

Störungstheorie in vierter Ordnung
für das halbgefüllte Hubbard-Modell
im Limes hoher Dimensionen

Dissertation

zur Erlangung des
Doktorgrades der Naturwissenschaften
(Dr. rer. nat.)
dem Fachbereich Physik
der Philipps-Universität Marburg
vorgelegt von

Sandra Ju-Sil Mahlert
aus Darmstadt

Marburg an der Lahn, April 2003

Vom Fachbereich Physik der Philipps-Universität Marburg
als Dissertation angenommen am 12. 05. 2003

Erstgutachter: Prof. Dr. F. Gebhard
Zweitgutachter: Prof. Dr. P. Thomas

Tag der mündlichen Prüfung: 28. 05. 2003

Für Felix und Leonie

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Begriffe und Definitionen	8
2.1	Mott-Hubbard Metall-Isolator-Übergang	8
2.2	Hubbard-Modell	9
2.3	Limes hoher Dimensionen	13
2.4	Greenfunktionen und Selbstenergie	15
2.4.1	Allgemeine Definitionen und Eigenschaften	15
2.4.2	Diagrammtechnik	19
2.4.3	Kollaps der Diagramme in hohen Dimensionen	23
2.4.4	Observable	26
3	Störungsrechnung für schwache Wechselwirkung	30
3.1	Vorbetrachtungen	30
3.1.1	Verschwinden der ungeraden Ordnungen	30
3.1.2	Verschwinden der Hartree-Fock-Beiträge	31
3.2	Zweite Ordnung	32
3.3	Ergebnisse der zweiten Ordnung	34
3.3.1	Real- und Imaginärteil	34
3.3.2	Grundzustandsenergie	35
3.4	Vierte Ordnung	36
3.4.1	Diagramme	36
3.4.2	Ringdiagramm	38
3.4.3	Zweite-Ordnungsdiagramm mit Vertexkorrektur	40
3.4.4	Zweite-Ordnungsdiagramm mit Vertexkorrektur im Ring	42
3.4.5	Zweite-Ordnungsdiagramm mit Selbstenergieeinschub	46
3.5	Ergebnisse der vierten Ordnung	48
3.5.1	Real- und Imaginärteil	48
3.5.2	Zustandsdichte	50
3.5.3	Grundzustandsenergie und mittlere Doppelbesetzung	50

4 Vergleich mit anderen Methoden	55
4.1 Single-Impurity Anderson-Modell (SIAM)	55
4.1.1 Fixed-Energy Exakte Diagonalisierung (FE-ED)	58
4.1.2 Dynamische Dichte-Matrix-Renormierungsgruppe (DDMRG)	62
4.1.3 Numerische Renormierungsgruppe (NRG)	65
4.1.4 Iterierte Störungstheorie (IPT)	68
4.2 Random Dispersion-Approximation (RDA)	73
4.2.1 Methode	73
4.2.2 Impulsverteilung	75
5 Zusammenfassung und Ausblick	79
A Ergänzende Rechnungen zur vierten Ordnung	81
A.1 Berechnung von $\text{Im } \Sigma^{(4b)}(\omega)$	81
A.2 Berechnung von $\text{Im } \Sigma^{(4c)}(\omega)$	93
A.3 Berechnung von $\text{Im } \Sigma^{(4d)}(\omega)$	100
B Kontrollrechnungen in der Zeitdomäne	102
B.1 Ringdiagramm	102
B.2 Zweite-Ordnungsdiagramm mit Vertexkorrektur	104
B.3 Zweite-Ordnungsdiagramm mit Vertexkorrektur im Ring	106
B.4 Zweite-Ordnungsdiagramm mit Selbstenergieeinschub	106
C Hilfsfunktionen	108
Literaturverzeichnis	111

Abbildungsverzeichnis

2.1	Diagramm der vierten Ordnung mit Selbstenergieeinschub, $\mathbf{l} \neq \mathbf{m}$. .	25
3.1	Selbstenergie in zweiter Ordnung	35
3.2	Anteile der Vierten Ordnung zum Imaginärteil der Selbstenergie . .	48
3.3	Vierter-Ordnungsbeitrag zur Selbstenergie	49
3.4	Zustandsdichte für $U = 0.4 W$ und $U = 0.6 W$	51
4.1	Zustandsdichte für $U = 0.4 W$ im Vergleich mit FE-ED	60
4.2	Zustandsdichte für $U = 0.6 W$ im Vergleich mit FE-ED	61
4.3	Zustandsdichte für $U = 0.4 W$ im Vergleich mit DDMRG	64
4.4	Zustandsdichte für $U = 0.6 W$ im Vergleich mit DDMRG	65
4.5	Selbstenergie für $U = 0.4 W$ im Vergleich mit NRG	66
4.6	Selbstenergie für $U = 0.6 W$ im Vergleich mit NRG	67
4.7	Zustandsdichte im Vergleich mit NRG und IPT	69
4.8	Selbstenergie für $U = 0.4 W$ im Vergleich mit IPT	71
4.9	Selbstenergie für $U = 0.6 W$ im Vergleich mit IPT	72
4.10	Impulsverteilung im Vergleich mit RDA	75
4.11	Impulsverteilung im Vergleich mit NRG und IPT	76
4.12	Quasiteilchengewicht im Vergleich mit RDA, NRG und IPT	77

1 Einleitung

Quantenmechanische Vielteilchenprobleme sind eine große Herausforderung für die theoretische Physik. In der Festkörperphysik hat man es zum Beispiel mit Elektronen zu tun, die über das Coulomb-Potential miteinander wechselwirken. In einigen Fällen, wie beispielsweise bei normalen Metallen, ist es möglich, das Verhalten dieser Vielfermionensysteme erstaunlich gut mit effektiven Einteilchenbildern zu beschreiben, obwohl die Wechselwirkung zwischen den Elektronen stark ist. Die physikalischen Eigenschaften wechselwirkender Elektronensysteme jenseits der Einteilchenbeschreibung („Korrelationseffekte“) werden von effektiven Einteilchenmodellen jedoch nicht erfaßt.

Das konzeptionell einfachste Modell für wechselwirkende Elektronen auf einem Gitter ist das *Hubbard-Modell*. Es beinhaltet lediglich das Hüpfen der Elektronen zwischen benachbarten Gitterplätzen (kinetische Energie) und die Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektronen am selben Platz, auch *Hubbard-Wechselwirkung* genannt. Dominiert der kinetische Anteil, charakterisiert durch die Bandbreite W , delokalisieren die Elektronen; das Modell beschreibt ein Metall. Dominiert hingegen die intraatomare Wechselwirkung, charakterisiert durch die Stärke U der Hubbard-Wechselwirkung, so tendieren die Elektronen zur Lokalisierung. Hat man im Mittel ein Elektron pro Gitterplatz, so führt dies zu einem isolierenden Zustand (*Mott-Hubbard-Isolator*). In bestimmten Übergangsmetall-Oxiden wie zum Beispiel V_2O_3 , die ein oder mehrere halbgefüllte Bänder haben, ist es möglich, durch Anwendung von Druck einen Übergang von einem paramagnetischen Metall zu einem paramagnetischen Isolator, einem Mott-Hubbard-Isolator, zu induzieren. Solch ein Metall-Isolator-Übergang findet aufgrund der Wechselwirkung zwischen den Elektronen statt und wurde im Jahr 1949 von MOTT ausführlich diskutiert [1]. Dieser *Mott-Hubbard-Übergang* ist immer noch Gegenstand aktueller Diskussion. Der Übergang stellt ein fundamentales Problem der Festkörpertheorie dar.

Ein Beispiel für den Mott-Hubbard-Übergang liefert die exakte Lösung des Hubbard-Modells in einer Dimension [2]. In $d > 1$ Dimensionen ist selbst das stark vereinfachende Hubbard-Modell nicht mehr exakt lösbar. Der *Limes hoher Dimensionen*, $d \rightarrow \infty$, der von METZNER und VOLLHARDT [3] erstmals eingeführt wurde, bringt neue technische Vereinfachungen und beinhaltet trotzdem noch die we-

sentliche Physik (*Dynamische Molekular-Feld-Theorie*, DMFT). Auf dem Weg über den Limes hoher Dimensionen versucht man seit 1990 den Mott-Hubbard-Übergang zu beschreiben.

Selbst im Rahmen der DMFT ist immer noch umstritten, ob dieser Übergang kontinuierlich ist oder nicht. Mit Hilfe der Variationsmethode von GUTZWILLER fanden BRINKMAN und RICE [4] heraus, daß für eine schwache intraatomare Wechselwirkung U ein endliches Quasiteilchengewicht existiert, das den metallischen Zustand charakterisiert. Dieses wird kleiner, wenn U wächst, bis es bei einem kritischen Wert $U = U_c$ verschwindet. Gleichzeitig öffnet sich bei U_c eine Lücke und das System wird isolierend. Dieses Szenario wird als *kontinuierlicher Übergang* bezeichnet. Die exakte Lösung des eindimensionalen $1/r$ Hubbard-Modells gibt ebenfalls ein Beispiel für dieses Szenario, siehe [5, 6]. Im Gegensatz dazu haben GEORGES, KOTLIAR und Mitarbeiter [7] einen *diskontinuierlichen Übergang* gefunden: Noch bevor das Quasiteilchengewicht auf Null gesunken ist, bildet sich in einer sogenannten Koexistenzphase eine vorgeformte Lücke für $U > U_{c,1}$. Verschwindet das Quasiteilchengewicht bei $U = U_{c,2} > U_{c,1}$, so springt die Lücke auf den endlichen Wert, den die vorgeformte Lücke vorgibt; die Lücke ist unstetig als Funktion der Hubbard-Wechselwirkung.

Verschiedene analytische und numerische Näherungsmethoden zum Hubbard-Modell in hohen Dimensionen liefern Argumente, die entweder das erste [5, 8] oder das zweite Szenario [9]-[14], unterstützen. Bisher gibt es keine Möglichkeit zu entscheiden, welches Szenario die richtige Physik beschreibt, da noch keine exakte Lösung der DMFT vorliegt. Alle analytischen [13], [15]-[19] aber auch alle numerischen Ansätze [8]-[14], [18]-[21] müssen Näherungen vornehmen, deren Auswirkungen man noch nicht beurteilen kann. Auch experimentelle Daten können keine Entscheidungsgrundlage für eines der beiden Szenarien bieten, da der Mott-Hubbard-Übergang immer von einer antiferromagnetischen Phase überdeckt wird und weitere experimentelle Faktoren wie zum Beispiel die Elektron-Phonon-Kopplung relevant sind. Verlässliche Testmethoden für die verschiedenen Verfahren sind daher dringend notwendig, um diese qualitativ und quantitativ bewerten zu können.

Mit einer systematischen Störungstheorie in U/W für die metallische Phase bzw. W/U für die isolierende Phase ist dies möglich. Jedes analytische oder numerische Näherungsverfahren, das belastbare Aussagen über den Mott-Hubbard-Übergang treffen will, muß notwendigerweise innerhalb des Gültigkeitsbereichs der Störungstheorie mit deren Ergebnissen übereinstimmen. Eine Berechnung mittels Störungstheorie um den Limes starker Kopplung wurde in der Arbeit von E. KALINOWSKI [22, 23] durchgeführt. In Ergänzung dazu liefert die vorliegende Arbeit die diagrammatische Störungstheorie um den Limes schwacher Kopplung bis zur vierten Ordnung in U/W .

Hieraus ergibt sich der folgende Aufbau der Arbeit. Im zweiten Kapitel wird eine Zusammenstellung der wichtigsten Definitionen und Eigenschaften des Hamilton-Operators für das Hubbard-Modell sowie der Einteilchen-Greenfunktionen vorgenommen. Es folgt eine Einführung in die diagrammatische Störungstheorie für kleine U/W .

Im dritten Kapitel werden die Selbstenergiendiagramme des metallischen Zustands bei halber Bandfüllung bis einschließlich $\mathcal{O}[(U/W)^4]$ berechnet und die Ergebnisse für die Selbstenergie, Zustandsdichte, Grundzustandsenergie und mittlere Doppelbesetzung diskutiert.

Im vierten Kapitel erfolgt ein Vergleich der perturbativen Resultate zur Zustandsdichte mit den Ergebnissen von vier verschiedenen Implementationen der DMFT. Darunter sind zwei vor kurzem entwickelte numerische Näherungsmethoden, die *Fixed-Energy Exact Diagonalization* (FE-ED) und die *Dynamical Density-Matrix Renormalization Group* (DDMRG) sowie die *Numerische Renormierungsgruppe* (NRG) als weitere numerische und die *Iterierte Störungstheorie* (IPT) als analytische Methode. Ergebnisse zur Impulsverteilung der NRG, der IPT und der *Random Dispersion-Approximation* (RDA), die eine numerische, von der DMFT unabhängige Methode darstellt, werden im Anschluß mit denen der U -Störungstheorie verglichen.

Eine Zusammenfassung und ein Ausblick in Kapitel 5 schließen die Arbeit ab. Im Appendix findet man detaillierte Zwischenschritte zur Berechnung der Selbstenergiendiagramme sowie diverse Kontrollrechnungen und eine Liste der wichtigsten Hilfsfunktionen.

2 Begriffe und Definitionen

In diesem Kapitel wird zunächst erklärt, was man unter einem Mott-Hubbard-Isolator bzw. Mott-Hubbard-Übergang versteht. Das geeignete Modell, diesen Übergang zu beschreiben, ist das Hubbard-Modell, welches im zweiten Abschnitt kurz vorgestellt wird. Ein großer Fortschritt im Verständnis dieser Physik für $d \geq 3$ Dimensionen wird mit dem Limes $d \rightarrow \infty$ erzielt, der im dritten Abschnitt eingeführt wird. Der wesentliche Teil dieser Arbeit besteht in der Berechnung der Selbstenergie in einer diagrammatischen Störungstheorie für schwache Wechselwirkung im Limes hoher Dimensionen. Aus diesem Grund werden die Greenfunktionen und die Diagrammtechnik im vierten Abschnitt ausführlich dargestellt.

