  $\langle n \rangle$  bei  $N_s = 3$ ,  $U = 4$ ,  $V = 0.75\sqrt{2}$ ,  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $\varepsilon_d = -2$  und  $\beta = 1$  in Abhängigkeit der Binngröße  $k$ .

Abb. 5.6 zeigt die Größe des Stichprobenfehlers als Funktion der Binngröße  $k$  im Binning Verfahren nach Gl. 4.64. Es standen über  $3 \cdot 10^6$  Messwerte für das Binning zur Verfügung. Der schnelle Anstieg des Stichprobenfehlers bei kleinen, und damit stark korrelierten Bins ist klar erkennbar, während bei großen  $k$  der Fehler auf konstantem Niveau oszilliert. Man kann aus der Graphik abschätzen, dass die Autokorrelationszeit bei etwa 400 Updates liegt, denn ab diesem Bereich bleibt der Fehler von den Oszillationen abgesehen nahezu konstant.

Abb. 5.7 zeigt den Verlauf der gemessenen mittleren Störungsordnung  $\langle n \rangle$  im gleichen System in Abhängigkeit der Zahl der Messungen  $N$ . Es erfolgte eine Messung nach jedem Update Schritt. Die Fehler sind durch ein Binning Verfahren bestimmt worden. Wie zu erwarten war, konvergiert die Messung bei hohem  $N$ . Bei wenigen Einzelmessungen sind die Messwerte nicht mit dem Konvergenzwert vereinbar. Die Ursache hierfür ist, dass in der sogenannten Aufwärmphase die Markov Kette noch stark von der willkürlich gewählten Startkonfiguration abhängt, und der triviale Messfehler bei wenigen Messungen auf Grund der hohen Korrelation der Messungen den tatsächlichen Fehler stark unterschätzt. Wir erinnern uns, dass die Abschätzung der Autokorrelationszeit bei 400 Updates liegt. Erst wenn  $N$  ein Vielfaches dieses Wertes ist, kann der Fehler seriös mit dem Binning Verfahren bestimmt werden.

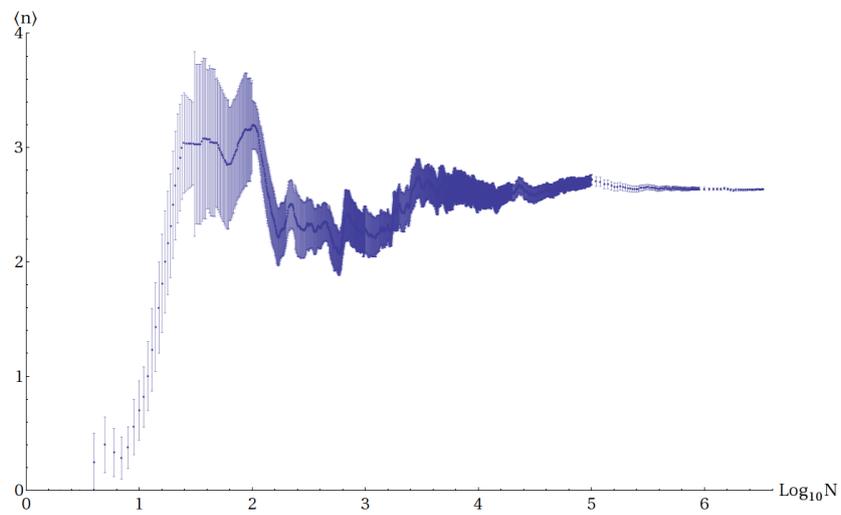


Abbildung 5.7: Mittlere Störungsordnung  $\langle n \rangle$  bei  $N_s = 3$ ,  $U = 4$ ,  $V = 0.75\sqrt{2}$ ,  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $\varepsilon_d = -2$  und  $\beta = 1$  in Abhängigkeit der Anzahl  $N$  der Messungen.

### 5.3 Weitere Ergebnisse

Die Ergebnisse der bisher gezeigten Simulationen sind besser durch exakte Diagonalisierung erhältlich. Wir gehen nun zu einem großen System mit  $N_s = 513$  2-fach spinentarteten Zuständen über. Systeme dieser Größe sind durch exakte Diagonalisierung nicht numerisch lösbar, da der Rechenaufwand zu groß wird. Wir wählen die weiteren Parameter zu  $V = 0.75$ ,  $t = 1$  und  $\mu = 0$ .  $\beta$  und  $U$  sind nun variabel. Wir bleiben bei Halbfüllung, indem wir  $\varepsilon_d$  jeweils gleich  $-\frac{U}{2}$  wählen. Die inverse Temperatur  $\beta$  ist variabel im Bereich zwischen 0.1 und 75.

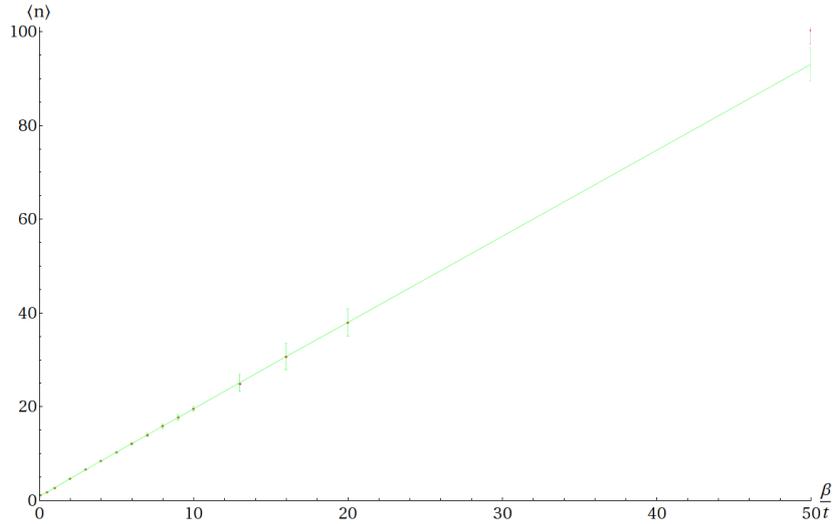


Abbildung 5.8: Mittlere Störungsordnung bei  $N_s = 513$ ,  $U = 4$ ,  $V = 0.75$ ,  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $\varepsilon_d = -2$  als Funktion von  $\beta$ . Messwerte sind rot eingezeichnet, grün sind die mit Gl. 4.73 aus  $\langle n_{d\uparrow}n_{d\downarrow}$ ,  $\langle n_{d\uparrow} \rangle$  und  $\langle n_{d\downarrow} \rangle$  berechneten Werte.

Abb. 5.8 und 5.9 zeigen die gemessene mittlere Störungsordnung und zum Vergleich die mit Gl. 4.73 aus den gemessenen Werten  $\langle n_{d\uparrow}n_{d\downarrow} \rangle$ ,  $\langle n_{d\uparrow} \rangle$  und  $\langle n_{d\downarrow} \rangle$  berechneten mittleren Störungsordnungen bei  $U = 3$  und  $U = 4$ . Mit Ausnahme des Wertes bei  $\beta = 50$  in Abb. 5.8 ist die geforderte Relation in Gl. 4.73 im Rahmen der Standardabweichung erfüllt, immer aber innerhalb von 2 Standardabweichungen. Der Messfehler wächst mit steigendem  $\beta$  und der Störungsordnung, da die Simulationszeit mit der Matrizengröße mindestens kubisch anwächst. Auf die Messung bei höheren  $\beta$ -Werten haben wir aus diesem Grund verzichtet.

In Abb. 5.10 ist die Doppelbesetzungswahrscheinlichkeit im System bei  $U = 4$  in Abhängigkeit der inversen Temperatur zu sehen. Der Verlauf ähnelt qualitativ dem in Abb. 5.1. Die starke Abweichung der gemessenen und der mit Gl. 4.73 aus  $\langle n \rangle$  berechneten Werte bei  $\beta = 50$ , die auch nicht mit der Fehlerabschätzung vereinbar ist, ist durch zu kurze Messdauer begründet. Es standen nur  $N = 4.8 \cdot 10^4$  Messungen zur Verfügung, die im Abstand von jeweils 10 Updates gemessen wurden. Da die Autokorrelationszeit in diesem größeren System höher als die im vorigen Abschnitt bestimmte liegen dürfte, ist die Ergodizität noch nicht erreicht, d. h. die Unabhängigkeit der Markov Kette von der Startkonfiguration noch nicht gegeben. Der angegebene Fehler ist damit unterschätzt, da zur Fehlerbestimmung mit dem Binning Verfahren unabhängige Bins nötig sind. Es ist also eine deutlich längere Messdauer nötig.