2.1 Mott-Hubbard Metall-Isolator-Übergang

Intuitiv würde man einen Festkörper als Isolator bezeichnen, wenn er trotz angelegter Spannung keinen elektrischen Strom leitet. In der Tat wird ein wechselwirkendes Vielteilchensystem als Isolator charakterisiert, wenn seine Gleichstrom-Leitfähigkeit verschwindet. Eine Definition ist nur sinnvoll bei Temperatur $T = 0$, da es durch thermische Anregungen stets zu einer endlichen Leitfähigkeit kommt,

$$\text{Isolator: } \sigma_{\alpha\beta}^{\text{DC}}(T = 0) = \lim_{T \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{|\mathbf{q}| \rightarrow 0} \text{Re}\{\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega)\} = 0. \quad (2.1)$$

Das Problem dieser Definition liegt darin, daß $\sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega)$ als Propagator einer Zweiteilchenanregung bei fester Teilchenzahl schwer zu berechnen ist. Stattdessen bedient man sich mit Hilfe des *Gap-Kriteriums* einer leichter zugänglichen Größe. Eine *Lücke* Δ für einfach geladene Anregungen definiert man über die chemischen Potentiale $\mu^+(N)$ und $\mu^-(N)$ bei $T = 0$, wenn keine Unordnung vorliegt,

$$\begin{aligned} \Delta(N) &= \mu^+(N) - \mu^-(N) \\ &= [E_0(N+1) - E_0(N)] - [E_0(N) - E_0(N-1)]. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Die chemischen Potentiale sind die minimalen Energien, die benötigt werden, um ein Elektron zum Grundzustand eines Systems mit N bzw. $(N-1)$ Elektronen

hinzuzufügen. Eine stromtragende Einteilchenanregung kann nicht erzeugt werden, falls die Einteilchenlücke endlich ist. Daher gilt das hinreichende, aber nicht notwendige [5]

Gap-Kriterium:

$$\Delta(N) > 0 \quad : \quad \text{Isolator} . \quad (2.3)$$

Das Kriterium versagt natürlich bei Systemen mit Paarbildung. Supraleiter haben eine Lücke im Einteilchenspektrum, leiten den Strom aber verlustfrei [24]. Isolatoren aufgrund der Unordnung im System (*Anderson-Isolatoren*) zeigen keine Lücke im Einteilchenspektrum. Die Lücke für stromtragende Anregungen ist nicht durch (2.2) gegeben, sondern durch die Differenz zwischen der Mobilitätskante und der Fermienergie. Einen guten Überblick zum Thema Anderson-Isolatoren bzw. Anderson Metall-Isolator-Übergang findet man beispielsweise in [25].

Für effektive Einteilchensysteme beschreibt das Gap-Kriterium einen *Band-Isolator*, in dem Valenz- und Leitungsband durch die Lücke Δ getrennt sind. Bei einem *Mott-Hubbard-Isolator* führt die Wechselwirkung zwischen den Elektronen zur Bildung einer Lücke im Spektrum von einfach geladenen Anregungen zwischen dem *unteren* und *oberen Hubbard-Band*. Ein besonderes Kennzeichen des Mott-Hubbard-Übergangs ist die Abwesenheit einer spontanen Symmetriebrechung. Die elektronischen Korrelationen erzwingen einen *Quanten-Phasenübergang* von einem korrelierten paramagnetischen Metall zu einem paramagnetischen Mott-Hubbard-Isolator. Die globale Symmetrie bleibt erhalten, die lokalen magnetischen Momente bilden keine langreichweitige Ordnung. Es bleibt noch immer zu klären, ob dieser Übergang kontinuierlich ist oder nicht, das heißt, ob die Lücke als Funktion der Elektron-Elektron-Wechselwirkung stetig oder unstetig ist.

Die vorliegende Arbeit befaßt sich nur mit der metallischen Phase. Die darin vorgenommenen Untersuchungen mittels Störungstheorie für schwache Kopplung liefern kontrollierte Resultate. Diese erlauben es, die Qualität verschiedener Methoden zu testen, die zur Beschreibung des Mott-Hubbard-Übergangs verwendet werden.

2.2 Hubbard-Modell

Das generische Modell, um die wesentliche Physik des Mott-Hubbard-Übergangs zu beschreiben, ist das *Einband-Hubbard-Modell*, welches das Standardmodell für wechselwirkende Gitterelektronen darstellt. Eine ausführliche Darstellung dieses Modells findet man in [5]. Das Hubbard-Modell ist das konzeptionell einfachste

Modell, in dem die kinetische Energie der Elektronen in Konkurrenz zu ihrer rein lokalen Wechselwirkung steht,

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{HM}} &= \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{m}} \sum_{\sigma} t_{\mathbf{l}\mathbf{m}} \hat{c}_{\mathbf{l}, \sigma}^+ \hat{c}_{\mathbf{m}, \sigma} + U \sum_{\mathbf{l}} \hat{n}_{\mathbf{l}, \uparrow} \hat{n}_{\mathbf{l}, \downarrow} \\ &\equiv \hat{T} + U \hat{D} .\end{aligned}\quad (2.4)$$

Der kinetische Term \hat{T} beschreibt das Hüpfen der Elektronen von einem Gitterplatz \mathbf{l} zum Platz \mathbf{m} mit $t_{\mathbf{l}\mathbf{m}}$ als Hüpfamplitude. Dabei erzeugt $\hat{c}_{\mathbf{l}, \sigma}^+$ ein Elektron mit Spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ am Gitterplatz \mathbf{l} und $\hat{c}_{\mathbf{l}, \sigma}$ vernichtet es. Die Coulomb-Abstoßung U findet nur am selben Gitterplatz zwischen Elektronen mit entgegengesetztem Spin statt. $\hat{n}_{\mathbf{l}, \sigma}$ ist der Anzahloperator für Elektronen mit Spin σ am Gitterplatz \mathbf{l} und $\hat{D} = \sum_{\mathbf{l}} \hat{n}_{\mathbf{l}, \uparrow} \hat{n}_{\mathbf{l}, \downarrow}$ ist der Doppelbesetzungsoperator [26].

Bei translationsinvarianten Gittern kann man von $t_{\mathbf{l}\mathbf{m}} = t(\mathbf{l} - \mathbf{m})$ ausgehen und erhält im Impulsraum einen diagonalen Operator der kinetischen Energie,

$$\hat{T} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^+ \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} , \quad (2.5)$$

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{r}} t(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}} . \quad (2.6)$$

Hier erzeugt $\hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^+ = 1/\sqrt{L} \sum_{\mathbf{l}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{l}) \hat{c}_{\mathbf{l}, \sigma}^+$ ein Elektron mit dem Bloch-Impuls \mathbf{k} . L ist die Anzahl der Gitterplätze. Bei Nächste-Nachbar-Hüpfen mit Amplitude $(-t)$ und einem einfachkubischen d -dimensionalen Gitter mit Gitterkonstante $a \equiv 1$ erhält man die Dispersionsrelation

$$\begin{aligned}\epsilon(\mathbf{k}) &= -2t \sum_{j=1}^d \cos(k_j) , \\ \mathbf{k} &= (k_1, \dots, k_d) .\end{aligned}\quad (2.7)$$

Diese Dispersionsrelation erfüllt die sogenannte *Nesting-Bedingung* $\epsilon(\mathbf{k} - \mathbf{Q}) = -\epsilon(\mathbf{k})$, wobei $\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \dots, \pi)$ der *Nesting-Vektor* ist.

Das Hubbard-Modell enthält eine sehr übersichtliche Anzahl an Parametern, wie den Wechselwirkungsparameter U , die Bandbreite des Einteilchenbandes W , die Elektronendichte $n = N/L$, die Dimension d , die Temperatur T und die Gitterstruktur. Das ist ein großer Vorteil, da dies den Vergleich zwischen verschiedenen Lösungsmethoden erleichtert. Betrachtet wird ausschließlich der Fall der halben Bandfüllung $n = 1$, bei dem die Zahl N der Elektronen gleich der Anzahl L der Gitterplätze ist. Die Bandbreite W wird in dieser Arbeit als Energieeinheit gewählt, $W = 1$.

Ein weiterer Vorteil des Modells sind die leicht zu lösenden Grenzfälle, die als Probe für jedes Lösungsverfahren dienen.

(i) **Fermigas-Limes:**

Im Limes $U = 0$ ist der wechselwirkungsfreie Hamilton-Operator $\hat{H} = \hat{T}$ nach Gleichung (2.5) diagonal im Impulsraum. Die Elektronen bewegen sich als freies Fermigas durch das Gitter und das System ist somit ein (ideales) Metall. Die *Zustandsdichte* für nichtwechselwirkende Elektronen

$$D_{\sigma}^0(\epsilon) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\epsilon - \epsilon(\mathbf{k})) \quad (2.8)$$

beschreibt nur ein Band und hat einen endlichen Wert bei der Fermi-Energie.

(ii) **Atomarer Limes:**

Ein Transport der Elektronen ist im Limes $t = 0$ gemäß $\hat{H} = U\hat{D}$ nicht möglich. Der Grundzustand besteht aus Einfachbesetzungen und ist wegen der Spinfreiheitsgrade hochgradig entartet. Das System ist ein Isolator mit einer Anregungslücke $\Delta = U$.

(iii) **Limes starker Wechselwirkung:**

Im Limes, $U \gg W$, wird das Hubbard-Modell im Niederenergiesektor äquivalent zum antiferromagnetischen Heisenberg-Modell [27]

$$\hat{H}_{\text{Heis}} = \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{m}} \frac{2 |t(\mathbf{l} - \mathbf{m})|^2}{U} \left[\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{m}} - \frac{1}{4} \right], \quad (2.9)$$

das einen antiferromagnetischen Isolator beschreibt. Dabei sind die Komponenten von $\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{l}}$ definiert über

$$\hat{S}_{\mathbf{l}}^z = \frac{1}{2} [\hat{n}_{\mathbf{l}\uparrow} - \hat{n}_{\mathbf{l}\downarrow}], \quad (2.10)$$

$$\hat{S}_{\mathbf{l}}^+ = \hat{c}_{\mathbf{l}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{l}\downarrow}, \quad (2.11)$$

$$\hat{S}_{\mathbf{l}}^- = \hat{c}_{\mathbf{l}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{l}\uparrow} \quad (2.12)$$

mit $\hat{S}_{\mathbf{l}}^+ = \hat{S}_{\mathbf{l}}^x + i\hat{S}_{\mathbf{l}}^y$ und $\hat{S}_{\mathbf{l}}^- = \hat{S}_{\mathbf{l}}^x - i\hat{S}_{\mathbf{l}}^y$. Der Unterschied zum atomaren Limes besteht darin, daß eine endliche Kopplung zwischen den Gitterplätzen auch für $U/W \rightarrow \infty$ erhalten bleibt. Die Lücke zwischen dem unteren und oberen Hubbard-Band ist $\Delta = U - \mathcal{O}(W)$, da beide Bänder eine Breite $\mathcal{O}(W)$ haben [1].

Da das Hubbard-Modell bei $n = 1$ für schwache Wechselwirkung offenbar ein Metall und für starke Wechselwirkung einen antiferromagnetischen Isolator beschreibt, muß bei einer gewissen kritischen Wechselwirkung $U_c = \mathcal{O}(W)$ ein Metall-Isolator-Übergang existieren. Bei der kritischen Wechselwirkung berühren sich

die beiden Hubbard-Bänder und für $U < U_c$ überlappen sie [28]. Damit sind offensichtlich die wesentlichen Aspekte des Mott-Hubbard-Übergangs im Hubbard-Modell enthalten.

In der vorliegenden Arbeit wird der symmetrisierte Hamilton-Operator des Hubbard-Modells

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{m}} \sum_{\sigma} t_{\mathbf{l}\mathbf{m}} \hat{c}_{\mathbf{l}, \sigma}^+ \hat{c}_{\mathbf{m}, \sigma} + U \sum_{\mathbf{l}} \left(\hat{n}_{\mathbf{l}, \uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{\mathbf{l}, \downarrow} - \frac{1}{2} \right) \quad (2.13)$$

verwendet, der mit (2.4) wie folgt zusammenhängt:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{HM}} - \frac{U}{2} \left(\hat{N} - \frac{L}{2} \right). \quad (2.14)$$

In dieser Form kann man auch die dem Hubbard-Modell innewohnende Symmetrie zwischen Teilchen und Löchern besser erkennen. Mit Hilfe der *Elektron-Loch-Transformation*

$$\mathcal{T} : \begin{array}{l} \hat{c}_{\mathbf{l}\sigma}^+ \mapsto \gamma_{\mathbf{l}} \hat{c}_{\mathbf{l}\sigma} \\ \hat{c}_{\mathbf{l}\sigma} \mapsto \gamma_{\mathbf{l}} \hat{c}_{\mathbf{l}\sigma}^+ \end{array} \quad \text{mit} \quad \gamma_{\mathbf{l}} = \begin{cases} +1 & ; \mathbf{l} \in A \\ -1 & ; \mathbf{l} \in B \end{cases} \quad (2.15)$$

kann man \hat{H} auf sich selbst abbilden, wenn die Elektronen auf A - B -Gittern nur zwischen A - und B - Gitterplätzen tunneln, wie dies beim Nächst-Nachbar-Hüpfen der Fall ist. Eine Konsequenz dieser Teilchen-Loch-Symmetrie ist eine garantierte halbe Bandfüllung für jedes U und alle $T \geq 0$, falls das chemische Potential $\mu = 0$ gesetzt wird [5]. Nach Definition gilt nämlich

$$\langle \hat{N} \rangle(\mu) = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \text{Sp} \left[\exp \left(-\beta (\hat{H} - \mu \hat{N}) \right) \right], \quad (2.16)$$

und daher folgt mit (2.13) und (2.15)

$$\begin{aligned} \langle \hat{N} \rangle(\mu) &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \text{Sp} \left[\exp \left(-\beta (\hat{H} - \mu (2L - \hat{N})) \right) \right] \\ &= 2L - \langle \hat{N} \rangle(-\mu). \\ \Rightarrow \langle \hat{N} \rangle(0) &= L. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Zudem fallen die *Hartree-Diagramme* in der Störungstheorie heraus. Für weitere Vereinfachungen siehe Kapitel 3.

2.3 Limes hoher Dimensionen

Das Hubbard-Modell kann in einer Dimension mit Hilfe des *Bethe-Ansatzes* [2] exakt gelöst werden. Das System im eindimensionalen Fall besitzt sehr spezielle Eigenschaften, wie zum Beispiel Nesting, siehe (2.7). Daher ist unklar, inwieweit sich die Ergebnisse auf $d = 2, 3$ Dimensionen übertragen lassen. Üblicherweise weicht man auf den Limes hoher Dimensionen aus, um das Verhalten in höherdimensionalen Systemen, insbesondere $d = 3$, zu untersuchen. Dieser Limes wurde erstmals von METZNER und VOLLHARDT [3] auf das Hubbard-Modell angewandt. In einigen Spin-Systemen gelangt man so zu exakten Lösungen, da man den engen Zusammenhang zu den Molekular-Feldmodellen ausnutzen kann. Beispielsweise wird die *Curie-Weiss Molekular-Feldtheorie* für das *Ising-Modell*, das klassische Spins beschreibt, exakt und die Thermodynamik des quantenmechanischen *Heisenberg-Modells* ist identisch zu der des Ising-Modells [29, 30]. Die Quantenfluktuationen der Spins werden im Limes hoher Dimensionen unterdrückt.

Leider hat man für das Hubbard-Modell noch keine exakte Lösung gefunden, kann jedoch einige technische Vorteile des Limes $d \rightarrow \infty$ nutzen. Allerdings muß man vorsichtig bei der Vertauschung mit anderen Limites sein. Zum Beispiel kommutiert $d \rightarrow \infty$ in der Regel nicht mit $T \rightarrow 0$ oder dem Limes kleiner Dichten $n \rightarrow 0$ [5].

Im Hubbard-Modell ist die intraatomare Wechselwirkung U in unendlichen Dimensionen immer noch wohldefiniert, wohingegen die Hüpfamplitude reskaliert werden muß, damit die mittlere kinetische Energie endlich bleibt. Für Nächst-Nachbar-Hüpfen wählt man

$$t = \frac{\tilde{t}}{\sqrt{2d}}, \quad (2.18)$$

mit dimensionsunabhängigem \tilde{t} . Angewandt auf die Dispersionsrelation für nicht wechselwirkende Elektronen (2.7) erhält man

$$\epsilon(\mathbf{k}) = -\frac{2\tilde{t}}{\sqrt{2d}} \sum_{j=1}^d \cos(k_j). \quad (2.19)$$

In d Dimensionen besteht $\epsilon(\mathbf{k})$ aus einer Summe von d unabhängigen Werten zwischen $-2\tilde{t}/\sqrt{2d}$ und $+2\tilde{t}/\sqrt{2d}$. Im Limes hoher Dimensionen stellt $\epsilon(\mathbf{k})$ somit eine Zufallsvariable mit Erwartungswert $\langle \epsilon(\mathbf{k}) \rangle = 0$ und Standardabweichung \tilde{t} dar. Die Wahrscheinlichkeitsdichte dieser Zufallsvariablen ist durch die Einelektron-Zustandsdichte für freie Elektronen (2.8) gegeben. Diese Zustandsdichte gibt die Wahrscheinlichkeit für das Ereignis an, daß $\epsilon(\mathbf{k})$ einen bestimmten Wert ϵ im Impulsraum annimmt, und hat nach dem Zentralen Grenzwertsatz für $d \rightarrow \infty$ die

Form [3]

$$D_{\sigma}^0(\epsilon) = \frac{1}{\tilde{t}\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\epsilon/\tilde{t})^2}{2}\right). \quad (2.20)$$

Das m -te Moment der Zustandsdichte ist definiert als

$$\overline{\epsilon^m} = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \epsilon^m D_{\sigma}^0(\epsilon). \quad (2.21)$$

Mit Hilfe des zweiten Moments der reskalierten Zustandsdichte, das heißt der Varianz, definiert man die Bandbreite W über

$$(W/4)^2 \equiv \int d\epsilon D_{\sigma}^0(\epsilon) \epsilon^2. \quad (2.22)$$

Damit erhält man als Bandbreite $W = 4\tilde{t}$.

Für translationsinvariante Systeme ist das Hubbard-Modell in unendlichen Dimensionen allein durch die Zustandsdichte charakterisiert, da die höheren Korrelationsfunktionen im Ortsraum faktorisieren, wie zum Beispiel

$$D_{\mathbf{q}}(\epsilon_1, \epsilon_2) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\epsilon_1 - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})) \delta(\epsilon_2 - \epsilon(\mathbf{k})) \quad (2.23)$$

$$= D_{\sigma}^0(\epsilon_1) D_{\sigma}^0(\epsilon_2) \quad \text{für fast alle } \mathbf{q}. \quad (2.24)$$

$D_{\mathbf{q}}(\epsilon_1, \epsilon_2)$ bestimmt die Wahrscheinlichkeit für das Ereignis, daß die kinetische Energie sich bei einem Impulsübertrag \mathbf{q} im Mittel von ϵ_1 zu ϵ_2 ändert. Korrelation erhält man nur in Richtung des Nesting-Vektors. Schließt man das Nesting für das System aus, ist das gleichbedeutend mit einer vollständigen Faktorisierung der Korrelationsfunktion.

Diese Beobachtung führt zu einer alternativen Interpretation des Limes hoher Dimensionen. Jede statistische Verteilung läßt sich auch durch ihre Korrelationsfunktionen beschreiben. In $d = \infty$ faktorisieren alle diese Korrelationsfunktionen gemäß (2.24) und die Dispersionrelation läßt sich als Zufallsvariable interpretieren, wobei die Energie $\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon$ als freier Parameter in die Zustandsdichte eingeht. Die Zustandsdichte fungiert dabei als Wahrscheinlichkeitsverteilung. Das ist von großem Vorteil, da sich die Information aus dem Impulsraum in hohen Dimensionen schlecht verwerten läßt. Zum Beispiel müßte für die Berechnung der Dispersionrelation $\epsilon(\mathbf{k})$ eine unendliche Summe von Kosinusfunktionen berechnet werden. Auf dieser Beobachtung basiert die *Random Dispersion-Approximation* (RDA), die in hohen Dimensionen in Systemen ohne Nesting exakt wird [5, 8].

In $d = 3$ liegt eine beschränkte Zustandsdichte vor, wohingegen die *Gauß-Zustandsdichte* (2.20) exponentielle Ausläufer aufweist. Um pathologische Effekte zu vermeiden, ist es sinnvoll mit einer beschränkten Zustandsdichte zu rechnen, beispielsweise mit der *semielliptischen Hubbard-Zustandsdichte*

$$D_{\sigma}^0(\epsilon) = \frac{4}{\pi W} \sqrt{1 - \left(\frac{2\epsilon}{W}\right)^2} \quad \text{für } |\epsilon| \leq W/2. \quad (2.25)$$

Diese Zustandsdichte gilt für ein *Bethe-Gitter* mit unendlicher Koordinationszahl und kann rekursiv berechnet werden [31]. Bethe-Gitter oder *Cayley-Trees* sind Gitter, die keine geschlossenen Wege ermöglichen. Sie sind vollständig durch die Zahl Z der nächsten Nachbarn charakterisiert. Man startet an einem Gitterplatz und verbindet ihn mit Z benachbarten Gitterplätzen, von denen jeder wiederum mit $(Z - 1)$ weiteren verbunden wird. Auf diese Weise erhält man einen sich immer weiter verzweigenden Baum. Will man zu einem bestimmten Gitterplatz zurückkehren, muß man den identischen Weg rückwärts einschlagen. Ein Bethe-Gitter weist keine Translationsinvarianz auf.

Die zugehörige Bandbreite stimmt mit der aus Definition (2.22) überein. Alle Rechnungen der vorliegenden Arbeit wurden mit dieser semielliptischen Zustandsdichte

$$D_{\sigma}^0(\epsilon) = \frac{4}{\pi} \sqrt{1 - (2\epsilon)^2} \quad \text{für } |\epsilon| \leq 1/2, \quad (2.26)$$

mit $W = 1$ durchgeführt.

2.4 Greenfunktionen und Selbstenergie

2.4.1 Allgemeine Definitionen und Eigenschaften

Analog zur klassischen Physik gelangt man bei quantenmechanischen wechselwirkenden Vielteilchensystemen über die Greenfunktionen zu wichtigen Informationen über das System. Mit Hilfe der Greenfunktionen kann man Erwartungswerte und Korrelationsfunktionen berechnen. Es folgt eine Zusammenstellung der wichtigsten Definitionen und Eigenschaften von Greenfunktionen, die man beispielsweise in [32] nachlesen kann.

Die fermionische zeitabhängige *kausale Einteilchen-Greenfunktion* für $T = 0$ ist gegeben durch

$$\begin{aligned} G_{\sigma}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') &\equiv -i \frac{1}{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle} \langle \psi_0 | T[\hat{c}_{\mathbf{x},\sigma}(t) \hat{c}_{\mathbf{x}',\sigma}^{\dagger}(t')] | \psi_0 \rangle \\ &\equiv -i \langle T[\hat{c}_{\mathbf{x},\sigma}(t) \hat{c}_{\mathbf{x}',\sigma}^{\dagger}(t')] \rangle \end{aligned} \quad (2.27)$$

Dabei ist $|\psi_0\rangle$ der Heisenberg-Grundzustand des wechselwirkenden Systems mit

$$\hat{H}|\psi_0\rangle = E_0|\psi_0\rangle . \quad (2.28)$$

Weiterhin ist

$$\hat{c}_{\mathbf{x},\sigma}(t) = e^{i\hat{H}t} \hat{c}_{\mathbf{x},\sigma} e^{-i\hat{H}t} \quad (2.29)$$

der Vernichtungsoperator in Heisenberg-Darstellung und T der (*Wicksche*) *Zeitordnungsoperator*, der für fermionische Operatoren definiert ist als

$$T[\hat{A}(t)\hat{B}(t')] = \begin{cases} \hat{A}(t)\hat{B}(t') & \text{für } t > t' \\ -\hat{B}(t')\hat{A}(t) & \text{für } t < t' . \end{cases} \quad (2.30)$$

Hier ist $\hbar = 1$ gesetzt. Bei zeitunabhängigen Hamilton-Operatoren gilt

$$\begin{aligned} G_\sigma(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') &= G_\sigma(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t - t') \\ &= -i\langle T[\hat{c}_{\mathbf{x},\sigma}(t - t')\hat{c}_{\mathbf{x}',\sigma}^+] \rangle \\ &= -i \left\{ \theta(t - t') e^{-iE_0(t-t')} \langle \hat{c}_{\mathbf{x},\sigma} e^{i\hat{H}(t-t')} \hat{c}_{\mathbf{x}',\sigma}^+ \rangle \right. \\ &\quad \left. - \theta(t' - t) e^{iE_0(t-t')} \langle \hat{c}_{\mathbf{x}',\sigma}^+ e^{i\hat{H}(t-t')} \hat{c}_{\mathbf{x},\sigma} \rangle \right\} . \end{aligned} \quad (2.31)$$

Ist das System auch noch translationsinvariant, ergibt sich

$$G_\sigma(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) = G_\sigma(\mathbf{x} - \mathbf{x}', t) , \quad (2.32)$$

und die Fouriertransformierte der Greenfunktion ist gegeben durch

$$G_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} G_\sigma(\mathbf{x}, t) . \quad (2.33)$$

Die Greenfunktion im Frequenzraum kann man mit Hilfe der *Eigentlichen Selbstenergie* $\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, \omega)$ ausdrücken ($\eta = 0^+$)

$$G_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon(\mathbf{k}) - \Sigma_\sigma(\mathbf{k}, \omega) + i\eta \operatorname{sgn}(\omega)} . \quad (2.34)$$

Im Vergleich mit der Greenfunktion für freie Elektronen

$$G_\sigma^0(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon(\mathbf{k}) + i\eta \operatorname{sgn}(\omega)} \quad (2.35)$$

sieht man, daß die Selbstenergie den gesamten Einfluß der Wechselwirkung unter den Teilchen beinhaltet. Vergleicht man mit dem Fall freier Elektronen, stellt

man fest, daß der Realteil der Selbstenergie die Verschiebung der Resonanzen angibt und der Imaginärteil deren Verbreiterung. LUTTINGER zeigt [33], daß sich die Selbstenergie eines Metalls für kleine Frequenzen verhält wie

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \Sigma_{\sigma}(\omega \rightarrow 0) &= \left(1 - \frac{1}{Z}\right) \omega, \\ \operatorname{Im} \Sigma_{\sigma}(\omega \rightarrow 0) &= -\gamma \omega^2 \end{aligned} \quad (2.36)$$

mit $0 < Z < 1$ und $\gamma > 0$. Dies sind die charakteristischen Eigenschaften einer Fermiflüssigkeit. Wie im folgenden Kapitel gezeigt wird, kann die Selbstenergie als Störungsreihe geschrieben werden, deren Berechnung man mit Hilfe von Feynman-Diagrammen vornimmt.

Das Ziel dieser Arbeit ist die Berechnung der Selbstenergie für das Hubbard-Modell mit schwacher Wechselwirkung U . Die dazu benötigte Diagrammtechnik ist im nächsten Unterkapitel erläutert; sie ist nur mit der kausalen Greenfunktion durchführbar. Es gibt jedoch noch die *retardierte* und *avancierte Greenfunktion*

$$G_{\sigma}^{\text{ret}}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') \equiv -i\theta(t - t') \langle [\hat{c}_{\mathbf{x},\sigma}(t), \hat{c}_{\mathbf{x}',\sigma}^{\dagger}(t')]_{+} \rangle, \quad (2.37)$$

$$G_{\sigma}^{\text{av}}(\mathbf{x}t, \mathbf{x}'t') \equiv +i\theta(t' - t) \langle [\hat{c}_{\mathbf{x},\sigma}(t), \hat{c}_{\mathbf{x}',\sigma}^{\dagger}(t')]_{+} \rangle, \quad (2.38)$$

die bei konkreten Rechnungen bequemer zu handhaben sind, da sie ein einfacheres analytisches Verhalten besitzen als die kausale Greenfunktion. Dies ist besonders gut in der Impuls-Frequenz-Darstellung

$$G_{\sigma}^{\text{av,ret}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon(\mathbf{k}) - \Sigma_{\sigma}^{\text{av,ret}}(\mathbf{k}, \omega) \pm i\eta} \quad (2.39)$$

ersichtlich. Da $G_{\sigma}^{\text{ret}}(\mathbf{k}, z)$ ($G_{\sigma}^{\text{av}}(\mathbf{k}, z)$) nur Pole in der unteren (oberen) komplexen z -Halbebene hat, ist $G_{\sigma}^{\text{ret}}(\mathbf{k}, z)$ ($G_{\sigma}^{\text{av}}(\mathbf{k}, z)$) in die obere (untere) z -Halbebene analytisch fortsetzbar. Aus (2.34), (2.35) und (2.39) folgt die *Dyson-Gleichung*

$$G_{\sigma}^{\alpha}(\mathbf{k}, \omega) = G_{\sigma}^{0,\alpha}(\mathbf{k}, \omega) + G_{\sigma}^{0,\alpha}(\mathbf{k}, \omega) \Sigma_{\sigma}^{\alpha}(\mathbf{k}, \omega) G_{\sigma}^{\alpha}(\mathbf{k}, \omega), \quad (2.40)$$

wobei α für die kausale, retardierte oder avancierte Greenfunktion steht. Das Einsetzen eines Näherungsausdrucks für $\Sigma_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega)$ in die Dyson-Gleichung bedeutet bereits das Aufsummieren einer unendlichen Teilreihe.