Bei  $U = 3$  liegen die Werte von  $\langle n_{d\uparrow}n_{d\downarrow} \rangle$  vergleichsweise etwas höher, da die Coulomb Ab-

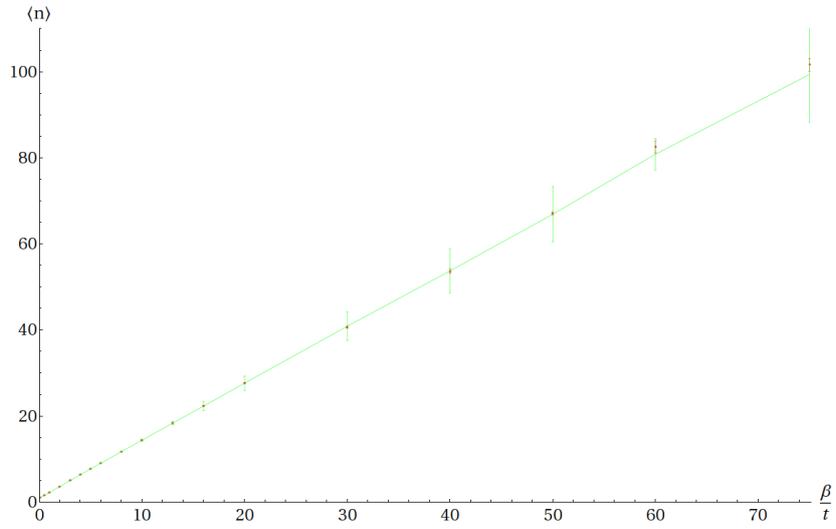


Abbildung 5.9: Mittlere Störungsordnung bei  $N_s = 513$ ,  $U = 3$ ,  $V = 0.75$ ,  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $\varepsilon_d = -1.5$  als Funktion von  $\beta$ . Messwerte sind rot eingezeichnet, grün sind die mit Gl. 4.73 aus  $\langle n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}$ ,  $\langle n_{d\uparrow} \rangle$  und  $\langle n_{d\downarrow} \rangle$  berechneten Werte.

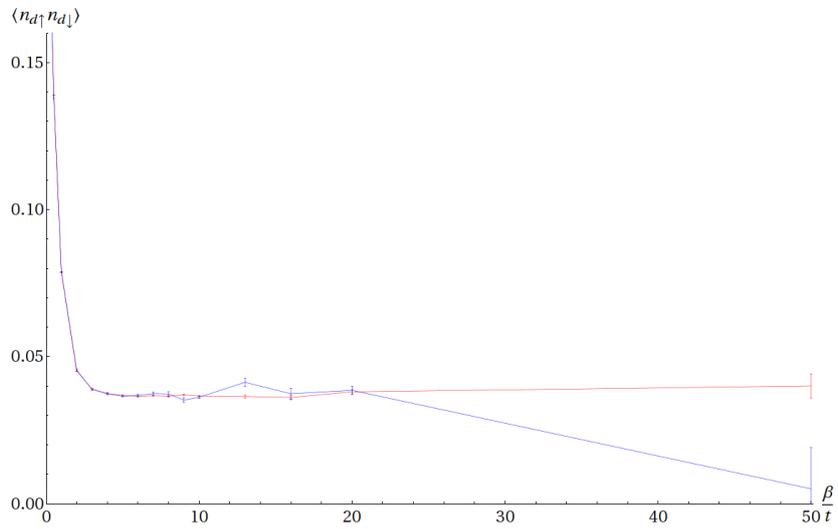


Abbildung 5.10:  $\langle n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \rangle$  bei  $N_s = 513$ ,  $U = 4$ ,  $V = 0.75$ ,  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $\varepsilon_d = -2$  als Funktion von  $\beta$ . Rot eingezeichnet sind die Messwerte, blau die mit Gl. 4.73 aus  $\langle n \rangle$  berechneten.

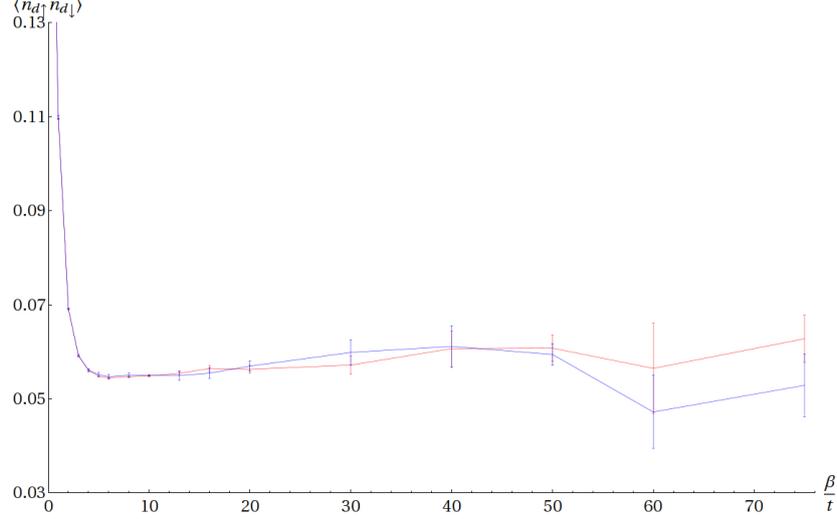


Abbildung 5.11:  $\langle n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \rangle$  bei  $N_s = 513$ ,  $U = 3$ ,  $V = 0.75$ ,  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $\varepsilon_d = -1.5$  als Funktion von  $\beta$ . Rot eingezeichnet sind die Messwerte, blau die mit Gl. 4.73 aus  $\langle n \rangle$  berechneten.

stoßung auf der Störstelle schwächer ist, s. Abb. 5.11. Bei sehr tiefen  $\beta$ , also hohen Temperaturen, geht  $\langle n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \rangle$  gegen  $\frac{1}{4}$ , mit steigendem  $\beta$  fällt die Doppelbesetzungswahrscheinlichkeit zunächst ab, um bei noch tieferen Temperaturen wieder leicht anzusteigen. Auch hier ist deutlich zu sehen, dass die Werte bei  $\beta = 60$  und  $\beta = 75$  noch nicht konvergiert sind, aus dem gleichen Grund wie bei der Messung mit  $U = 4$ . Bei diesen Simulationen war die Zahl der Messungen nur  $N = 9 \cdot 10^3$  bzw.  $N = 2.5 \cdot 10^4$ .

$U$	$\langle n_{d\uparrow} \rangle$	$\langle n_{d\downarrow} \rangle$	$\langle \frac{n_{d\uparrow} + n_{d\downarrow}}{2} \rangle$
1	$0.50017 \pm 0.0009$	$0.49984 \pm 0.0009$	$0.500005 \pm 0.00064$
2	$0.4972 \pm 0.0081$	$0.5028 \pm 0.0081$	$0.5 \pm 0.0057$
3	$0.55 \pm 0.04$	$0.45 \pm 0.04$	$0.5 \pm 0.028$
4	$0.249 \pm 0.051$	$0.751 \pm 0.051$	$0.5 \pm 0.036$

Tabelle 5.2: Besetzungsdichte der d-Elektronen bei  $N_s = 513$ ,  $V = 0.75$ ,  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $\varepsilon_d = -\frac{U}{2}$  und  $\beta = 20$ .

Abb. 5.12 zeigt gemessene Werte von  $G_{\uparrow}(\tau)$  bei verschiedenen Wechselwirkungsstärken  $U$ . Die Abweichungen von der in Halbfüllung geforderten Symmetrie um  $\tau = \frac{\beta}{2}$  bei den höheren  $U$ -Werten entstehen durch Polarisierung der Auxiliary Spins. Exemplarisch zeigt 5.13  $G_{\uparrow}(\tau)$  und  $G_{\downarrow}(\tau)$  bei  $U = 4$ . Sie sollten identisch sein, da der Hamiltonian nicht spinabhängig ist. Gleichfalls unterscheiden sich durch die Polarisierung auch die mittleren Besetzungszahlen  $\langle n_{d\uparrow} \rangle$  und  $\langle n_{d\downarrow} \rangle$ , wie man in Tab. 5.2 erkennen kann. Bei den hohen Werten von  $U$  wird die Abweichung von 0.5 zunehmend größer. Die Halbfüllung ist aber weiterhin gegeben, und auch der Mittelwert der beiden Green Funktionen in Abb. 5.13 ist symmetrisch um  $\tau = \frac{\beta}{2}$ . Die Abweichung von der Teilchen-Loch Symmetrie ist zu beobachten, wenn die Monte Carlo Simulation noch nicht konvergiert ist. Die Markov Kette bewegt sich in einem Teilbereich

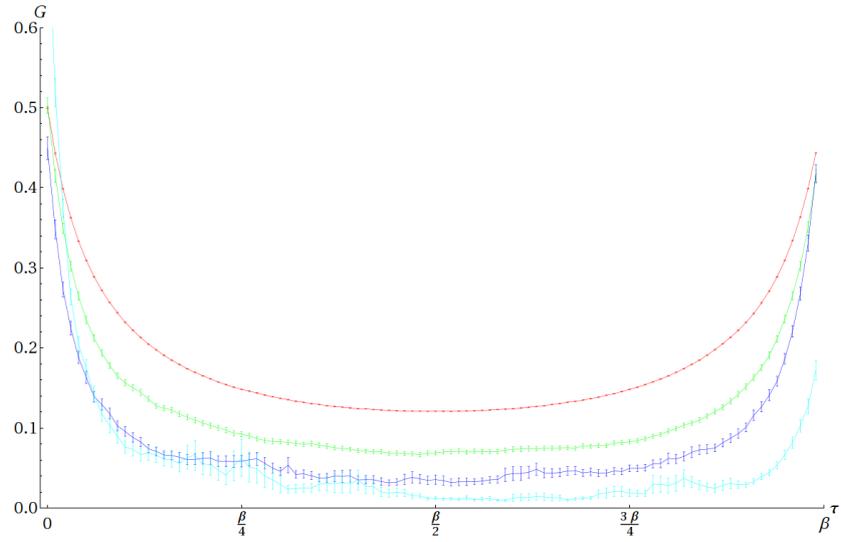


Abbildung 5.12: Green Funktion der  $d_{\uparrow}$ -Elektronen bei  $N_s = 513$ ,  $V = 0.75$ ,  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $\beta = 20$ ,  $\varepsilon_d = -\frac{U}{2}$  als Funktion der imaginären Zeit  $\tau$ . Die roten Werte entsprechen  $U = 1$ , die grünen  $U = 2$ , die blauen  $U = 3$  und die türkisen  $U = 4$ .