Die verschiedenen Greenfunktionen hängen eng zusammen. Mit einer Fourier-Transformation in den Impulsraum kann man herleiten, daß aus (2.37) und (2.38) folgt [32]

$$\begin{aligned} G_{\sigma}^{\text{ret}}(\mathbf{k}, t) &= [G_{\sigma}^{\text{av}}(\mathbf{k}, -t)]^* , \\ G_{\sigma}^{\text{ret}}(\mathbf{k}, \omega) &= [G_{\sigma}^{\text{av}}(\mathbf{k}, \omega)]^* . \end{aligned} \quad (2.41)$$

Ein Vergleich zwischen (2.34) und (2.39) zeigt

$$G_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) = G_{\sigma}^{\text{av}}(\mathbf{k}, \omega) \quad \text{für } \omega < 0, \quad (2.42)$$

$$G_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) = G_{\sigma}^{\text{ret}}(\mathbf{k}, \omega) \quad \text{für } \omega > 0. \quad (2.43)$$

Der Real- und Imaginärteil der Greenfunktionen sind ebenfalls nicht unabhängig voneinander, wie man an den *Kramers-Kronig-Transformationen*

$$\begin{aligned} \text{Re } G_{\sigma}^{\text{ret}}(\omega) &= \mp \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \frac{\text{Im } G_{\sigma}^{\text{ret}}(\zeta)}{\omega - \zeta}, \\ \text{Im } G_{\sigma}^{\text{ret}}(\omega) &= \pm \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \frac{\text{Re } G_{\sigma}^{\text{ret}}(\zeta)}{\omega - \zeta} \end{aligned} \quad (2.44)$$

sehen kann. Das bedeutet, daß die Bestimmung des Imaginärteils bzw. des Realteils zur Berechnung der vollen Greenfunktion ausreicht. Diese Transformationen gelten analog für die entsprechenden Selbstenergien.

Eine weitere wichtige Funktion ist die *Spektralfunktion*

$$A_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) \equiv -\frac{1}{\pi} \text{Im } G_{\sigma}^{\text{ret}}(\mathbf{k}, \omega), \quad (2.45)$$

durch die man alle drei Greenfunktionen ausdrücken kann

$$G_{\sigma}^{\text{ret}}(\mathbf{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \frac{A_{\sigma}(\mathbf{k}, \zeta)}{\omega - \zeta \pm i\eta}, \quad (2.46)$$

$$G_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \frac{A_{\sigma}(\mathbf{k}, \zeta)}{\omega - \zeta + i\eta \text{sgn}(\zeta)}. \quad (2.47)$$

Dabei ist $A_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega)$ eine reelle Funktion mit

$$A_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) \geq 0 \quad (2.48)$$

und der Summenregel

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega A_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) = 1. \quad (2.49)$$

Mit Hilfe dieser Summenregel folgt aus (2.46) und (2.47)

$$G_{\sigma}^{\alpha}(\mathbf{k}, \omega) \sim \frac{1}{\omega} \quad \text{für } \omega \rightarrow \infty. \quad (2.50)$$

2.4.2 Diagrammtechnik

Um die Greenfunktionen zu berechnen, bedarf es einer bestimmten Technik, die hier kurz erläutert wird. Sie ist beispielsweise nachzulesen in [32]. Definitionsgemäß sind die Greenfunktionen Erwartungswerte von Operatoren in Heisenberg-Darstellung. Diese Darstellung ist für störungstheoretische Berechnungen ungeeignet, günstiger ist die Wechselwirkungs-Darstellung. Man unterteilt das Problem

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (2.51)$$

im allgemeinen in einen lösbaren Anteil \hat{H}_0 und eine Störung \hat{V} . Weiterhin führt man eine künstliche Zeitabhängigkeit ein, indem man die Störung adiabatisch ein- und ausschaltet

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} e^{\eta|t|} . \quad (2.52)$$

Zu einer formalen Lösung des Problems gelangt man über den Zeitentwicklungsoperator des Wechselwirkungsbildes

$$\hat{U}_\eta(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \cdots \int_{t_0}^t dt_n e^{-\eta(|t_1| + \dots + |t_n|)} T [\hat{V}_I(t_1) \cdots \hat{V}_I(t_n)] . \quad (2.53)$$

Die Einteilchen-Greenfunktion stellt sich damit dar als

$$iG_\sigma(x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \frac{{}_0\langle T[\hat{V}_I(t_1) \cdots \hat{V}_I(t_n) \hat{c}_\sigma(x) \hat{c}_\sigma^+(y)] \rangle_0}{{}_0\langle S(-\infty, \infty) \rangle_0} , \quad (2.54)$$

wobei ${}_0\langle \dots \rangle_0$ Erwartungswerte im Grundzustand des nichtwechselwirkenden Systems \hat{H}_0 sind und

$$S(-\infty, \infty) \equiv \lim_{\eta \rightarrow 0} \hat{U}_\eta(-\infty, \infty) . \quad (2.55)$$

Dies sind die zentralen Formeln für störungstheoretische Rechnungen. Um die Greenfunktion zu berechnen, wendet man die Feynman-Regeln an, die sich aus dem Wick-Theorem ergeben.

Wick Theorem:

Der Grundzustands-Erwartungswert des zeitgeordneten Produktes aus den Fermi-Operatoren $\hat{A}_1, \dots, \hat{A}_n$ läßt sich reduzieren auf

$${}_0\langle T[\hat{A}_1 \cdots \hat{A}_n] \rangle_0 = \text{Summe über alle möglichen Produkte von} \quad (2.56)$$

$$\text{Kontraktionen } \hat{A}_i \hat{A}_m \equiv {}_0\langle T[\hat{A}_i \hat{A}_m] \rangle_0$$

In dem uns interessierenden Fall einer Paar-Wechselwirkung der Form

$$\hat{V}_I(t_1) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int d^3 x_1 \int d^3 x_2 V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \hat{c}_{\sigma_1}^+(r_1) \hat{c}_{\sigma_2}^+(r_2) \hat{c}_{\sigma_2}(r_2) \hat{c}_{\sigma_1}(r_1) \quad (2.57)$$

$$\text{mit } x \equiv (\mathbf{x}, x_0) \equiv (\mathbf{x}, t_x)$$

bestehen Kontraktionen aus jeweils einem Erzeuger und einem Vernichter. Damit lassen sich die Kontraktionen auf freie kausale Greenfunktionen zurückführen,

$$\hat{c}_{\sigma_1}^{+*}(x_1) \hat{c}_{\sigma_2}^*(x_2) = -i \delta_{\sigma_1 \sigma_2} G_{\sigma_1}^0(x_1, x_2), \quad (2.58)$$

$$\hat{c}_{\sigma_2}^*(x_2) \hat{c}_{\sigma_1}^{+*}(x_1) = i \delta_{\sigma_1 \sigma_2} G_{\sigma_1}^0(x_1, x_2). \quad (2.59)$$

Bei Gleichzeitigkeit erhält man ($t^+ = t + 0^+$)

$$\hat{c}_{\sigma}^{+*}(\mathbf{x}, t) \hat{c}_{\sigma}^*(\mathbf{y}, t) = -i G_{\sigma}^0(\mathbf{x}t, \mathbf{y}t^+). \quad (2.60)$$

Es ist bequem, das Wechselwirkungspotential in \hat{V}_I umzuschreiben als

$$V(x_1 - x_2) \equiv V(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \delta(t_1 - t_2), \quad (2.61)$$

wodurch man die Integration symmetrisch schreiben kann als

$$\int dt_1 \hat{V}_I(t_1) \equiv \frac{1}{2} \int d^4 x_1 \int d^4 x_2 V(x_1 - x_2) \hat{c}_{\sigma_1}^+(x_1) \hat{c}_{\sigma_2}^+(x_2) \hat{c}_{\sigma_2}(x_2) \hat{c}_{\sigma_1}(x_1). \quad (2.62)$$

In der Regel muß man mit einer Vielzahl von Termen kämpfen, bei denen man leicht den Überblick verlieren kann. Bei n Erzeuger-Vernichter Paaren gibt es $n!$ Möglichkeiten für verschiedene Kontraktionen. Einige dieser Kombinationen entsprechen einander jedoch, da sie beispielsweise durch Vertauschung der Indizes auseinander hervorgehen. Um einen besseren Überblick zu gewinnen und sich einiges an Schreibarbeit zu sparen, geht man zu einer diagrammatischen Darstellung der Störterme über. Dazu identifiziert man

$$\begin{array}{c} \bullet \text{---} \blacktriangleright \text{---} \bullet \\ x \qquad y \end{array} = G(x, y) \quad \text{volle Greenfunktion,} \quad (2.63)$$

$$\begin{array}{c} \bullet \text{---} \blacktriangleright \text{---} \bullet \\ x \qquad y \end{array} = G^0(x, y) \quad \text{freie oder einfache Greenfunktion,} \quad (2.64)$$

$$\begin{array}{c} \bullet \text{---} \text{~~~~~} \text{---} \bullet \\ x \qquad y \end{array} = V(x - y) \quad \text{Wechselwirkungslinie zwischen} \quad (2.65) \\ \text{den Vertices } x \text{ und } y .$$

Jeder Summand, der zur vollen Greenfunktion beiträgt, kann als sogenanntes *Feynman-Diagramm* dargestellt werden. In einem Feynman-Diagramm wird jede Kontraktion durch eine einfache Greenfunktionslinie und jeder Wechselwirkungskoeffizient durch eine Wellen-Linie ersetzt. Gleiche Argumente werden miteinander verbunden. Als *Vertex* bezeichnet man eines der Enden einer Greenfunktionslinie. *Äußere Vertizes* sind die beiden Argumente der vollen Greenfunktion und alle anderen werden als *innere Vertizes* bezeichnet. Der Vorteil der diagrammatischen Darstellung besteht darin, daß man *topologisch identische* Terme bzw. Diagramme oft sehr leicht identifizieren kann und so das Zusammenfassen von Termen vereinfacht wird.

Zunächst kann man die Anzahl der Terme, die zur Berechnung der Greenfunktion benötigt werden, mit Hilfe des *Linked-Cluster-Theorems* enorm reduzieren. Es besagt, daß nur verbundene Diagramme zur Greenfunktion beitragen, da sich alle unverbundenen gerade mit dem Nenner wegekürzen. Damit erhält man

$$iG_{\sigma}(x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \\ {}_0 \langle T[\hat{V}_I(t_1) \cdots \hat{V}_I(t_n) \hat{c}_{\sigma}(x) \hat{c}_{\sigma}^+(y)] \rangle_0^{\text{connected}}. \quad (2.66)$$

Weitere Vereinfachungen ergeben sich dadurch, daß die Anordnung der Operatoren $\hat{V}(x_1), \dots, \hat{V}(x_n)$ keine Rolle spielt. Man erhält auf diese Weise $n!$ topologisch identische Diagramme. Zusammen mit den 2^n Diagrammen, die aus der Vertauschung der beiden Vertizes einer Wechselwirkungslinie entstehen, hat man $2^n n!$ topologisch identische Diagramme in der n -ten Ordnung. Damit kürzt sich der Vorfaktor $1/(2^n n!)$ heraus.

Alle systematischen Vereinfachungen werden in den Feynman-Regeln zusammengefaßt. Konsequenterweise angewandt, kann man sicher sein, daß alle Beiträge berücksichtigt werden.

Feynman-Regeln (Ortsraum)

zur n -ten Ordnung Störungstheorie für $G_{\sigma}(x_1, x_2)$

- (1) Zeichne alle topologisch verschiedenen verbundenen Diagramme mit n Wechselwirkungslinien und $(2n + 1)$ Greenfunktionslinien!
- (2) Etikettiere jeden Vertex mit einem vierdimensionalen Raum-Zeit-Punkt x_{α} !
- (3) Jeder Greenfunktionslinie von x_{α} nach x_{β} entspricht der Faktor

$$G_{\sigma}^0(x_{\alpha}, x_{\beta}).$$

(4) Jeder Wechselwirkungslinie von x_α nach x_β entspricht der Faktor

$$V(x_\alpha - x_\beta) = V(\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}_\beta)\delta(t_\alpha - t_\beta) .$$

(5) Integriere über alle inneren Vertizes und summiere über die Spins

$$\sum_{\sigma_\alpha} \int dt_\alpha \int d^3x_\alpha !$$

(6) Multipliziere jedes Diagramm mit dem Vorfaktor $(-1)^F(i)^n$, wobei F gleich der Anzahl aller Fermischleifen ist!

(7) Zu gleichen Zeiten gilt $G^0(\mathbf{x}_\alpha t, \mathbf{x}_\alpha t^+)$.

Die Dyson Gleichung

$$G(x, y) = G^0(x, y) + \int dx_1 \int dx_2 G^0(x, x_1) \Sigma(x_1, x_2) G(x_2, y) \quad (2.67)$$

kann man diagrammatisch wie folgt schreiben

$$\begin{array}{c} \bullet \\ \parallel \\ \longrightarrow \\ \bullet \end{array} \begin{array}{c} x \\ y \end{array} = \begin{array}{c} \bullet \\ \longrightarrow \\ \bullet \end{array} \begin{array}{c} x \\ y \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \longrightarrow \\ \bullet \end{array} \begin{array}{c} x \\ x_1 \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \longrightarrow \\ \bullet \end{array} \begin{array}{c} x_2 \\ y \end{array} . \quad (2.68)$$

Wie schon in Kapitel 2.4.1 erwähnt, stecken die Auswirkungen der Wechselwirkung in der *Eigentlichen Selbstenergie* $\Sigma(x_1, x_2)$. Auch die Selbstenergie kann natürlich diagrammatisch dargestellt werden. Die Rechenvorschrift für die Eigentliche Selbstenergie besagt, daß man alle verbundenenen, topologisch verschiedenen einteilchen-irreduziblen Diagramme für $G(x, y)$ ohne die externen „Beine“ $G^0(x, x_1)$ und $G^0(x_2, y)$ summieren muß. *Einteilchen-irreduzible* Diagramme sind solche, die sich durch das Zerschneiden *einer* Greenfunktionslinie nicht in zwei Einzeldiagramme aufteilen lassen.

Prinzipiell ermöglichen die Feynman-Regeln es, die exakte Greenfunktion in beliebiger Ordnung hinzuschreiben. Jede Greenfunktion in Orts-Zeit-Darstellung bringt jedoch zwei unabhängige Fermi-Operatoren mit sich. Die einfachere Darstellung der Greenfunktion im Impuls-Frequenz-Raum ist in konkreten Rechnungen oft angenehmer. Da es für die freie Greenfunktion im Impulsraum eine explizite Darstellung gibt, ist es oft günstig die Berechnung der Diagramme dort durchzuführen. Der Satz an Diagrammen bleibt derselbe. Für den Impuls-Frequenz-Raum gibt es ebenfalls Feynman-Regeln, die den obigen sehr ähnlich sind.

Feynman-Regeln (Impulsraum)zur n -ten Ordnung Störungstheorie für $G_\sigma(\mathbf{k}, \omega)$

- (1) Zeichne alle topologisch verschiedenen verbundenen Diagramme mit n Wechselwirkungslinien und $(2n + 1)$ Greenfunktionslinien!
- (2) Weise jeder Wechselwirkungslinie eine Richtung zu, füge einen gerichteten Vierer-Impuls hinzu und achte auf Impuls- und Energieerhaltung an jedem Vertex!
- (3) Jeder Greenfunktionslinie entspricht der Faktor

$$G_\sigma^0(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\theta(|\mathbf{k}| - k_F)}{\omega - \epsilon(\mathbf{k}) + i\eta} + \frac{\theta(k_F - |\mathbf{k}|)}{\omega - \epsilon(\mathbf{k}) - i\eta}.$$

- (4) Jeder Wechselwirkungslinie entspricht der Faktor $V(\mathbf{q})_{\sigma\sigma'}$.
- (5) Integriere über alle unabhängigen inneren Vierer-Impulse und führe eine Spinsummation durch!
- (6) Jedes Diagramm erhält den Vorfaktor $(i)^n (2\pi)^{-4n} (-1)^F$.
- (7) Jede Greenfunktionslinie, die einen Loop bildet oder die durch dieselbe Wechselwirkungslinie verbunden ist, wird interpretiert als

$$e^{i\omega\eta} G_\sigma^0(\mathbf{k}, \omega) \quad \text{mit} \quad \eta = 0^+.$$

2.4.3 Kollaps der Diagramme in hohen Dimensionen

Eine wesentliche Vereinfachung für das Hubbard-Modell im Limes hoher Dimensionen ist das Kollabieren der Diagramme im Ortsraum [3]. Wenn zwei Vertizes \mathbf{x}_α und \mathbf{x}_β durch mindestens drei unabhängige Pfade miteinander verbunden sind, kann man die Plätze \mathbf{x}_α und \mathbf{x}_β miteinander identifizieren, das heißt, $\mathbf{x}_\alpha = \mathbf{x}_\beta$. Als Pfad bezeichnet man eine Folge von Greenfunktionslinien in einem Diagramm. Zwei Pfade sind unabhängig voneinander, wenn sie keine Greenfunktionslinie teilen.

Der Grund für den Kollaps liegt in der Skalierung des Hüpfmatrixelements mit $1/\sqrt{d}$. Dadurch trägt jeder Pfad vom Gitterplatz \mathbf{x}_α zum Gitterplatz \mathbf{x}_β mit dem Faktor $(1/\sqrt{d})^{\|\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}_\beta\|}$ bei. Dabei ist $\|\dots\|$ die *New-York-Metrik*, $\|\mathbf{R}\| = \sum_{i=1}^d |R_i|$. Andererseits ergibt die Summation über die $R = \|\mathbf{R}\|$ -te Nachbarschale einen Faktor d^R . Insgesamt erhält man einen Faktor

$$d^R \left(1/\sqrt{d}\right)^{RP_{\alpha\beta}}, \quad (2.69)$$

wobei $P_{\alpha\beta}$ gleich der Anzahl der unabhängigen Pfade von \mathbf{x}_α nach \mathbf{x}_β ist. Das bedeutet, daß nur die Beiträge mit $P_{\alpha\beta} \leq 2$ im Limes $d = \infty$ endlich bleiben. Infolgedessen kann in translationsinvarianten Systemen jeder Fermion-Propagator $G_\sigma^0(\mathbf{k}, \omega)$, der zwei kollabierende Vertizes verknüpft, durch den lokalen impulsunabhängigen Propagator $G_\sigma^0(\omega)$ ersetzt werden.

$$G_\sigma^0(\omega) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} G_\sigma^0(\mathbf{k}, \omega) \quad (2.70)$$

$$\stackrel{2.8}{=} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon D_\sigma^0(\epsilon) \frac{1}{\omega - \epsilon + i\eta \operatorname{sgn}(\epsilon)}. \quad (2.71)$$

Das heißt, daß für die beiden Vertizes, die durch $G_\sigma^0(\omega)$ verbunden sind, keine Impulserhaltung gilt. Die Energie bleibt jedoch auch an diesen Vertizes erhalten. Da die Diagramme der Eigentlichen Selbstenergie per Definition einteilchen-irreduzibel sind, sind die beiden äußeren Vertizes immer durch drei unabhängige Pfade verbunden, damit ist die Selbstenergie in $d = \infty$ lokal,

$$\Sigma(x_1, x_2)_\sigma = \Sigma_\sigma(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1, t_1 - t_2) \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2), \quad (2.72)$$

bzw. impulsunabhängig,

$$\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = \Sigma_\sigma(\omega). \quad (2.73)$$

Das bedeutet jedoch nicht, daß auch alle inneren Vertizes kollabieren, siehe unten.

Für die semielliptische Zustandsdichte (2.26) kann Gleichung (2.71) mit Hilfe der *Dirac-Identitäten*

$$\frac{1}{\omega - \epsilon \pm i\eta} = \mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega - \epsilon} \right) \mp i\pi \delta(\omega - \epsilon) \quad (2.74)$$

explizit berechnet werden,

$$G_\sigma^0(\omega) = \frac{4}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{1/2} d\epsilon \sqrt{1 - (2\epsilon)^2} \left(\frac{1}{\omega - \epsilon + i\eta} + \frac{1}{\omega - \epsilon - i\eta} \right) \quad (2.75)$$

$$= f(\omega) - f(-\omega) - 4i \operatorname{sgn}(\omega) \theta(1/2 - |\omega|) \sqrt{1 - (2\omega)^2} \quad (2.76)$$

$$= 8\omega \left[1 - \sqrt{1 - \left(\frac{1}{2\omega} \right)^2} \right]. \quad (2.77)$$

Die Hilfsfunktion $f(\omega)$ findet man im Appendix C. Für den Imaginärteil der lokalen Greenfunktion ergibt sich

$$\operatorname{Im} G_\sigma^0(\omega) = -\pi \operatorname{sgn}(\omega) D_\sigma^0(\omega). \quad (2.78)$$

Die volle Greenfunktion berechnet sich analog zu (2.71) als

$$G_\sigma(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon D^0(\epsilon) \frac{1}{\omega - \epsilon - \Sigma_\sigma(\omega) + i\eta \operatorname{sgn}(\epsilon)} \quad (2.79)$$

$$= G_\sigma^0(\omega - \Sigma_\sigma(\omega)) . \quad (2.80)$$

Weil aus der Elektron-Loch-Symmetrie für die frequenzabhängige Greenfunktion

$$G_\sigma(\omega) = \frac{1}{L} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \sum_{\mathbf{x}} G_\sigma(\mathbf{x}, \mathbf{x}, t) \quad (2.81)$$

$$= -G_\sigma(-\omega) , \quad (2.82)$$

folgt, erhält man auch für die Selbstenergie die Symmetrie [32],

$$\Sigma_\sigma(\omega) = -\Sigma_\sigma(-\omega) . \quad (2.83)$$

Deswegen genügt es, später lediglich $\omega \geq 0$ zu betrachten. Es soll betont werden, daß die Hubbard-Wechselwirkung in unendlichen Dimensionen trotz der technischen Vereinfachungen keineswegs zu einem trivialen Problem führt. Selbst im Limes hoher Dimensionen muß beim Hubbard-Modell auf Energieerhaltung an den Vertizes geachtet werden. Es gibt keine Vereinfachungen für Zeiten und Frequenzen, wodurch das Problem voll dynamisch bleibt. Außerdem sind nicht alle inneren Vertizes in einer diagrammatischen Entwicklung durch drei oder mehr unabhängige Pfade verbunden. Das ist nur bei Diagrammen ohne jegliche Selbstenergieeinschübe („Fleisch“) der Fall. Die sogenannten *Skelettdiagramme* enthalten nur einen Gitterplatzindex. Diagramme, die keine Skelettdiagramme sind, kollabieren nicht vollständig, wie zum Beispiel das Diagramm der vierten Ordnung in Abbildung 2.1. Hier ist das Diagramm zweiter Ordnung der Selbstenergie in die obere Greenfunktionslinie dieses Diagramms eingeschoben worden. Die Vertizes **l** und **m** sind echt verschieden voneinander, da keine drei unabhängigen Pfade von **l** nach **m** führen. Somit unterscheidet sich das Hubbard-Modell auch in $d = \infty$ vom Wolff-Modell, denn im Wolff-Modell findet die Wechselwirkung zwischen den Elektronen nur an einem Gitterplatz statt [5].

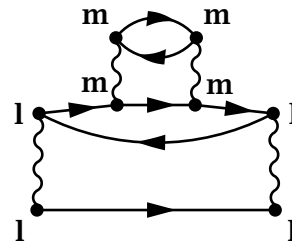


Abbildung 2.1 Diagramm der vierten Ordnung mit Selbstenergieeinschub, $l \neq m$

Dennoch kann die Tatsache, daß nur ein Gitterplatzindex in den Vertizes der Skelettdiagramme auftaucht, genutzt werden, um *effektive* Einplatz-Modelle zu konstruieren, die äquivalent zum Hubbard-Modell in $d = \infty$ sind [7, 34, 35]. Dies ist

Grundlage der *Dynamischen Molekular-Feld-Theorie* (DMFT). Darauf wird ausführlich in Kapitel 4 eingegangen.

2.4.4 Observable

In der vorliegenden Arbeit wird für das Hubbard-Modell die Selbstenergie in einer diagrammatischen Störungstheorie für kleine U ($U < W$) berechnet. Das System befindet sich also in der metallischen Phase und verhält sich im Limes hoher Dimensionen wie eine Fermiflüssigkeit. Das Quasiteilchengewicht sollte daher endlich sein und die Zustandsdichte nur ein Band beschreiben.

Mit Hilfe der Selbstenergie kann man diese wichtigen Größen berechnen. Die wechselwirkende Zustandsdichte ist gegeben durch

$$D_\sigma(\omega) \equiv -\frac{1}{\pi} \operatorname{sgn}(\omega) \operatorname{Im} G_\sigma(\omega) \quad (2.84)$$

$$= -\frac{1}{\pi} \operatorname{sgn}(\omega) \operatorname{Im} G_\sigma^0(\omega - \Sigma_\sigma(\omega)) \quad (2.85)$$

$$= D_\sigma(-\omega) . \quad (2.86)$$

Die letzte Gleichung gilt aufgrund der Teilchen-Loch-Symmetrie, vgl. (2.81). Bei einer Fermiflüssigkeit führen die Gleichungen (2.36) und (2.85) zu

$$D_\sigma(0) = D_\sigma^0(0) . \quad (2.87)$$

Das bedeutet, daß die Zustandsdichte bei $\omega = 0$ auf ihren Wert für $U = 0$ festgelegt ist. Die Momente der wechselwirkenden Zustandsdichte sind definiert als

$$M_n = 2 \int_0^\infty d\omega \omega^n D_\sigma(\omega) . \quad (2.88)$$

Das erste Moment

$$M_1 = -\frac{1}{L} \left(E_0 + U \frac{\partial E_0}{\partial U} \right) \quad (2.89)$$

wird zur Berechnung der Grundzustandsenergie E_0 benötigt.

Die Eigenschaften einer Fermiflüssigkeit sind qualitativ ähnlich denen eines freien Elektronengases. Die Modifikationen dieser Eigenschaften, kann man alle anhand der Selbstenergie verdeutlichen. Nach dem Luttinger-Theorem (2.36) wird der Imaginärteil der Selbstenergie für sehr kleine ω im Gegensatz zum Realteil beliebig klein, da er quadratisch anstatt linear in ω abnimmt. Für kleine ω gilt also

$$\Sigma_\sigma^{\operatorname{ret}}(\omega) \approx a_\sigma + b_\sigma \omega , \quad (2.90)$$

wobei $a_\sigma = 0$ wegen Teilchen-Loch-Symmetrie. Nahe der Fermikante hat die Spektralfunktion (2.45) damit folgende Gestalt

$$A_\sigma(\epsilon, \omega) \approx \delta(\omega - \epsilon - \Sigma_\sigma^{\text{ret}}(\omega)) \quad (2.91)$$

$$= \frac{1}{|1 - b_\sigma|} \delta\left(\omega - \frac{\epsilon}{1 - b_\sigma}\right). \quad (2.92)$$

Die Wechselwirkung U zwischen den Gitterelektronen verschiebt also im allgemeinen den δ -Peak, auch Quasiteilchenpeak genannt, und versieht ihn mit einem geringeren spektralen Gewicht Z als bei freien Elektronen, dem sogenannten *Quasiteilchengewicht*.

$$\begin{aligned} Z(U) &\equiv |1 - b_\sigma|^{-1} \\ &= \left[1 - \left. \frac{\partial \text{Re} \Sigma_\sigma^{\text{ret}}(\omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=0} \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (2.93)$$

Wegen der Summenregel für die Spektralfunktion (2.49) gilt

$$Z(U) \leq 1. \quad (2.94)$$

Für die Spektralfunktion gilt

$$A_\sigma(\epsilon, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{sgn}(\omega) \text{Im} \left(\frac{1}{\omega - \epsilon - \Sigma_\sigma(\omega)} \right) \quad (2.95)$$

$$= -\frac{1}{\pi} \text{sgn}(\omega) \frac{\text{Im} \Sigma_\sigma(\omega)}{(\omega - \epsilon - \text{Re} \Sigma_\sigma(\omega))^2 + (\text{Im} \Sigma_\sigma(\omega))^2}. \quad (2.96)$$

Wegen der Summenregel für die Spektralfunktion (2.49) folgt für die Selbstenergie

$$\text{Im} \Sigma_\sigma(\omega \geq 0) \leq 0. \quad (2.97)$$

Mit Hilfe der Spektralfunktion kann man die Impulsverteilung

$$n_\sigma(\epsilon) = \int_{-\infty}^0 d\omega A_\sigma(\epsilon; \omega) \quad (2.98)$$

berechnen, die für $d = \infty$ nur noch über $\epsilon = \epsilon(\mathbf{k})$ vom Impuls abhängt. In der metallischen Phase weist $n_\sigma(\epsilon)$ einen Sprung an der Fermikante auf ($\mu = 0$),

$$n_\sigma(\epsilon = 0^-) - n_\sigma(\epsilon = 0^+) = Z(U). \quad (2.99)$$

Dies ist eine weitere Möglichkeit das Quasiteilchengewicht zu bestimmen. Setzt man die Luttinger-Beziehungen (2.36) ein, kann man (2.98) für

$$n_{\sigma}(\epsilon > 0) = \frac{1 - Z(U)}{2} + \delta n(\epsilon) \quad (2.100)$$

berechnen. Dann erhält man abgesehen von Termen, die von dem inkohärenten Hintergrund der Spektralfunktion stammen,

$$\delta n(\epsilon) = \int_{-\omega_c}^0 \frac{d\omega}{\pi} \frac{\gamma \omega^2}{(\omega/Z - \epsilon)^2 + \gamma^2 \omega^4} + \dots \quad (2.101)$$