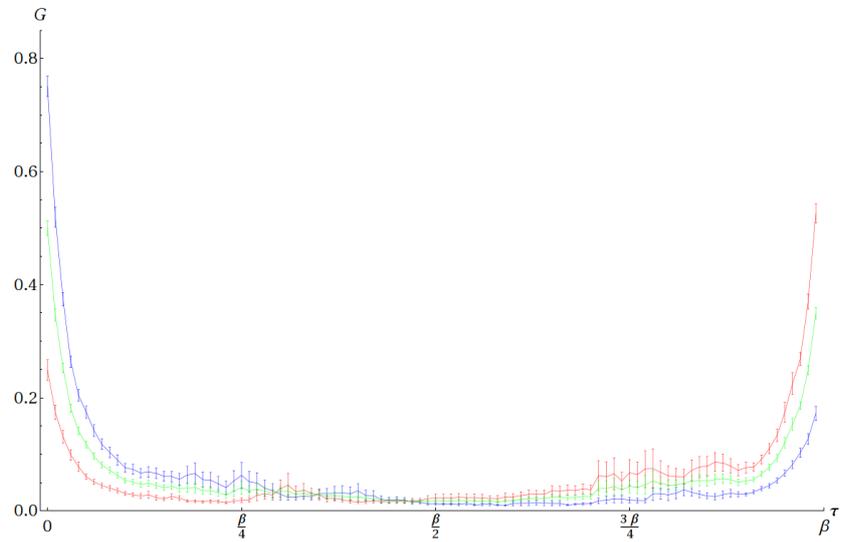


Abbildung 5.13: Green Funktion der d-Elektronen bei  $N_s = 513$ ,  $V = 0.75$ ,  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $\beta = 20$ ,  $U = 4$ ,  $\varepsilon_d = -2$  als Funktion der imaginären Zeit  $\tau$ . Die blauen Werte entsprechen  $G_{\uparrow}$ , die roten  $G_{\downarrow}$ . Grün ist der Mittelwert beider Messungen.

des Konfigurationsraums, in welchem die Besetzungszahl  $n_{\uparrow}$  bevorzugt ist. Ergodisch ist die Simulation erst, wenn auch die Konfigurationen in einer Region mit bevorzugtem  $n_{\downarrow}$  von der Kette erreicht werden. Wir haben also bei  $N = 2.4 \cdot 10^5$  zu wenige Updates durchgeführt, um langreichweitige Autokorrelationen zu überwinden. Bei einer deutlich höheren Messdauer würden die Besetzungszahlen  $\langle n_{\uparrow} \rangle$  und  $\langle n_{\downarrow} \rangle$  sowie auch  $G_{\uparrow}$  und  $G_{\downarrow}$  konvergieren.

## 6 Kondo Modell

Wir wenden unsere Aufmerksamkeit nun dem Kondo Modell zu, welches durch den Hamiltonian

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (6.1)$$

$$\hat{H}_0 = -(\mu - \varepsilon_d - U/2)(n_{d\uparrow} + n_{d\downarrow}) - t \sum_{i,\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + c_{i+1\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) - \mu \sum_{i,\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}, \quad (6.2)$$

$$\hat{V} = U(n_{d\uparrow}n_{d\downarrow} - (n_{d\uparrow} + n_{d\downarrow})/2) + J\vec{S}_0^c \cdot \vec{S}_d \quad (6.3)$$

beschrieben wird.  $\vec{S}_0^c$  entspricht dem Spin der der Badelektronen am Ort  $i = 0$ . Da wir nun von der Impulsraum- zur Ortsraumdarstellung gewechselt haben, bezeichnen wir die Badelektronen nun als  $c$ -Elektronen, um Verwechslungen zu vermeiden. Wir schreiben im folgenden Teil kurz  $\vec{S}_c = \vec{S}_0^c$ .  $\vec{S}_d$  ist der Spin der Störstelle. Gegenüber dem herkömmlichen Kondo Modell haben wir zusätzlich einen Coulomb Term eingefügt, welcher die Doppelbesetzung der Störstelle unterdrückt. Dies ist wichtig für die Konvergenz der Monte Carlo Simulation, da der Grundzustand des Kondo Modells ein Spin Singlet ist [26]. Wie schon in Abschnitt 1.3 erwähnt wurde, ist das Kondo Modell in gewissen Parameterregimes äquivalent zum Anderson Modell. Das gilt bei Halbfüllung für kleine Kopplungen  $J$  und  $J = \frac{8V_{\text{Anderson}}^2}{U_{\text{Anderson}}}$  [27]. Bei großen Coulomb Abstoßungen im Anderson Modell ist die Doppelbesetzung und damit auch das Hüpfen von Elektronen auf die Störstelle völlig unterdrückt, was zu einer effektiven Spin-Spin Wechselwirkung führt.

Unser Ziel ist es, auch dieses Modell mit dem Continuous Time Auxiliary Field Algorithmus zu lösen. Die Vorgehensweise ist weitgehend analog zu Kapitel 3. Die freie Green Funktion mit dem Hamiltonian  $\hat{H}_0$  wird im Impulsraum exakt durch das Resolventen Verfahren gelöst und anschließend in die Ortsraumdarstellung fouriertransformiert. Die Wechselwirkung wird durch eine Hubbard Stratonovich Transformation nach Einteilchenoperatoren entwickelt, eine Störungsentwicklung durchgeführt und die Berechnung der Spur einer Matrix mit Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren äquivalent durch die Berechnung der Determinante von Matrizen ersetzt, welche keine Operatoren enthalten.

### 6.1 Erweiterte Hubbard-Stratonovich Transformation

Bei der Umsetzung dieses Verfahrens für den Kondo Hamiltonian liegt die Schwierigkeit in der Durchführung der Hubbard-Stratonovich Transformation der Störung  $\hat{V}$ . Es gibt 2 obligatorische Eigenschaften, damit der Störungsterm als Exponentialfunktion von Einteilchenoperatoren geschrieben werden kann: Zum einen muss  $\hat{V}$  dem Quadrat einer Funktion von Einteilchenoperatoren gleichen, und zum anderen muss  $\hat{V}^2 \sim \hat{V}$  erfüllt sein, damit die verschiedenen Potenzen von  $\hat{V}$ , welche in der Reihenentwicklung der Exponentialfunktion auf der rechten Seite der Gl. 3.14 auftauchen, auf die erste Potenz zurückgeführt werden können. Nach

Gl. 3.11 und 3.10 sind diese Bedingungen vom Störungsterm im Anderson Modell  $\hat{V}_{\text{Anderson}}$  erfüllt.

$\hat{V}_{\text{Kondo}}$ , im Folgenden wieder mit  $\hat{V}$  bezeichnet, hat diese geforderten Eigenschaften nicht. Wir zeigen aber, dass auch eine Zerlegung des Störungsterms in mehrere Summanden und deren separate Hubbard-Stratonovich Transformation erlaubt ist. Mit  $\hat{V} = \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \hat{V}_\alpha$  schreiben wir analog zu Gl. 3.5

$$Z = e^{-N_\alpha K} e^{N_\alpha K} \text{Tr} \left[ e^{-\beta \hat{H}} \right] \quad (6.4)$$

$$= e^{-N_\alpha K} \text{Tr} \left[ e^{-\beta \hat{H}_0} T e^{-\int_0^\beta d\tau (\sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \hat{V}_\alpha(\tau) - K/\beta)} \right] \quad (6.5)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_{\tau_{n-1}}^\beta d\tau_n \left( \frac{K}{\beta} \right)^n \cdot \text{Tr} \left[ e^{-(\beta-\tau_n)\hat{H}_0} \left( \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \mathbb{1} - \frac{\beta \hat{V}_\alpha}{K} \right) \cdots e^{-(\tau_2-\tau_1)\hat{H}_0} \left( \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \mathbb{1} - \frac{\beta \hat{V}_\alpha}{K} \right) e^{-\tau_1 \hat{H}_0} \right]. \quad (6.6)$$

Von der zweiten auf die dritte Zeile des Gleichungssystems haben wir den Koeffizienten  $e^{-N_\alpha K}$  weggelassen, da er sich wie bereits erläutert bei Mittelwertbildungen nach Gl. 3.1 ohnehin kürzen würde. Wenn alle  $\hat{V}_\alpha$  die oben genannten 2 geforderten Eigenschaften besitzen, kann jede Differenz  $\mathbb{1} - \frac{\beta \hat{V}_\alpha}{K}$  einzeln transformiert werden. Der erste Summand der Störung, der Coulomb Term, entspricht  $\hat{V}_{\text{Anderson}}$  und erfüllt natürlich die Bedingungen. Für die Spin-Spin Wechselwirkung gilt aber  $(\vec{S}_c \cdot \vec{S}_d)^2 \not\propto \vec{S}_c \cdot \vec{S}_d$ , weshalb wir sie weiter zerlegen.

$$\vec{S}_c \cdot \vec{S}_d = S_c^z S_d^z + S_c^x S_d^x + S_c^y S_d^y \quad (6.7)$$

$$= S_c^z S_d^z + \frac{1}{2} (S_c^+ + S_c^-) \frac{1}{2} (S_d^+ + S_d^-) + \frac{1}{2i} (S_c^+ - S_c^-) \frac{1}{2i} (S_d^+ - S_d^-) \quad (6.8)$$

$$= S_c^z S_d^z + \frac{1}{2} (S_c^+ S_d^- + S_c^- S_d^+). \quad (6.9)$$

Dabei haben wir die Operatoren der Ortskomponenten des Spins,  $S^x$  und  $S^y$ , nach Spin-Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren  $S^+$  und  $S^-$  entwickelt [28]. Die  $z$ -Komponente des Spins entspricht per Definition der halben Magnetisierung,  $S^z = \frac{1}{2}m$ . Die Erhöhung des Spins durch den Erzeugungsoperator wird durch Vernichtung eines Spin-Down Elektrons und gleichzeitige Erzeugung eines Spin-Up Elektrons erreicht,  $S_c^+ = c_{0\uparrow}^\dagger c_{0\downarrow}$  und  $S_d^+ = d_{\uparrow}^\dagger d_{\downarrow}$  bzw. umgekehrt für die Verringerung des Spins durch den Vernichtungsoperator. Damit gilt [29]

$$\vec{S}_c \cdot \vec{S}_d = \frac{1}{4} (m_c m_d + 2c_{0\uparrow}^\dagger c_{0\downarrow} d_{\downarrow}^\dagger d_{\uparrow} + 2c_{0\downarrow}^\dagger c_{0\uparrow} d_{\uparrow}^\dagger d_{\downarrow}) \quad (6.10)$$

$$= -\frac{1}{4} \left( -m_c m_d + (c_{0\uparrow}^\dagger d_{\uparrow} + d_{\downarrow}^\dagger c_{0\downarrow})^2 + (c_{0\downarrow}^\dagger d_{\downarrow} + d_{\uparrow}^\dagger c_{0\uparrow})^2 \right). \quad (6.11)$$

Diese Gleichungen gelten für Fermionen auf Grund des Pauli Prinzips, welches nur die Besetzungszahlen 0 und 1 jedes Zustands erlaubt. 2 aufeinanderfolgende Erzeugungs- (Vernichtungs-)operatoren ohne dazwischen liegenden Vernichtungs- (Erzeugungs-)operator haben daher den Wert 0. Berücksichtigen wir zudem die Vertauschungsregeln für fermioni-

sche Operatoren ergibt sich

$$\left(c_{0\uparrow}^\dagger d_\uparrow + d_\downarrow^\dagger c_{0\downarrow}\right)^2 = \left(c_{0\uparrow}^\dagger d_\uparrow\right)^2 + 2c_{0\uparrow}^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger c_{0\downarrow} + \left(d_\downarrow^\dagger c_{0\downarrow}\right)^2 = -2c_{0\uparrow}^\dagger c_{0\downarrow} d_\downarrow^\dagger d_\uparrow, \quad (6.12)$$

$$\left(c_{0\downarrow}^\dagger d_\downarrow + d_\uparrow^\dagger c_{0\uparrow}\right)^2 = \left(c_{0\downarrow}^\dagger d_\downarrow\right)^2 + 2c_{0\downarrow}^\dagger d_\downarrow d_\uparrow^\dagger c_{0\uparrow} + \left(d_\uparrow^\dagger c_{0\uparrow}\right)^2 = -2c_{0\downarrow}^\dagger c_{0\uparrow} d_\uparrow^\dagger d_\downarrow, \quad (6.13)$$

$$\left(\left(c_{0\uparrow}^\dagger d_\uparrow + d_\downarrow^\dagger c_{0\downarrow}\right)^2\right)^2 = \left(\left(c_{0\downarrow}^\dagger d_\downarrow + d_\uparrow^\dagger c_{0\uparrow}\right)^2\right)^2 = 0. \quad (6.14)$$

Die letzte Gleichung besagt, dass die beiden quadratischen Terme die geforderten Bedingungen für Hubbard-Stratonovich Transformationen erfüllen. Wir fahren mit der weiteren Zerlegung des ersten Terms fort und verwenden  $m_c = m_{c_0}$  sowie  $n_c = n_{c_0}$ .

$$-m_c m_d = -(n_{c\uparrow} - n_{c\downarrow})(n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow}) \quad (6.15)$$

$$= -n_{c\uparrow} n_{d\uparrow} - n_{c\downarrow} n_{d\downarrow} + n_{c\uparrow} n_{d\downarrow} + n_{c\downarrow} n_{d\uparrow}. \quad (6.16)$$

Machen wir uns zu Nutze, dass für Besetzungszahlen  $n^2 = n$  gilt, erhalten wir

$$\begin{aligned} -m_c m_d &= \frac{1}{2} \left( (n_{c\uparrow} - n_{d\uparrow})^2 - (n_{c\uparrow} + n_{d\uparrow}) + (n_{c\downarrow} - n_{d\downarrow})^2 - (n_{c\downarrow} + n_{d\downarrow}) + \right. \\ &\quad \left. + (n_{c\uparrow} + n_{d\downarrow})^2 - (n_{c\uparrow} + n_{d\downarrow}) + (n_{c\downarrow} + n_{d\uparrow})^2 - (n_{c\downarrow} + n_{d\uparrow}) \right) \end{aligned} \quad (6.17)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \left( (n_{c\uparrow} - n_{d\uparrow})^2 + (n_{c\downarrow} - n_{d\downarrow})^2 + (n_{c\uparrow} + n_{d\downarrow})^2 + \right. \\ &\quad \left. + (n_{c\downarrow} + n_{d\uparrow})^2 \right) - (n_{c\downarrow} + n_{c\uparrow} + n_{d\uparrow} + n_{d\downarrow}). \end{aligned} \quad (6.18)$$

Die in der letzten Klammer zusammengefassten Besetzungszahloperatoren sind reine Einteilchenoperatoren, welche zu dem exakt lösbaeren freien Hamiltonian  $\hat{H}_0$  gezählt werden können, also keine Hubbard-Stratonovich Transformation benötigen. Wir prüfen, ob eine solche für die 4 anderen Terme möglich ist. Sie sind das Quadrat einer Funktion von Einteilchenoperatoren, also ist die erste Anforderung erfüllt. Zum Überprüfen der zweiten Bedingung berechnen wir die Quadrate der Störungsterme, wobei wir die Zustände  $k\sigma$  bzw.  $d\sigma$  durch  $a$  und  $b$  abkürzen. Mit  $\varepsilon = \pm 1$  gilt

$$(n_a + \varepsilon n_b)^4 = (2\varepsilon n_a n_b + n_a + n_b)^2 \quad (6.19)$$

$$= 4n_a n_b + 4\varepsilon n_a n_b (n_a + n_b) + 2n_a n_b + n_a + n_b \quad (6.20)$$

$$= 4n_a n_b + 8\varepsilon n_a n_b + 2n_a n_b + n_a + n_b \quad (6.21)$$

$$= (6 + 8\varepsilon) n_a n_b + n_a + n_b. \quad (6.22)$$

Für  $\varepsilon = -1$ , was den ersten beiden Termen in Gl. 6.18 entspricht, ergibt sich

$$\left((n_a - n_b)^2\right)^2 = -2n_a n_b + n_a + n_b \quad (6.23)$$

$$= (n_a - n_b)^2, \quad (6.24)$$

was unsere Anforderung der Hubbard-Stratonovich Transformation erfüllt. Allerdings gilt dies nicht für die beiden verbleibenden Terme mit  $\varepsilon = +1$ .

$$\left((n_a + n_b)^2\right)^2 = 14n_a n_b + n_a + n_b \quad (6.25)$$

$$= 7(2n_a n_b + n_a + n_b) - 6(n_a + n_b) \quad (6.26)$$

$$= 7(n_a + n_b)^2 - 6(n_a + n_b). \quad (6.27)$$

Um das Kondo Modell trotzdem mit der Continuous Time Auxiliary Field Methode lösen zu können, ersetzen wir die Störungsterme der Form  $(n_a + n_b)^2$  gemäß

$$(n_a + n_b - \mathbf{1})^2 = (n_a + n_b)^2 - 2(n_a + n_b) + \mathbf{1}. \quad (6.28)$$