Im allgemeinen ist man besonders am Verhalten in der Nähe der Fermi-Energie interessiert, das bedeutet für die Energien

$$0 < Z(U)\epsilon < \omega_c . \quad (2.102)$$

Um ein endliches ϵ -Intervall zu beobachten, in dem die Formeln weiter unten gelten, kann man deswegen fordern,

$$Z(U) \sim \omega_c . \quad (2.103)$$

Desweiteren wählt man $\epsilon > 0$, so daß man sich oberhalb des Sprungs in der Impuls-Verteilung befindet. Explizite Berechnungen zeigen, daß der dominante Beitrag für kleine ϵ von den Frequenzen $\omega = Z(U)\epsilon$ stammt. Dann kann man den Term proportional zu ω^4 im Nenner vernachlässigen und findet

$$\delta n_{\sigma}(Z(U)\epsilon \ll \omega_c) = \frac{\gamma Z(U)^2 \omega_c}{\pi} \int_{-1}^0 \frac{dx x^2}{x - Z(U)\epsilon/\omega_c} . \quad (2.104)$$

Für diese Näherung muß man

$$\epsilon \ll \frac{1}{Z(U)^2 \gamma} \quad (2.105)$$

fordern, was mit (2.102) korrespondiert, so daß

$$\frac{1}{Z(U)\gamma} \sim \omega_c , \text{ das heißt,} \quad (2.106)$$

$$\gamma \sim (\omega_c)^{-2} . \quad (2.107)$$

Wenn die Skalierungsbedingungen (2.103) und (2.107) erfüllt sind, erhält man somit durch den führenden Term in der Nähe von $\epsilon = 0$ eine Impulsverteilung der folgenden Form ($E \equiv Z(U)\epsilon/\omega_c$),

$$n_{\sigma}(E) = \frac{1 - Z(U)}{2} + \frac{2\gamma\omega_c Z(U)^2}{\pi} E \ln(E) + \mathcal{O}(E) . \quad (2.108)$$

Die beiden Skalierungsbedingungen (2.103) und (2.107) sind konsistent mit den Luttinger-Bedingungen und garantieren, daß der Bereich endlich ist, wo das Verhalten $E \ln(E)$ zu sehen ist.

3 Störungsrechnung für schwache Wechselwirkung

Mit Hilfe der in Kapitel 2.4 dargestellten Diagrammtechnik wird die Selbstenergie des Hubbard-Modells als Störungsreihe bis zur vierten Ordnung in U berechnet. Die Vereinfachungen, die die Teilchen-Loch-Symmetrie mit sich bringt, reduzieren die Anzahl der echt verschiedenen Selbstenergiediagramme in der zweiten Ordnung auf eines und in der vierten Ordnung auf vier. Nach einigen Vorbetrachtungen im ersten Abschnitt wird die zweite Ordnung im zweiten Abschnitt berechnet und die Resultate im dritten Abschnitt vorgestellt. Im vierten Abschnitt folgt die Berechnung der Diagramme der vierten Ordnung. Das Kapitel schließt mit einer Darstellung der Ergebnisse der vierten Ordnung.

3.1 Vorbetrachtungen

3.1.1 Verschwinden der ungeraden Ordnungen

Bei halber Bandfüllung $n = N/L = 1$ besitzt das Hubbard-Modell die Teilchen-Loch-Symmetrie (2.15). Daraus ergeben sich einige Vereinfachungen für die Störungsrechnung. Zunächst existieren keine ungeraden Ordnungen in U . Die Transformation einer Spinsorte σ

$$\hat{c}_{1\sigma} \rightarrow \hat{c}_{1\sigma}(-1)^{\mathbf{l}} \quad (3.1)$$

läßt den Hamilton-Operator unverändert bis auf das Vorzeichen der Wechselwirkung. Demzufolge ist

$$G_{-\sigma}(\omega; U) = G_{-\sigma}(\omega; -U) , \quad (3.2)$$

so daß

$$\Sigma_{-\sigma}(U) = \Sigma_{-\sigma}(-U) . \quad (3.3)$$

Daraus folgt sofort, daß es in der U -Störungsreihe nur gerade Ordnungen gibt.

3.1.2 Verschwinden der Hartree-Fock-Beiträge

Weiterhin wurde schon in Kapitel 2.2 in Gleichung (2.17) argumentiert, daß die Wahl $\mu = 0$ des chemischen Potentials halbe Bandfüllung für jedes U garantiert. Das bedeutet

$$\langle \hat{n}_{1\sigma} \rangle = {}_0 \langle \hat{n}_{1\sigma} \rangle_0 = \frac{1}{2}, \quad (3.4)$$

wobei ${}_0 \langle \hat{n}_{1\sigma} \rangle_0$ die nichtwechselwirkende Elektronendichte der σ -Elektronen bezeichnet. Daraus folgt für die sogenannten *Hartree-Blasen*

$$\begin{aligned} \text{Diagramm} &= \text{Diagramm} \\ &= U \langle \hat{n}_{1\sigma} \rangle \\ &= \frac{U}{2}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Alle (renormierten) Hartree-Blasen fallen im symmetrisierten Hamilton-Operator des Hubbard-Modells (2.13) aufgrund der Terme $U/2$ weg, auch solche, die Selbstenergieeinschübe besitzen wie folgendes Diagramm aus der zweiten Ordnung,

$$\text{Diagramm} \quad (3.6)$$

Da das Hubbard-Modell keine Spinflip-Terme beinhaltet, existieren die Fock-Terme ebenfalls nicht,

$$\langle \hat{c}_{1\uparrow}^+ \hat{c}_{1\uparrow} \rangle = \langle \hat{c}_{1\downarrow}^+ \hat{c}_{1\downarrow} \rangle = 0. \quad (3.7)$$

Somit gibt es keine Strukturen der Form

$$\text{Diagramm} \quad (3.8)$$

die für einen Fock-Beitrag stehen. Eine Hartree-Fock-Näherung ist also trivial,

$$\hat{H}_{\text{HF}} = \hat{H}_0 = \hat{T}. \quad (3.9)$$

3.2 Zweite Ordnung

Von den Selbstenergiendiagrammen zweiter Ordnung (vgl. [32] Kapitel 9) bleibt lediglich ein Diagramm übrig,

$$\Sigma_{-\sigma}^{(2)}(\omega) = \text{Diagramm} \quad . \quad (3.10)$$

Dieses Diagramm der zweiten Ordnung ist ein Skelettdiagramm und enthält nach den Ausführungen in Kapitel 2.4.3 nur *einen* Gitterplatz. Die Propagatoren zwischen den Vertices sind demzufolge nur von der Frequenz abhängig. Auf die Energieerhaltung an jedem Vertex muß geachtet werden. Gemäß der Feynman-Regeln aus Kapitel 2.4.2 kann das Diagramm übersetzt werden in

$$\Sigma_{-\sigma}^{(2)}(\omega) = (-1)(i)^2 \frac{U^2}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2 G_{-\sigma}^0(\omega - \omega_1) G_{\sigma}^0(\omega_2) G_{\sigma}^0(\omega_2 + \omega_1) . \quad (3.11)$$

Die dort auftauchende Teilchen-Loch-Blase steht für den freien Polarisationspropagator

$$\Pi_{\sigma}^0(\omega_1) \equiv i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} G_{\sigma}^0(\omega_2) G_{\sigma}^0(\omega_2 + \omega_1) . \quad (3.12)$$

Setzt man für die freie Greenfunktion die spektrale Darstellung

$$G_{\sigma}^0(\omega) = \int_0^{\infty} d\epsilon D_{\sigma}^0(\epsilon) \left(\frac{1}{\omega - \epsilon + i\eta} + \frac{1}{\omega + \epsilon - i\eta} \right) \quad (3.13)$$

ein, erhält man durch Anwenden des Residuensatzes eine spektrale Darstellung der einfachen Polarisationsblase,

$$\Pi_{\sigma}^0(\omega) = - \int_0^{\infty} d\epsilon_1 \int_0^{\infty} d\epsilon_2 D_{\sigma}^0(\epsilon_1) D_{\sigma}^0(\epsilon_2) \left(\frac{1}{\omega - \epsilon_1 - \epsilon_2 + i\eta} + \frac{1}{\omega + \epsilon_1 + \epsilon_2 - i\eta} \right) . \quad (3.14)$$

Mit Hilfe der Dirac-Identität (2.74) kann man den Imaginärteil des Polarisationspropagators berechnen als

$$\frac{1}{\pi} \text{Im} \Pi_{\sigma}^0(\omega) = \int_0^{|\omega|} d\epsilon_1 D_{\sigma}^0(\epsilon_1) D_{\sigma}^0(|\omega| - \epsilon_1). \quad (3.15)$$

An dieser Darstellung wird deutlich, daß der Imaginärteil der freien Polarisationsblase für $|\omega| \geq 1$ verschwindet. Da der Spin-Index für die weiteren Rechnungen keine Relevanz hat, wird er im folgenden aus Gründen der Übersichtlichkeit unterdrückt. Die Selbstenergie in zweiter Ordnung stellt sich somit dar als

$$\text{Im} \Sigma_{\text{ret}}^{(2)}(\omega) = -\pi U^2 \int_0^{|\omega|} d\epsilon_1 \int_0^{|\omega| - \epsilon_1} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_1) D^0(\epsilon_2) D^0(|\omega| - \epsilon_1 - \epsilon_2) \quad (3.16)$$

$$= -\pi U^2 \int_0^{|\omega|} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \left(\frac{1}{\pi} \text{Im} [\Pi^0(|\omega| - \epsilon_1)] \right). \quad (3.17)$$

An Gleichung (3.16) sieht man, daß der Imaginärteil der Selbstenergie in zweiter Ordnung für $|\omega| \geq 3/2$ verschwindet, da die Zustandsdichte $D^0(\epsilon)$ auf $|\epsilon| < 1/2$ beschränkt ist. Physikalisch ist dies leicht einzusehen, wenn man überlegt, daß zwei Teilchen und ein Loch eine Anregung von jeweils höchstens $W/2$, also insgesamt von $3W/2$, verursachen können. Obige Rechnung für die zweite Ordnung findet man bereits in [36, 37].

Für die numerische Integration ist es hilfreich, die Frequenzen in folgende Bereiche einzuteilen,

$$0 \leq \omega < 0.5$$

$$\text{Im} \Sigma^{(2)}(\omega) = -U^2 \int_0^{\omega} d\epsilon D^0(\epsilon) \text{Im} \Pi^0(\omega - \epsilon), \quad (3.18)$$

$$0.5 \leq \omega < 1.0$$

$$\text{Im} \Sigma^{(2)}(\omega) = -U^2 \int_0^{1/2} d\epsilon D^0(\epsilon) \text{Im} \Pi^0(\omega - \epsilon), \quad (3.19)$$

$$1.0 \leq \omega < 1.5$$

$$\text{Im} \Sigma^{(2)}(\omega) = -U^2 \int_{\omega-1}^{1/2} d\epsilon D^0(\epsilon) \text{Im} \Pi^0(\omega - \epsilon), \quad (3.20)$$

$\omega \geq 1.5$

$$\text{Im } \Sigma^{(2)}(\omega) = 0. \quad (3.21)$$

Die Zustandsdichte $D^0(\epsilon)$ geht an der Stelle $\epsilon = 1/2$ und $\Pi^0(\omega - \epsilon)$ an der Stelle $\epsilon = \omega$ nicht differenzierbar in Null über. Die numerische Genauigkeit wird erhöht, wenn man an diesen kritischen Stellen die Integrale „per Hand“ abschneidet.

Wegen der Symmetrie (2.83) muß $\text{Im } \Sigma^{(2)}(\omega)$ für negative ω nicht extra berechnet werden. $\text{Im } \Pi^0(\omega)$ ist über (3.15) numerisch ermittelt und für $0 \leq \omega \leq 1$ in einer Schrittweite von 10^{-4} tabelliert worden. Als interpolierte Funktion geht der Imaginärteil der Polarisationsblase dann in die numerische Integration (3.18) bis (3.21) ein.

Der Realteil der Selbstenergie wird mit Hilfe der Kramers-Kronig-Transformation (2.44) ermittelt.

$0 \leq \omega < 1.5$

$$\begin{aligned} \text{Re } \Sigma^{(2)}(\omega) &= \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-3/2}^{3/2} d\zeta \frac{\text{Im } \Sigma^{(2)}(\zeta)}{\zeta - \omega} \quad (3.22) \\ &= \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\int_{-3/2}^{\omega - \epsilon} d\zeta \frac{\text{Im } \Sigma^{(2)}(\zeta) - \text{Im } \Sigma^{(2)}(\omega)}{\zeta - \omega} \right. \\ &\quad \left. + \int_{\omega + \epsilon}^{3/2} d\zeta \frac{\text{Im } \Sigma^{(2)}(\zeta) - \text{Im } \Sigma^{(2)}(\omega)}{\zeta - \omega} \right. \\ &\quad \left. + \text{Im } \Sigma^{(2)}(\omega) \ln \left| \frac{3 - 2\omega}{3 + 2\omega} \right| \right], \quad (3.23) \end{aligned}$$

$\omega \geq 1.5$

$$\text{Re } \Sigma^{(2)}(\omega) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{3/2} d\zeta \left(\frac{\text{Im } \Sigma^{(2)}(\zeta)}{\zeta - \omega} + \frac{\text{Im } \Sigma^{(2)}(\zeta)}{\zeta + \omega} \right). \quad (3.24)$$

3.3 Ergebnisse der zweiten Ordnung

3.3.1 Real- und Imaginärteil

In Abbildung 3.1 sind die Ergebnisse der numerischen Berechnung von $\Sigma^{(2)}(\omega)$ unabhängig vom Vorfaktor U^2 zu sehen. Real- und Imaginärteil der Selbstenergie

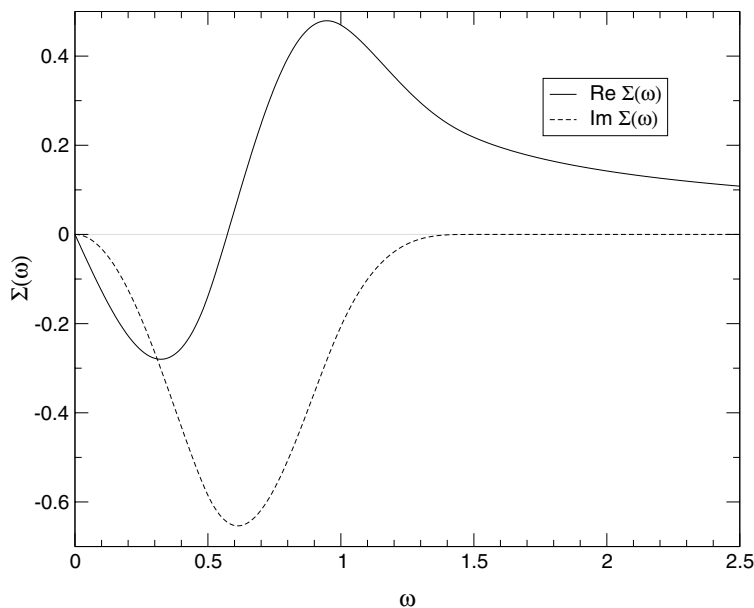


Abbildung 3.1 Realteil (durchgezogene Linie) und Imaginärteil (gestrichelte Linie) der Selbstenergie in zweiter Ordnung in U .