Der linksseitige neue Term erfüllt die Forderung  $V_\alpha^2 = V_\alpha$  nach

$$\left((n_a + n_b - \mathbf{1})^2\right)^2 = \left((n_a + n_b)^2 - 2(n_a + n_b) + \mathbf{1}\right)^2 \quad (6.29)$$

$$= (2n_a n_b - (n_a + n_b - \mathbf{1}))^2 \quad (6.30)$$

$$= 4n_a n_b - 4n_a n_b (n_a + n_b - \mathbf{1}) + (n_a + n_b)^2 - 2(n_a + n_b) + \mathbf{1} \quad (6.31)$$

$$= 4n_a n_b - 4n_a n_b + n_a + 2n_a n_b + n_b - 2(n_a + n_b) + \mathbf{1} \quad (6.32)$$

$$= 2n_a n_b - n_a - n_b + \mathbf{1} \quad (6.33)$$

$$= (n_a + n_b - \mathbf{1})^2. \quad (6.34)$$

Mit Gl. 6.11, Gl. 6.18 und Gl. 6.28 erhalten wir

$$\begin{aligned} \vec{S}_c \cdot \vec{S}_d &= -\frac{1}{4} \left( (c_{0\uparrow}^\dagger d_\uparrow + d_\downarrow^\dagger c_{0\downarrow})^2 + (c_{0\downarrow}^\dagger d_\downarrow + d_\uparrow^\dagger c_{0\uparrow})^2 + \right. \\ &\quad + \frac{1}{2} (n_{c\uparrow} - n_{d\uparrow})^2 + \frac{1}{2} (n_{c\downarrow} - n_{d\downarrow})^2 + \\ &\quad + \frac{1}{2} (n_{c\uparrow} + n_{d\downarrow} - \mathbf{1})^2 + (n_{c\uparrow} + n_{d\downarrow}) - \frac{1}{2} + \\ &\quad + \frac{1}{2} (n_{c\downarrow} + n_{d\uparrow} - \mathbf{1})^2 + (n_{c\downarrow} + n_{d\uparrow}) - \frac{1}{2} - \\ &\quad \left. - (n_{c\downarrow} + n_{c\uparrow} + n_{d\uparrow} + n_{d\downarrow}) \right). \end{aligned} \quad (6.35)$$

Wir können diesen Ausdruck weiter zusammenfassen, wobei sich die Terme in erster Potenz aufheben. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} \vec{S}_c \cdot \vec{S}_d &= -\frac{1}{4} \left( (c_{0\uparrow}^\dagger d_\uparrow + d_\downarrow^\dagger c_{0\downarrow})^2 + (c_{0\downarrow}^\dagger d_\downarrow + d_\uparrow^\dagger c_{0\uparrow})^2 + \right. \\ &\quad + \frac{1}{2} (n_{c\uparrow} - n_{d\uparrow})^2 + \frac{1}{2} (n_{c\downarrow} - n_{d\downarrow})^2 + \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} (n_{c\uparrow} + n_{d\downarrow} - \mathbf{1})^2 + \frac{1}{2} (n_{c\downarrow} + n_{d\uparrow} - \mathbf{1})^2 - \mathbf{1} \right). \end{aligned} \quad (6.36)$$

Es ist uns also gelungen, die Spin-Spin Wechselwirkung in 6 Terme zu zerlegen, welche jeweils einzeln eine Hubbard-Stratonovich Transformation zulassen. Der siebte Term, die  $\mathbf{1}$  kürzt sich bei Mittelwertbildung nach 3.1, da es sich um eine Konstante handelt, weshalb wir ihn im Folgenden weglassen.

Wir kommen nun zur Transformation der einzelnen Störungsterme. Für den Coulomb Term ist die Lösung aus Abschnitt 3.2 bekannt. Sie lautet nach Gl. 3.12

$$\hat{V}_1 = -\frac{U}{2} (n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow})^2, \quad (6.37)$$

$$\mathbf{1} - \frac{\beta \hat{V}_1}{K} = \frac{1}{2} \sum_{s=\pm 1} e^{\gamma s (n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow})}, \quad (6.38)$$

$$\gamma = \operatorname{acosh} \left( \mathbf{1} + \frac{\beta U}{2K} \right). \quad (6.39)$$

Wenn wir die Operatoren nach Gl. 3.32 als Matrizen schreiben, müssen wir beachten, dass wir nun eine Ortsraumdarstellung gewählt haben. Das 0,0-Element entspricht  $d^\dagger d$ , das 0,1-Element  $d^\dagger c_0$  usw. Die zu  $\alpha = 1$  gehörige Störungsmatrix, welche wir zum Übergang von der Berechnung von Spuren zu Determinanten gemäß Abschnitt 3.3 eingeführt haben, bestimmen wir zu

$$v_{1s}^\sigma = \begin{pmatrix} \gamma(-1)^\sigma s & & & \\ & 0 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}. \quad (6.40)$$

Wir gehen zu den weiteren Störungstermen und erhalten nach der gleichen Methode für die beiden Terme der Form  $(n_a - n_b)^2$

$$\hat{V}_2 = -\frac{J}{8} (n_{c\uparrow} - n_{d\uparrow})^2, \quad (6.41)$$

$$\mathbb{1} - \frac{\beta \hat{V}_2}{K} = \frac{1}{2} \sum_{s=\pm 1} e^{\theta s (n_{c\uparrow} - n_{d\uparrow})} \quad (6.42)$$

$$= \mathbb{1} + \frac{\theta^2}{2!} (n_{c\uparrow} - n_{d\uparrow})^2 + \frac{\theta^4}{4!} (n_{c\uparrow} - n_{d\uparrow})^4 + \dots \quad (6.43)$$

$$= \mathbb{1} - \frac{8}{J} \hat{V}_2 \left( \frac{\theta^2}{2!} + \frac{\theta^4}{4!} + \dots \right) \quad (6.44)$$

$$\Leftrightarrow \mathbb{1} + \frac{\beta J}{8K} = \cosh \theta, \quad (6.45)$$

$$v_{2s}^\sigma = \begin{pmatrix} -\delta_{\sigma,\uparrow} \theta s & & & \\ & \delta_{\sigma,\uparrow} \theta s & & \\ & & 0 & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}. \quad (6.46)$$

sowie

$$\hat{V}_3 = -\frac{J}{8} (n_{c\downarrow} - n_{d\downarrow})^2, \quad (6.47)$$

$$\mathbb{1} - \frac{\beta \hat{V}_3}{K} = \frac{1}{2} \sum_{s=\pm 1} e^{\theta s (n_{c\downarrow} - n_{d\downarrow})}, \quad (6.48)$$

$$v_{3s}^\sigma = \begin{pmatrix} -\delta_{\sigma,\downarrow} \theta s & & & \\ & \delta_{\sigma,\downarrow} \theta s & & \\ & & 0 & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}. \quad (6.49)$$

Ganz analog ergibt sich auch für die beiden Terme der Form  $(n_a + n_b - 1)^2$

$$\hat{V}_4 = -\frac{J}{8} (n_{c\uparrow} + n_{d\downarrow} - 1)^2, \quad (6.50)$$

$$\mathbb{1} - \frac{\beta \hat{V}_4}{K} = \frac{1}{2} \sum_{s=\pm 1} e^{\theta s (n_{c\uparrow} + n_{d\downarrow} - 1)}, \quad (6.51)$$

$$v_{4s}^\sigma = \begin{pmatrix} -\delta_{\sigma,\uparrow} \theta s & & & \\ & -\delta_{\sigma,\downarrow} \theta s & & \\ & & 0 & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}. \quad (6.52)$$

und

$$\hat{V}_5 = -\frac{J}{8} (n_{c\downarrow} + n_{d\uparrow} - \mathbf{1})^2, \quad (6.53)$$

$$\mathbf{1} - \frac{\beta \hat{V}_5}{K} = \frac{1}{2} \sum_{s=\pm 1} e^{\theta s (n_{c\downarrow} + n_{d\uparrow} - \mathbf{1})}, \quad (6.54)$$

$$v_{5s}^\sigma = \begin{pmatrix} -\delta_{\sigma,\downarrow} \theta s & & & \\ & -\delta_{\sigma,\uparrow} \theta s & & \\ & & 0 & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}. \quad (6.55)$$

Bei den beiden letzten übrigen Termen bricht die Reihenentwicklung der Exponentialfunktion schon vor der vierten Ordnung ab wegen Gl. 6.14. Es ergibt sich also

$$\hat{V}_6 = -\frac{J}{4} (c_{0\uparrow}^\dagger d_\uparrow + d_\downarrow^\dagger c_{0\downarrow})^2, \quad (6.56)$$

$$\mathbf{1} - \frac{\beta \hat{V}_6}{K} = \frac{1}{2} \sum_{s=\pm 1} e^{\nu s (c_{0\uparrow}^\dagger d_\uparrow + d_\downarrow^\dagger c_{0\downarrow})} \quad (6.57)$$

$$= \mathbf{1} + \frac{\nu^2}{2!} (c_{0\uparrow}^\dagger d_\uparrow + d_\downarrow^\dagger c_{0\downarrow})^2 \quad (6.58)$$

$$= \mathbf{1} - \frac{4}{J} \hat{V}_6 \frac{\nu^2}{2!} \quad (6.59)$$

$$\Leftrightarrow \sqrt{\frac{\beta J}{2K}} = \nu, \quad (6.60)$$

$$v_{6s}^\sigma = \begin{pmatrix} 0 & \delta_{\sigma,\downarrow} \nu s & 0 & \cdots \\ \delta_{\sigma,\uparrow} \nu s & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (6.61)$$

sowie

$$\hat{V}_7 = -\frac{J}{4} (c_{0\downarrow}^\dagger d_\downarrow + d_\uparrow^\dagger c_{0\uparrow})^2, \quad (6.62)$$

$$\mathbf{1} - \frac{\beta \hat{V}_7}{K} = \frac{1}{2} \sum_{s=\pm 1} e^{\nu s (c_{0\downarrow}^\dagger d_\downarrow + d_\uparrow^\dagger c_{0\uparrow})}, \quad (6.63)$$

$$v_{7s}^\sigma = \begin{pmatrix} 0 & \delta_{\sigma,\uparrow} \nu s & 0 & \cdots \\ \delta_{\sigma,\downarrow} \nu s & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (6.64)$$

Wie in Gl. 3.161 bilden wir aus den einzelnen Störungsoperatoren die Matrix

$$e^{v_{\{\alpha_i, s_i\}}^\sigma} = \begin{pmatrix} e^{v_{\alpha_1, s_1}^\sigma} & & & \\ & \ddots & & \\ & & e^{v_{\alpha_n, s_n}^\sigma} & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}_{nN_s \times nN_s}. \quad (6.65)$$

## 6.2 Volle Green Funktion

Die nach der Hubbard-Stratonovich Transformation folgenden Schritte zur Herleitung der Zustandssumme als Reihenentwicklung der konfigurationsabhängigen Green Funktion nach Gl. 3.135 verlaufen völlig analog zu Kapitel 3, da die verwendeten Gleichheiten davon unabhängig sind, ob die Operatoren im Orts- oder Impulsraum dargestellt werden. Auch die Dyson Gleichung entspricht der bereits hergeleiteten Gl. 3.151. Im Gegensatz zur Behandlung des Anderson Modells enthalten nun aber nicht nur die  $dd$ -Elemente der  $v_{\alpha_i s_i}^\sigma$  Matrizen von 0 verschiedene Einträge. Dies war der Grund dafür, dass wir zur Bestimmung der Zustandssumme die Berechnung der Determinante von  $(G^{\{\tau_i, s_i\}})^{-1}$  auf die der Matrix  $(G_{dd}^{\{\tau_i, s_i\}})^{-1}$  reduziert haben. Allerdings ist auch nun eine Verringerung der Matrizengröße möglich, da nur die  $dd$ -,  $dc_0$ -,  $c_0d$ - und  $c_0c_0$ -Elemente der  $v_{\alpha_i s_i}^\sigma$  Matrizen ungleich 0 sind. Wir können uns also analog zu Abschnitt 3.6 auf den linken oberen  $2 \times 2$ -Block der Störungsmatrizen  $e^{v_{\alpha_i, s_i}^\sigma}$  und der freien Green Funktion  $G_{0\sigma}(\Delta\tau_i)$  beschränken. Dann erhalten wir mit der Dyson Gleichung die  $2n \times 2n$ -Matrix  $N_\sigma^{-1}(\{\tau_i, \alpha_i, s_i\})$ , um analog zu Gl. 3.161 die Zustandssumme zu berechnen.

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\alpha_1} \cdots \sum_{\alpha_n} \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_n=\pm 1} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_{\tau_{n-1}}^\beta d\tau_n \left(\frac{K}{2\beta}\right)^n \prod_{\sigma} \det [N_\sigma^{-1}(\{\tau_i, \alpha_i, s_i\})], \quad (6.66)$$

$$N_\sigma^{-1}(\{\tau_i, \alpha_i, s_i\}) = e^{v_{\alpha_i, s_i}^\sigma} - G_{0\sigma}^{\{\tau_i\}} \left( e^{v_{\alpha_i, s_i}^\sigma} - \mathbb{1} \right), \quad (6.67)$$

$$G_{0\sigma}^{\{\tau_i\}} = \begin{pmatrix} G_{dd}^{0\sigma}(\tau_1, \tau_1) & G_{dc_0}^{0\sigma}(\tau_1, \tau_1) & \cdots & G_{dd}^{0\sigma}(\tau_1, \tau_n) & G_{dc_0}^{0\sigma}(\tau_1, \tau_n) \\ G_{c_0d}^{0\sigma}(\tau_1, \tau_1) & G_{c_0c_0}^{0\sigma}(\tau_1, \tau_1) & \cdots & G_{c_0d}^{0\sigma}(\tau_1, \tau_n) & G_{c_0c_0}^{0\sigma}(\tau_1, \tau_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ G_{dd}^{0\sigma}(\tau_n, \tau_1) & G_{dc_0}^{0\sigma}(\tau_n, \tau_1) & \cdots & G_{dd}^{0\sigma}(\tau_n, \tau_n) & G_{dc_0}^{0\sigma}(\tau_n, \tau_n) \\ G_{c_0d}^{0\sigma}(\tau_n, \tau_1) & G_{c_0c_0}^{0\sigma}(\tau_n, \tau_1) & \cdots & G_{c_0d}^{0\sigma}(\tau_n, \tau_n) & G_{c_0c_0}^{0\sigma}(\tau_n, \tau_n) \end{pmatrix}_{2n \times 2n} \quad (6.68)$$

$$e^{v_{\alpha_i, s_i}^\sigma} = \begin{pmatrix} \left( e^{v_{\alpha_1, s_1}^\sigma} \right)_{0,0} & \left( e^{v_{\alpha_1, s_1}^\sigma} \right)_{0,1} & & & \\ \left( e^{v_{\alpha_1, s_1}^\sigma} \right)_{1,0} & \left( e^{v_{\alpha_1, s_1}^\sigma} \right)_{1,1} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \left( e^{v_{\alpha_n, s_n}^\sigma} \right)_{0,0} & \left( e^{v_{\alpha_n, s_n}^\sigma} \right)_{0,1} \\ & & & & \left( e^{v_{\alpha_n, s_n}^\sigma} \right)_{1,0} & \left( e^{v_{\alpha_n, s_n}^\sigma} \right)_{1,1} \end{pmatrix}_{2n \times 2n} \quad (6.69)$$

Wir bestimmen nun die freien Green Funktionen. Zunächst berechnen wir sie im Impulsraum wie in Abschnitt 2.3 mit dem Resolventen Verfahren als Funktion von Matsubara Frequenzen. Diese Rechnung ist einfacher als im Anderson Modell, da der freie Hamiltonian nach Gl. 6.2 keine Hybridisierungsterme enthält. Wir beginnen wieder mit Gl. 2.35 und multiplizieren die Zustände  $\langle d_\sigma |$  und  $| d_\sigma \rangle$ , wobei wir die Spin Indizes unterdrücken. Es gilt

$$\langle d | \left( i\omega - \hat{H}_0 \right) G_0(i\omega) | d \rangle = - \langle d | d \rangle \quad (6.70)$$

$$i\omega \langle d | G_0(i\omega) | d \rangle + (\mu - \varepsilon_d - U/2) \langle d | G_0(i\omega) | d \rangle = -\mathbb{1} \quad (6.71)$$

Anders als im Anderson Modell ist diese Gleichung nicht an das  $kd$ -Element gekoppelt. Wir

erhalten direkt

$$G_{dd}^0(i\omega) = \langle d|G_0(i\omega)|d\rangle = -\frac{\mathbb{1}}{i\omega + \mu - \varepsilon_d - U/2}. \quad (6.72)$$

Analog ergibt sich bei Multiplikation mit  $\langle k|$  und  $|k\rangle$  und den Einteilchenenergien aus Gl. 1.6

$$i\omega \langle k|G_0(i\omega)|k\rangle - \varepsilon_k \langle k|G_0(i\omega)|k\rangle = -\mathbb{1} \quad (6.73)$$

$$G_{kk}^0(i\omega) = \langle k|G_0(i\omega)|k\rangle = -\frac{\mathbb{1}}{i\omega - \varepsilon_k}. \quad (6.74)$$

Um zur freien Green Funktion in Abhängigkeit der imaginären Zeit  $\tau$  in Ortsraumdarstellung zu gelangen, führen wir eine zweifache Fouriertransformation durch. Es gilt

$$G_{c_0c_0}^0(\tau) = \langle Tc_0(\tau)c_0^\dagger(0)\rangle \quad (6.75)$$

$$= \frac{1}{N_s - 1} \sum_{k=1}^{N_s-1} \sum_{k'=1}^{N_s-1} \langle Tc_k(\tau)c_{k'}^\dagger(0)\rangle \quad (6.76)$$

$$= \frac{1}{N_s - 1} \sum_{k=1}^{N_s-1} \langle Tc_k(\tau)c_k^\dagger(0)\rangle \quad (6.77)$$

$$= \frac{1}{N_s - 1} \sum_{k=1}^{N_s-1} G_{kk}^0(\tau) \quad (6.78)$$

$$= \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n\tau} \frac{1}{N_s - 1} \sum_{k=1}^{N_s-1} G_{kk}^0(i\omega). \quad (6.79)$$