zeigen das typische Verhalten einer Fermiflüssigkeit (2.36). Für kleine ω verhält sich der Realteil linear mit einer Steigung

$$\left. \frac{\partial}{\partial \omega} \operatorname{Re} \Sigma^{(2)}(\omega) \right|_{\omega=0} \equiv -\sigma_2 = (-1.307 \pm 10^{-3}) U^2 \quad (3.25)$$

und der Imaginärteil quadratisch in ω mit

$$\operatorname{Im} \Sigma^{(2)}(\omega) \simeq (-3.242 \pm 10^{-3}) U^2 \omega^2. \quad (3.26)$$

3.3.2 Grundzustandsenergie

In [3] haben METZNER und VOLLHARDT die Grundzustandsenergie mit Hilfe von Goldstone-Diagrammen für die zweite Ordnung berechnet. Als Ergebnis erhalten sie

$$\frac{E_0}{L} = t + \alpha U^2, \quad (3.27)$$

wobei

$$t = \frac{1}{L} \langle \hat{T} \rangle = \int_{-1/2}^0 d\epsilon 2\epsilon D^0(\epsilon) = -\frac{2}{3\pi}, \quad (3.28)$$

$$\alpha = - \int_0^\infty d\lambda [F(\lambda)]^4 \quad (3.29)$$

mit

$$F(\lambda) \equiv \int_0^{1/2} dx D^0(x) e^{-\lambda x}. \quad (3.30)$$

Um die numerische Genauigkeit zur Ermittlung von α abschätzen zu können ist dieser Faktor zunächst für die konstante Zustandsdichte

$$D_{\text{const}}^0(x) \equiv \begin{cases} 1 & \text{für } |\epsilon| \leq 1/2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.31)$$

ermittelt worden. Für die konstante Zustandsdichte kennt man einen expliziten Ausdruck [38],

$$\alpha_{\text{const}} = -\frac{1}{12} (44 \ln 2 - 27 \ln 3), \quad (3.32)$$

den man mit dem numerischen Ergebnis aus Gleichung (3.29) vergleichen kann. Demnach liegt die numerische Genauigkeit bei 10^{-8} . Für die semielliptische Zustandsdichte erhält man das numerische Ergebnis

$$\alpha_{\text{se}} = -0.083\,464\,6 \pm 10^{-8}. \quad (3.33)$$

3.4 Vierte Ordnung

3.4.1 Diagramme

Die Vereinfachungen für die zweite Ordnung gelten natürlich in der vierten Ordnung ebenfalls und reduzieren die Anzahl der verschiedenen Selbstenergiediagramme erheblich. Der Erwartungswert (2.54) zur Berechnung der Greenfunktion enthält sowohl Terme mit \uparrow -Spins als auch solche mit \downarrow -Spins. Da es jedoch keine Spin-Flips im Hamilton-Operator (2.13) gibt, erhält man ein Produkt aus zwei unabhängigen Erwartungswerten, die jeweils nur eine Spin-Spezies enthalten.

Jeder der beiden Erwartungswert kann zunächst getrennt diagrammatisch ausgewertet werden, indem man alle topologisch verschiedenen Möglichkeiten herausucht. Die Hubbard-Wechselwirkung U verbindet die Terme der verschiedenen Spin-Sorten. Alle unverbundenen Diagramme und alle Beiträge mit Hartree-Blasen fallen weg. Da die Selbstenergie zudem keine einteilchen-reduzierbaren Beiträge enthält, wird die Anzahl der topologisch verschiedenen Selbstenergiediagramme auf zwölf reduziert. Die Beiträge der vierten Ordnung sind demnach

$$\Sigma^{(4)} = 3 \left(\Sigma^{(4a)} + \Sigma^{(4b)} + \Sigma^{(4c)} + \Sigma^{(4d)} \right), \quad (3.34)$$

$$3\Sigma^{(4a)} = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3}, \quad (3.35)$$

$$3\Sigma^{(4b)} = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3}, \quad (3.36)$$

$$3\Sigma^{(4c)} = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3}, \quad (3.37)$$

$$3\Sigma^{(4d)} = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3}. \quad (3.38)$$

Die Diagramme zu $\Sigma^{(4a)}$, $\Sigma^{(4b)}$, $\Sigma^{(4c)}$ und $\Sigma^{(4d)}$ liefern identische Beiträge zur Selbstenergie, wie zuerst von YAMADA und YOSIDA in deren Untersuchungen des

symmetrischen Anderson Verunreinigungsmodells bemerkt wurde [39]. Im Appendix B wird die Äquivalenz der Diagramme zu $\Sigma^{(4b)}$ explizit gezeigt. Die anderen Äquivalenzen lassen sich analog nachweisen.

Die Diagramme der vierten Ordnung sind ebenfalls von FREERICKS und JARRELL untersucht worden [40]. Sie haben dazu allerdings den Weg über die Matsubara-Greenfunktionen gewählt, die für $T > 0$ geeignet sind. Diese Greenfunktionen sind im Gegensatz zu den Greenfunktionen für $T = 0$ diskret im Frequenzraum. Der Entwicklungsparameter in der Matsubara-Technik ist jedoch Energie durch Temperatur, also U/T . Dies ist zur Untersuchung des Mott-Hubbard-Übergangs ungünstig, da dieser ein Quanten-Phasen-Übergang bei $T = 0$ ist. Es ist in diesem Fall also vorteilhafter, die Greenfunktionen für $T = 0$ zu untersuchen.

Jedes Diagramm wird über den Residuensatz im Frequenzraum ausgewertet und auf endliche Zwei- oder Dreifach-Integrale zurückgeführt. Die Berechnung der Integrale erfolgt numerisch mit einer Routine [41], die auf der Midpoint-Methode basiert [42]. Da die analytische Vorarbeit zum Teil recht aufwendig ist, kann auf diesem Weg eine zufriedenstellende Genauigkeit erzielt werden. Zur Kontrolle wird jedes Diagramm zudem in der Zeit-Domäne berechnet, was einfacher zu implementieren ist, aber bei gleicher Rechenzeit zu einer geringeren Genauigkeit führt, siehe Appendix B.

3.4.2 Ringdiagramm

Analog zur zweiten Ordnung erhält man mit Hilfe der Feynman-Regeln aus Kapitel 2.4.2 das folgende Skelettdiagramm, bei dem nur auf Energieerhaltung geachtet werden muß,

$$\Sigma^{(4a)}(\omega) = \text{Diagramm} \quad (3.39)$$

$$= (-1)^3 (i)^4 \frac{U^4}{(2\pi)^4} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 G^0(\omega - \omega_1) \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2 G^0(\omega_2 + \omega_1) G^0(\omega_2) \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_3 G^0(\omega_3 + \omega_1) G^0(\omega_3) \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_4 G^0(\omega_4 + \omega_1) G^0(\omega_4). \quad (3.40)$$

Offensichtlich kann man mittels des einfachen Polarisationspropagators $\Pi^0(\omega_1)$ (3.12) obige Gleichung vereinfachen,

$$\Sigma^{(4a)}(\omega) = -\frac{U^4}{(2\pi)^4} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 G^0(\omega - \omega_1) \left(\frac{2\pi}{i} \Pi^0(\omega_1) \right)^3. \quad (3.41)$$

Zunächst definiert man $P(\omega_1)$ und schreibt diese Größe im nächsten Schritt mit Hilfe der Spektralfunktion $A^P(\omega)$ um,

$$P(\omega_1) \equiv \left(\Pi^0(\omega_1) \right)^3 = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{A^P(\omega')}{\omega_1 - \omega' + i\delta \operatorname{sgn}(\omega')}. \quad (3.42)$$

Setzt man zudem noch (3.13) ein, erhält man

$$\begin{aligned} \Sigma^{(4a)}(\omega) = & -\frac{iU^4}{2\pi} \int_0^{1/2} d\epsilon D^0(\epsilon) \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' A^P(\omega') \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \\ & \left(\frac{1}{\omega_1 - \omega' + \epsilon - i\eta} + \frac{1}{\omega_1 - \omega' - \epsilon + i\eta} \right) \frac{1}{\omega_1 - \omega' + i\delta \operatorname{sgn}(\omega')}. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Da der Zusammenhang $-\pi A^P(\omega') = \operatorname{Im} P(\omega')$ gilt, kann man mit Hilfe des Residuensatzes das Contour-Integral über ω_1 berechnen,

$$\Sigma^{(4a)}(\omega) = -\frac{U^4}{\pi} \int_0^{1/2} d\epsilon D^0(\epsilon) \left(\int_0^{\infty} \frac{d\omega' \operatorname{Im} P(\omega')}{\omega' - \omega + \epsilon - i\delta} + \int_{-\infty}^0 \frac{d\omega' \operatorname{Im} P(\omega')}{\omega' - \omega - \epsilon + i\delta} \right). \quad (3.44)$$

Nutzt man die Dirac-Identität (2.74) aus, erhält man schließlich

$$\operatorname{Im} \Sigma^{(4a)}(\omega) = -U^4 \operatorname{sgn}(\omega) \int_0^{|\omega|} d\epsilon D^0(\epsilon) \operatorname{Im} P(|\omega| - \epsilon). \quad (3.45)$$

In Analogie zur zweiten Ordnung wird für die numerische Integration eine Aufteilung des Frequenzbereichs vorgenommen, siehe (3.18) bis (3.21). Die Funktion $\operatorname{Im} P(\omega)$ wird im Vorhinein über

$$\operatorname{Im} P(\omega) = \operatorname{Im} \Pi^0(\omega) \left[3(\operatorname{Re} \Pi^0(\omega))^2 - (\operatorname{Im} \Pi^0(\omega))^2 \right] \quad (3.46)$$

numerisch berechnet, feinschrittig tabelliert und geht als interpolierte Funktion in die Integrationsroutine zur Berechnung von $\operatorname{Im} \Sigma^{(4a)}(\omega)$ ein. Der Realteil von $\Pi^0(\omega)$ ist dabei wieder mit der Kramers-Kronig-Transformation (2.44) ermittelt worden. Analog zur zweiten Ordnung verschwindet $\operatorname{Im} \Sigma^{(4a)}(\omega)$ für $\omega \geq 3/2$.

3.4.3 Zweite-Ordnungsdiagramm mit Vertexkorrektur

Nach den Feynman-Regeln ergibt sich für das folgende Skelettdiagramm

$$\Sigma^{(4b)}(\omega) =$$

$$(3.47)$$

$$= -U^4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} G^0(\omega - \omega_1) \Pi^0(\omega_1) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_3}{2\pi} G^0(\omega - \omega_1 - \omega_3) G^0(\omega - \omega_3) \Pi^0(\omega_3) . \quad (3.48)$$

Wie in Kapitel 3.2.1 und Kapitel 3.4.1 setzt man die Spektraldarstellung für die einfache Polarisationsblase (3.12) und die freie lokale Greenfunktion (3.13) ein und erhält

$$\Sigma^{(4b)}(\omega) = -U^4 \int_0^{\infty} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \cdots \int_0^{\infty} d\epsilon_4 D^0(\epsilon_4) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} G^0(\omega - \omega_1) \Pi^0(\omega_1) X(\omega_1, \omega) , \quad (3.49)$$

wobei man das Contour-Integral über ω_3 ausführen kann,

$$X(\omega_1, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_3}{2\pi} \left(\frac{1}{\omega - \omega_1 - \omega_3 - \epsilon_1 + i\eta_1} + \frac{1}{\omega - \omega_1 - \omega_3 + \epsilon_1 - i\eta_1} \right) \times \left(\frac{1}{\omega - \omega_3 - \epsilon_2 + i\eta_2} + \frac{1}{\omega - \omega_1 + \epsilon_2 - i\eta_2} \right) \times \left(\frac{1}{\omega_3 - \epsilon_3 - \epsilon_4 + i\eta_3} + \frac{1}{\omega_3 + \epsilon_3 + \epsilon_1 - i\eta_3} \right) . \quad (3.50)$$

Weiter folgt wiederum mit (3.12) und (3.13)

$$\begin{aligned} \Sigma^{(4b)}(\omega) &= -U^4 \int_0^\infty d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \cdots \int_0^\infty d\epsilon_7 D^0(\epsilon_7) \int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega_1}{2\pi} X(\omega_1, \omega) \\ &\quad \times \left(\frac{1}{\omega - \omega_1 - \epsilon_4 + i\eta_4} + \frac{1}{\omega - \omega_1 + \epsilon_4 - i\eta_4} \right) \\ &\quad \times \left(\frac{1}{\omega_1 - \epsilon_6 - \epsilon_7 + i\eta_5} + \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_6 + \epsilon_7 - i\eta_5} \right). \end{aligned} \quad (3.51)$$

Zunächst müssen die Contour-Integrale über ω_1 und ω_3 ausgeführt werden. Da die ω_i -Integrale jedoch nicht so elegant faktorisiert werden können wie bei dem Ringdiagramm, ergibt sich bei deren Berechnung eine größere Zahl an Summanden, siehe Appendix A. Letztendlich verbleiben zwanzig Integrale, die man mit Hilfe der Zustandsdichte und verschiedenen Hilfsfunktionen, siehe Anhang C, ausdrücken kann. Es ist möglich diese Integrale in sechs Terme zusammenzufassen. Damit ergibt der Imaginärteil von $\Sigma^{(4b)}(\omega)$

$$\text{Im} \Sigma^{(4b)} = \pi U^4 (I_1 + \cdots + I_6), \quad (3.52)$$

wobei

$$I_1 = - \int_0^1 da \int_0^1 db h(a) h(b) \tilde{D}^0(\omega - a - b) l(b - \omega) l(a - \omega), \quad (3.53)$$

$$\begin{aligned} I_2 &= -2 \int_0^1 db \int_0^{1/2} d\epsilon_1 \\ &\quad h(b) D^0(\epsilon_1) h(\omega - \epsilon_1) [f(b - \omega) f(b - \epsilon_1) + f(b + \omega) f(b + \epsilon_1)], \end{aligned} \quad (3.54)$$

$$I_3 = 2 \int_0^1 da \int_0^{1/2} d\epsilon_1 h(a) \tilde{D}^0(\omega - a) D^0(\epsilon_1) f(\epsilon_1 + a) [H(\epsilon_1 + a - \omega) + H(\omega + \epsilon_1)], \quad (3.55)$$

$$\begin{aligned} I_4 &= \pi^2 \int_0^1 da \int_0^1 db \\ &\quad h(a) h(b) \tilde{D}^0(\omega - a) \tilde{D}^0(\omega - b) [\tilde{D}^0(\omega - a - b) - \tilde{D}^0(a + b - \omega)], \end{aligned} \quad (3.56)$$

$$I_5 = 2 \int_0^{1/2} d\epsilon_1 \int_0^{1/2} d\epsilon_5 D^0(\epsilon_1) D^0(\epsilon_5) h(\omega - \epsilon_5) f(\epsilon_1 + \epsilon_5 - \omega) [H(\epsilon_1 + \epsilon_5) + H(\epsilon_1 - \omega)] , \quad (3.57)$$

$$I_6 = \int_0^{1/2} d\epsilon_1 \int_0^{1/2} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_1) D^0(\epsilon_2) \tilde{D}^0(\omega - \epsilon_1 - \epsilon_2) [2H(\epsilon_2 - \omega)H(\epsilon_1 + \epsilon_2) + H(\omega - \epsilon_2)H(\epsilon_1 + \epsilon_2) + H(\epsilon_1 - \omega)H(\epsilon_2 - \omega)] . \quad (3.58)$$

Für die praktische Berechnung ist es ratsam, das Frequenzintervall, über das integriert wird, in die Intervalle $[(r-1)/2, r/2]$ ($r = 1, \dots, 5$) aufzuspalten, um die numerischen Fehler klein zu halten, siehe Appendix A.