Für  $G_{dd}^0(\tau)$  fällt die Fouriertransformation von Impuls- in Ortsraum weg, da es nur je 1 Ort und Impuls gibt. Wir erhalten

$$G_{dd}^0(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n\tau} G_{dd}^0(i\omega). \quad (6.80)$$

Die Fouriertransformationen von  $\omega$  zu  $\tau$  werden nach Gl. 2.49 durchgeführt. Die  $dc_0$ - und  $c_0d$ -Elemente betrachten wir direkt so, wie sie als zeitabhängige Matsubara Green Funktionen definiert sind. Es gilt für Zustände  $a, b \in c_0, d$

$$G_{ab}^0(\tau) = \langle T e^{\tau\hat{H}_0} a e^{-\tau\hat{H}_0} b^\dagger \rangle_0 = 0 \quad \text{falls } a \neq b, \quad (6.81)$$

da der freie Kondo Hamiltonian  $\hat{H}_0$  keine Hybridisierungsterme zwischen der Störstelle und dem Bad enthält. Wir können uns den Umweg über die Resolventen Methode also sparen und erhalten

$$\forall_\tau G_{dc_0}^0(\tau) = G_{c_0d}^0(\tau) \equiv 0. \quad (6.82)$$

## 6.3 Implementierung

Zur Lösung des Kondo Modells einer magnetischen Störstelle und Berechnung der vollen Green Funktion mit dem Continuous Time Auxiliary Field Algorithmus verwenden wir ein Programm, welches auf dem in Abschnitt 4.4 beschriebenen Programm zur Lösung des Anderson Modells aufbaut. Es sind nur wenige konzeptionelle Änderungen vorzunehmen.

Der Ablauf des Programms gleicht aus einer Übersichtsperspektive dem bereits vorgestellten, s. Abb. 4.1. Nach dem Einlesen der im Kondo Modell nötigen Parameter erfolgt die Berechnung der freien Green Funktion. Die dd- und kk-Elemente werden als Funktion von Matsubara Frequenzen nach Gl. 6.72 bzw. 6.74 berechnet. Anschließend werden daraus die zeitabhängige Green Funktionen  $G_{dd}^0$  und  $G_{c_0c_0}^0$  durch Fouriertransformation an  $N_\tau$  Stützstellen bestimmt. Für jede Zeit  $\tau$  werden die 0-wertigen Nichtdiagonalelemente ergänzt, und die freie Green Funktion als Vektor von  $2 \times 2$ -Matrizen gespeichert. Wegen der fehlenden Spinabhängigkeit des freien Hamiltonians gilt  $G_{0\uparrow} = G_{0\downarrow} = G_0$ .

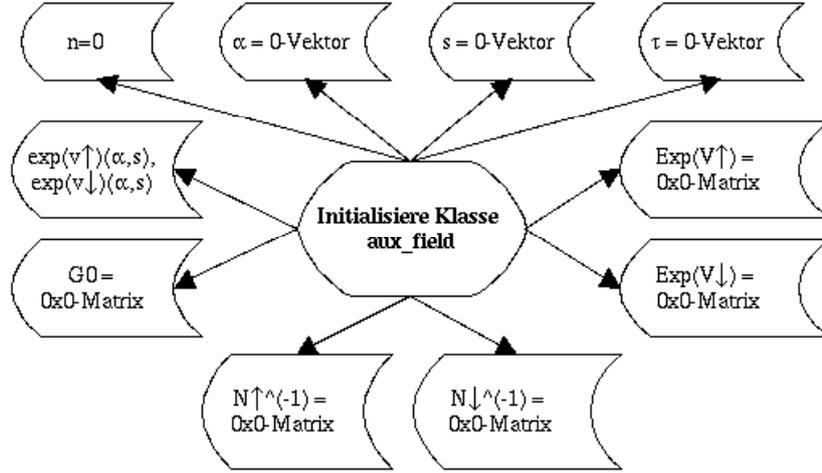


Abbildung 6.1: Skizze der in der Klasse Aux Field gespeicherten Informationen nach der Initialisierung

Dann werden 2 Instanzen der Klasse *Aux Field* erzeugt. Für die 28 möglichen  $\{\alpha_i, s_i\}$ -Kombinationen werden die linken oberen  $2 \times 2$ -Blöcke der  $e^{v^{\alpha_i, s_i}}$ -Matrizen einmal zu Beginn berechnet, um später bei Erhöhung der Störungsordnung oder Spin Flip in die  $e^{v^{\alpha_i, s_i}}$  Matrix kopiert zu werden. Die Klasse enthält nun neben den schon in Abschnitt 4.4 genannten Matrizen  $G_0^{\{\tau_i\}}$ ,  $e^{v^{\alpha_i, s_i}}$  und  $N_\sigma^{-1}(\{\tau_i, \alpha_i, s_i\})$ ,  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  sowie dem Vektor  $\{\tau_i\}$  zusätzlich Vektoren der  $\{\alpha_i\}$  und  $\{s_i\}$ , um die volle Information der  $\{\tau_i, \alpha_i, s_i\}$ -Konfiguration zu speichern, s. Abb. 6.1.

Bei dem Update Typ *Spin Entfernen* ist zu beachten, dass jeweils beide zu einer Zeit  $\tau_i$  gehörigen Zeilen bzw. Spalten der  $2n \times 2n$ -Matrix entfernt werden. Ebenso wird beim *Spin Flip* ein  $2 \times 2$ -Block der blockweise diagonalen Matrix  $e^{v^{\alpha_i, s_i}}$  durch den oberen linken Block der  $e^{v^{\alpha_i, -s_i}}$  ersetzt, bzw. beim  $\alpha$  Move durch den von  $e^{v^{\alpha_i, s_i}}$ . Beim Update Typ *Spin Einfügen* wird neben dem neuen Spin  $s$  und Zeit  $\tau$  auch die Störungsart  $\alpha$  zufällig bestimmt, sowie die  $G_0^{\{\tau_i\}}$  und  $e^{v^{\alpha_i, s_i}}$  blockweise aufgefüllt, s. Abb. 6.2.

Zum Abschluss jedes Updates wird die Matrix  $N_\sigma^{-1}(\{\tau_i, \alpha_i, s_i\})$  mit der Dyson Gleichung bestimmt, um mit deren Determinante die Akzeptanzwahrscheinlichkeit nach Gl. 4.57-4.61 zu berechnen. Anders als im Anderson Modell ist es nun möglich, dass die Gewichte der Konfigurationen negative Werte annehmen. Man spricht von einem Vorzeichenproblem oder *Sign Problem*. In diesem Fall ist wie folgt vorzugehen [21]: Die Prüfung, ob ein Update akzeptiert oder verworfen wird, erfolgt durch Vergleich einer Zufallszahl mit dem Absolutbetrag der eventuell negativen Akzeptanzwahrscheinlichkeit. Das negative Vorzeichen muss bei einer

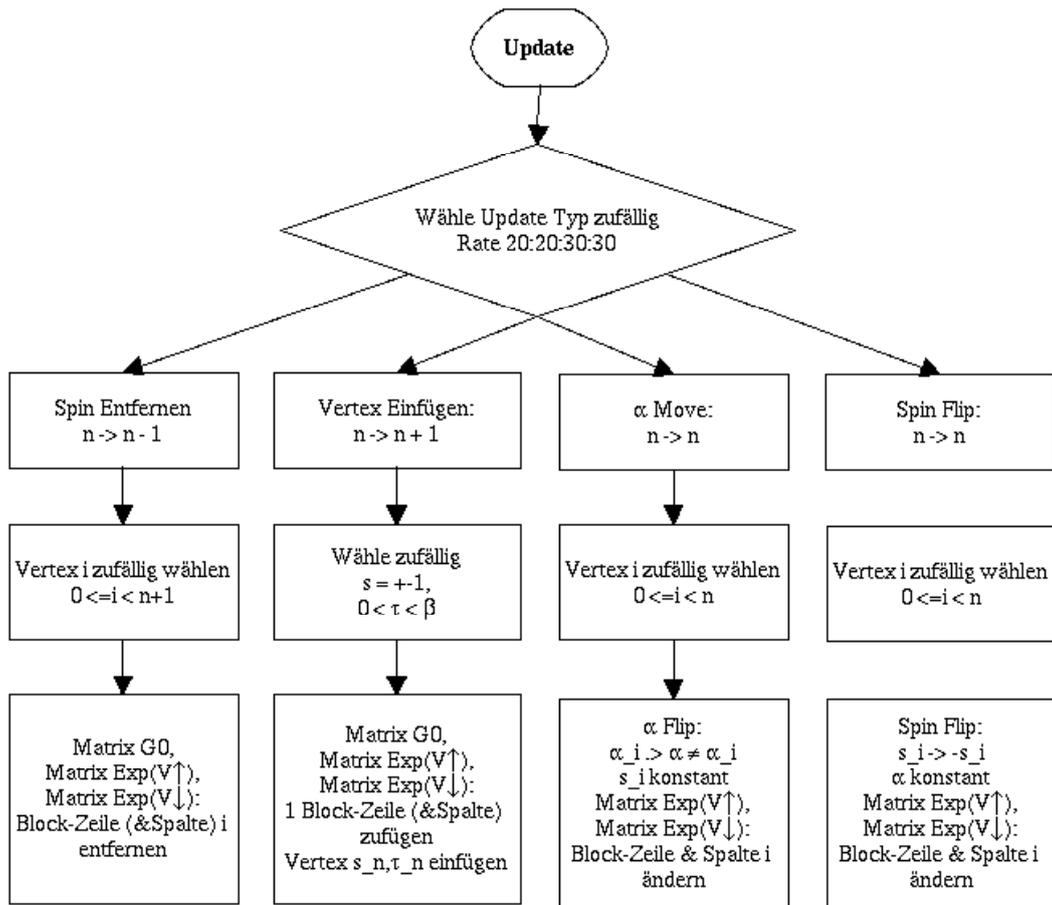


Abbildung 6.2: Skizze des Programmmoduls zum Vorschlagen einer neuen Konfiguration

Messung berücksichtigt werden. Wir messen jeweils neben der Observable auch das Vorzeichen des Gewichts. Der Mittelwert der Messung wird zu

$$\langle O \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N O_i \text{sgn}_i}{\sum_{i=1}^N \text{sgn}_i} \quad (6.83)$$

bestimmt. Sind alle Vorzeichen gleich 1, entspricht dies dem Mittelwert 4.3. Ist der Betrag des mittleren Vorzeichens deutlich kleiner als 1, ergeben sich größere Messfehler. Soll nach dem Update gemessen werden, erfolgt die Bestimmung der Green Funktion in der aktuellen Konfiguration nach Gl. 4.68. Wir berücksichtigen die Größe der Blockmatrizen und erhalten die Gleichung

$$G_{dd\sigma}^{\{\tau_i, s_i\}}(\tau, \tau') = G_{dd}^0(\tau, \tau') + \sum_{k,l=0}^{n-1} \sum_{p,q=0}^1 G_{dc_p}^0(\tau, \tau_k) \cdot \left( \left( e^{\nu_{\{\alpha_i, s_i\}}^\sigma} - \mathbf{1} \right) N_\sigma(\{\tau_i, \alpha_i, s_i\}) \right)_{kN_s+p, lN_s+q} G_{c_q d}^0(\tau_l, \tau'), \quad (6.84)$$

$$\mathbf{c}_p = \begin{cases} d & \text{falls } p = 0, \\ c_{p-1} & \text{sonst} \end{cases}. \quad (6.85)$$

Jeder Messwert wird mit dem zugehörigen Vorzeichen multipliziert und in einer Datei gespeichert, genauso wie der Wert des Vorzeichens. Die Zusammenfassung in Bins ist mit unserem Programm ebenfalls möglich. Im Anschluss werden die gewonnenen Daten nach Gl. 6.83 ausgewertet.

## 7 Zusammenfassung

Wir haben die Herleitung des Continuous Time Auxiliary Field Algorithmus nachvollzogen und den Algorithmus in einem C++ Programm zur Berechnung der Green Funktion einer magnetischen Störstelle im Anderson Modell implementiert. Messungen an einem kleinen System wurden mit Ergebnissen aus exakter Diagonalisierung verglichen, um die Richtigkeit des Programms zu überprüfen. In einem zur Messung mit unserer Methode geeigneten System haben wir Messungen der Green Funktion und der Doppelbesetzungswahrscheinlichkeit durchgeführt. Um den Rechenaufwand zu verringern und somit die Simulation tieferer Temperaturen zu ermöglichen, sollten Fast Updates implementiert werden, welche das Berechnen einer Determinante in jedem Updateschritt unnötig macht und so die Rechenzeit deutlich verkürzen [30].

Wir haben eine Störungsentwicklung des Kondo Hamiltonians und eine Hubbard Stratonovich Transformation des Heisenberg Terms durchgeführt und gezeigt, wie die Lösung des Kondo Modells mit dem CTAUX Algorithmus implementiert werden kann. Diese Realisierung in einem Programm steht zur Zeit noch aus.

# Literaturverzeichnis

- [1] M. Born, W. Heisenberg, P. Jordan, *Zur Quantenmechanik. II.*, Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei, 35, 8-9, 1926.
- [2] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley Publishing Company, Reading 1994, S. 23 ff.
- [3] F. Schwabl, *Quantenmechanik für Fortgeschrittene*, 2. Auflage, Springer Verlag, Berlin 2000, S. 3 ff.
- [4] C. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik*, 4. Auflage, Oldenbourg Verlag, München 2006, S. 543 ff.
- [5] H. Hinsch, *Elektronik*, Springer Verlag, Berlin 1996, S. 25 ff.
- [6] J. R. Schrieffer, P. A. Wolff, *Relations between the Anderson and Kondo Hamiltonians*, Physical Review, 149, 2, 1966.
- [7] J. Kondo, *Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys*, Progress of Theoretical Physics, 32, 1, 1964.
- [8] M. Ferrero, L. De Leo, P. Lecheminant, M. Fabrizio, *Strong correlations in a nutshell*, Journal of Physics: Condensed Matter, 19, 433201, 2007.
- [9] A. Georges, G. Kotliar, W. Kraut, M. J. Rozenberg, *Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions*, Reviews of Modern Physics, 68, 1, 1996.
- [10] P.W. Anderson, *Localized Magnetic States in Metals*, Phys. Rev., 124, 41, 1961.
- [11] W. Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 6 – Statistische Physik*, 6. Auflage, Springer Verlag, Berlin 2007, S. 118.
- [12] W. Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 7 – Viel-Teilchen-Theorie*, 5. Auflage, Springer Verlag, Berlin 2002, S. 104 ff.
- [13] T. Matsubara, *A New Approach to Quantum-Statistical Mechanics*, Progress of Theoretical Physics, 14, 4, 1955.
- [14] T. D. Schultz, *Quantum Field Theory And The Many-Body Problem*, Gordon And Breach Science Publishers, Inc., New York 1964, S. 139 ff.
- [15] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics*, 2. Auflage, Plenum Press, New York 1993, S. 133 ff.
- [16] A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions*, Cambridge University Press, Cambridge 1993, S.11 ff.

- [17] J. E. Hirsch, R. M. Fye, *Monte Carlo Method for Magnetic Impurities in Metals*, Physical Review Letters, 56, 23, 1986.
- [18] E. Gull, P. Werner, O. Parcollet, M. Troyer, *Continuous-time auxiliary field Monte Carlo for quantum impurity models*, Europhysics Letters, 82, 57003, 2008.
- [19] S. M. A. Rombouts, K. Heyde, N. Jachowicz, *Quantum Monte Carlo Method for Fermions, Free of Discretization Errors*, Physical Review Letters, 82, 21, 1999.
- [20] S. M. A. Rombouts, K. Heyde, N. Jachowicz, *A discrete Hubbard-Stratonovich decomposition for general, fermionic two-body interactions*, Physical Letters A, 242, 4, 1998.
- [21] F. F. Assaad, H. G. Evertz, *World-line and Determinantal Quantum Monte Carlo Methods for Spins, Phonons and Electrons*, in: H. Fehske, R. Schneider, A. Weiße (Eds.), *Computational Many-Particle Physics*, Springer Verlag, Berlin 2008, S. 292 ff.
- [22] F. F. Assaad, T. C. Lang, *Diagrammatic determinantal quantum Monte Carlo methods: Projective schemes and applications to the Hubbard-Holstein model*, Phys. Rev. B, 76, 035116, 2007.
- [23] K. Mielson, A. Macridin, M. Jarrell, *The relationship between Hirsch-Fye and weak coupling diagrammatic Quantum Monte Carlo methods*, Persönliche Mitteilung.
- [24] F. F. Assaad, *Monte Carlo Methods*, noch nicht veröffentlicht.
- [25] C. B. Lang, N. Pucker, *Mathematische Methoden in der Physik*, 2. Auflage, Spektrum Verlag, München 2005, S. 653 f.
- [26] S. Capponi, F. F. Assaad, *Spin and charge dynamics of the ferromagnetic and antiferromagnetic two-dimensional half-filled Kondo lattice model*, cond-mat/0010393v1, 2000.
- [27] F. F. Assaad, *Quantum Monte Carlo Methods on Lattices: The Determinantal Approach*, in: J. Grotendorst, D. Marx, A. Muramatsu (Eds.), *Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms*, Forschungszentrum Jülich, Jülich 2002, S. 138 ff.
- [28] C. Kittel, *Quantum Theory of Solids*, 2. Auflage, John Wiley & Sons, Inc., New York 1964, S. 50 f.
- [29] R. M. Fye, J. E. Hirsch, *Quantum Monte Carlo Study of the two-impurity Kondo Hamiltonian*, Physical Review B, 40, 7, 1989.
- [30] A. N. Rubtsov, V. V. Savkin, A. I. Lichtenstein, Phys Rev. B, 72, 3, 2005.