3.4.4 Zweite-Ordnungsdiagramm mit Vertexkorrektur im Ring

Die Feynman-Regeln resultieren für das Zweite-Ordnungsdiagramm mit Vertexkorrektur in der Polarisationsblase in

$$\Sigma^{(4c)}(\omega) = \text{Diagram} \quad (3.59)$$

$$= (-1)^2 \frac{U^4}{(2\pi)^4} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_4 G^0(\omega - \omega_1) G^0(\omega_4) G^0(\omega_4 - \omega_2) \times G^0(\omega_4 - \omega_1 - \omega_2) G^0(\omega_4 - \omega_1) G^0(\omega_3) G^0(\omega_3 - \omega_2) . \quad (3.60)$$

Die renormierte Polarisationsblase kann man offensichtlich abseparieren, so daß sich der folgende Ausdruck ergibt,

$$\Sigma^{(4c)}(\omega) = -i \frac{U^4}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 G^0(\omega - \omega_1) \Pi_V(\omega_1) , \quad (3.61)$$

wobei

$$\begin{aligned} \Pi_V(\omega_1) \equiv i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_3}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_4}{2\pi} G^0(\omega_4) G^0(\omega_4 - \omega_2) \\ G^0(\omega_4 - \omega_1 - \omega_2) G^0(\omega_4 - \omega_1) G^0(\omega_3) G^0(\omega_3 - \omega_2) . \end{aligned} \quad (3.62)$$

Für diese renormierte Polarisationsblase gilt folgende Symmetrie

$$\Pi_V(-\omega_1) = \Pi_V(\omega_1) , \quad (3.63)$$

das heißt, daß auch diese Funktion nur für positive Argumente berechnet werden muß. In enger Analogie zur zweiten Ordnung kann man folgern, daß für den Imaginärteil gilt ($\omega \geq 0$)

$$\text{Im} \Sigma^{(4c)}(\omega) = -U^4 \int_0^{\omega} d\epsilon D^0(\epsilon) \text{Im} \Pi_V(\omega - \epsilon) . \quad (3.64)$$

Das Einsetzen der spektralen Darstellungen (3.12) und (3.13) ergibt

$$\begin{aligned} \Pi_V(\omega_1) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_4}{2\pi} G^0(\omega_4) G^0(\omega_4 - \omega_1) \\ &\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} G^0(\omega_4 - \omega_1 - \omega_2) G^0(\omega_4 - \omega_2) \Pi^0(\omega_2) \end{aligned} \quad (3.65)$$

$$\begin{aligned} &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_4}{2\pi} G^0(\omega_4) G^0(\omega_4 - \omega_1) \int_0^{\infty} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \cdots \int_0^{\infty} d\epsilon_4 D^0(\epsilon_4) \\ &\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} \left(\frac{1}{\omega_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4 + i\eta_3} - \frac{1}{\omega_2 + \epsilon_3 + \epsilon_4 - i\eta_3} \right) \\ &\times \left(\frac{1}{\omega_2 - \omega_4 - \epsilon_1 + i\eta_1} + \frac{1}{\omega_2 - \omega_4 + \epsilon_1 - i\eta_1} \right) \\ &\times \left(\frac{1}{\omega_2 + \omega_1 - \omega_4 - \epsilon_2 + i\eta_2} - \frac{1}{\omega_2 + \omega_1 - \omega_4 + \epsilon_2 - i\eta_2} \right) \end{aligned} \quad (3.66)$$

$$\begin{aligned} &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_4}{2\pi} G^0(\omega_4) G^0(\omega_4 - \omega_1) \int_0^{\infty} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \cdots \int_0^{\infty} d\epsilon_4 D^0(\epsilon_4) \\ &\times K(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4, \omega_1, \omega_4) . \end{aligned} \quad (3.67)$$

Die Klammern müssen ausmultipliziert werden, und das ω_2 -Integral muß mittels Residuensatz berechnet werden. Hat man $K(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4, \omega_1, \omega_4)$ ermittelt, wird das letzte Integral ebenfalls mittels Residuensatz gelöst. Die dazugehörigen Rechnungen sind im Anhang A zu finden. Man erhält schließlich für positive Frequenzen ω_1 ,

$$\begin{aligned}
\text{Im}\Pi_V(\omega_1) = & 2 \text{Im} \int_0^\infty d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \cdots \int_0^\infty d\epsilon_6 D^0(\epsilon_6) \\
& \left\{ \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_1 - \epsilon_2 - i\eta_1 \text{sgn}(\epsilon_1 - \epsilon_2)} \times \frac{1}{\epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_5} \right. \\
& \quad \times \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_6} \\
& + \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_1 - \epsilon_2 - i\eta_1 \text{sgn}(\epsilon_1 - \epsilon_2)} \times \frac{1}{\epsilon_2 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_6} \\
& \quad \times \frac{1}{\omega_1 - \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4 - \epsilon_5 + i\eta_3} \\
& + 2 \frac{1}{\omega_1 - \epsilon_1 - \epsilon_2 + i\eta_1} \times \frac{1}{\omega_1 - \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4 - \epsilon_5 + i\eta_5} \\
& \quad \times \frac{1}{\epsilon_2 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_6} \\
& + 2 \frac{1}{\omega_1 - \epsilon_1 - \epsilon_2 + i\eta_1} \times \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_5 + \epsilon_6 - i\eta_2} \\
& \quad \times \frac{1}{\epsilon_2 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_6} \\
& \left. + \frac{1}{\omega_1 - \epsilon_1 - \epsilon_2 + i\eta_1} \times \frac{1}{\omega_1 - \epsilon_5 - \epsilon_6 + i\eta_2} \right. \\
& \quad \left. \times \frac{1}{\omega_1 - \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4 - \epsilon_5 + i\eta_3} \right\}. \quad (3.68)
\end{aligned}$$

Nimmt man den Imaginärteil der renormierten Polarisationsblase, vereinfacht sich der obige Ausdruck. Analog zu $\Sigma^{(4b)}(\omega)$ wird dieser Ausdruck mit Hilfe der Dirac-Identität ermittelt und durch Einsetzen der Hilfsfunktionen (C.3), (C.8), (C.1) und (C.10) berechnet. Die zwei Terme mit dem Faktor $\text{sgn}(\epsilon_1 - \epsilon_2)\delta(\omega_1 + \epsilon_1 - \epsilon_2)$ heben

sich gegenseitig weg. Es bleibt zu berechnen,

$$\text{Im}\Pi_V(\omega_1) = -2\pi(J_1 + \dots + J_7) \quad (3.69)$$

mit

$$J_1 = \int_0^{1/2} d\epsilon_2 \int_0^1 dy h(y) D^0(\epsilon_2) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon_2 - y) f(\omega_1 - \epsilon_2) f(\epsilon_2 + y), \quad (3.70)$$

$$J_2 = 2 \int_0^{1/2} d\epsilon_2 \int_0^1 dy h(y) D^0(\epsilon_2) D^0(\omega_1 - \epsilon_2) f(\epsilon_2 + y - \omega_1) f(\epsilon_2 + y), \quad (3.71)$$

$$J_3 = 2 \int_0^{1/2} d\epsilon_2 \int_0^1 dy h(y) D^0(\epsilon_2) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon_2 - y) f(\epsilon_2 - \omega_1) f(\epsilon_2 + y), \quad (3.72)$$

$$J_4 = 2 \int_0^{1/2} d\epsilon_2 \int_0^{1/2} d\epsilon_6 D^0(\epsilon_2) D^0(\epsilon_6) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon_2) f(\omega_1 + \epsilon_6) H(\epsilon_2 + \epsilon_6), \quad (3.73)$$

$$J_5 = 2 \int_0^{1/2} d\epsilon_2 \int_0^{1/2} d\epsilon_5 D^0(\epsilon_2) D^0(\epsilon_5) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon_2) f(\epsilon_5 - \omega_1) H(\epsilon_2 + \epsilon_5 - \omega_1), \quad (3.74)$$

$$J_6 = \int_0^{1/2} d\epsilon_2 \int_0^{1/2} d\epsilon_5 D^0(\epsilon_2) D^0(\epsilon_5) f(\epsilon_2 - \omega_1) f(\epsilon_5 - \omega_1) h(\omega_1 - \epsilon_2 - \epsilon_5), \quad (3.75)$$

$$J_7 = \pi^2 \int_0^{1/2} d\epsilon_2 \int_0^{1/2} d\epsilon_5 D^0(\epsilon_2) D^0(\epsilon_5) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon_2) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon_5) h(\omega_1 - \epsilon_2 - \epsilon_5). \quad (3.76)$$

Wie bei den anderen Diagrammen müssen die Integrale zu Gunsten einer höheren numerischen Genauigkeit an kritischen Stellen aufgespalten werden. Die genaue Darlegung dessen ist im Appendix A zu finden.

3.4.5 Zweite-Ordnungsdiagramm mit Selbstenergieeinschub

Die Feynman-Regeln ergeben für das Zweite-Ordnungsdiagramm mit Selbstenergieeinschub den folgenden Ausdruck, den man offensichtlich mit Hilfe der Ergebnisse für die freie Polarisationsblase und die Selbstenergie in zweiter Ordnung vereinfachen kann,

$$\Sigma^{(4d)}(\omega) = \quad (3.77)$$

$$= -(i)^2 U^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} [G^0(\epsilon_{\mathbf{k}}; \omega - \omega_1)]^2 \Sigma^{(2)}(\omega - \omega_1) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} G^0(\omega_2) G^0(\omega_1 + \omega_2) \quad (3.78)$$

$$= U^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi i} \Pi^0(\omega_1) \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} [G^0(\epsilon_{\mathbf{k}}; \omega - \omega_1)]^2 \Sigma^{(2)}(\omega - \omega_1). \quad (3.79)$$

Da dieses Diagramm einen Selbstenergieeinschub hat, kann die Impulserhaltung bei den inneren Vertizes nicht ignoriert werden. So kommt zu den Frequenzintegralen eine Summe über den Impuls \mathbf{k} . Diese Summe ergibt

$$\frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} [G^0(\epsilon_{\mathbf{k}}; \omega - \omega_1)]^2 = \int_0^{1/2} dx D^0(x) \left[\frac{1}{\omega - \omega_1 - x + i\eta_3} \frac{1}{\omega - \omega_1 - x + i\eta_4} + \frac{1}{\omega - \omega_1 + x - i\eta_3} \frac{1}{\omega - \omega_1 + x - i\eta_4} \right]. \quad (3.80)$$

Setzt man die Spektraldarstellung für die einfache Greenfunktion (3.80), die freie Polarisationsblase (C.11) und die zweite Ordnung (C.13) in Gleichung (3.79) ein, kommt man zu dem Ergebnis

$$\begin{aligned} \Sigma^{(4d)}(\omega) &= U^4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi i} \int_0^1 da h(a) \int_0^{3/2} db s(b) \int_0^{1/2} dx D^0(x) \\ &\quad \left\{ \left(\frac{1}{\omega_1 - a + i\eta_1} - \frac{1}{\omega_1 + a - i\eta_1} \right) \right. \\ &\quad \times \left(\frac{1}{\omega_1 - \omega + b - i\eta_2} + \frac{1}{\omega_1 - \omega - b + i\eta_2} \right) \\ &\quad \left. \times \left(\frac{1}{(\omega_1 - \omega - x + i\eta_3)^2} + \frac{1}{(\omega_1 - \omega + x - i\eta_3)^2} \right) \right\} \quad (3.81) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= -U^4 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi i} \int_0^1 da h(a) \int_0^{3/2} db s(b) \int_0^{1/2} dx d(x) \\ &\quad \left\{ \left(\frac{1}{\omega_1 - a + i\eta_1} - \frac{1}{\omega_1 + a - i\eta_1} \right) \right. \\ &\quad \times \left(\frac{1}{\omega_1 - \omega + b - i\eta_2} + \frac{1}{\omega_1 - \omega - b + i\eta_2} \right) \\ &\quad \left. \times \left(\frac{1}{\omega_1 - \omega - x + i\eta_3} - \frac{1}{\omega_1 - \omega + x - i\eta_3} \right) \right\}. \quad (3.82) \end{aligned}$$

In Gleichung (3.80) setzt man $\eta_3 = \eta_4$ und im letzten Schritt integriert man partiell über x , wodurch die Ableitung der Zustandsdichte (C.2) auftaucht. Die Berechnung des Frequenzintegrals nach der üblichen Vorgehensweise führt schließlich auf folgenden Ausdruck,

$$\begin{aligned} \text{Im} \Sigma^{(4d)}(\omega) &= \pi U^4 \int_0^{1/2} dx d(x) h(\omega - x) [S(x) - S(-x)] \\ &\quad + \pi U^4 \int_0^{3/2} db s(b) h(\omega - b) l'(b), \quad (3.83) \end{aligned}$$

wobei die Hilfsfunktionen im Appendix C und die Berechnung des Frequenzintegrals sowie die notwendige Aufspaltung der Integrale in den diversen Frequenzbereichen im Anhang A nachgelesen werden kann.

3.5 Ergebnisse der vierten Ordnung

3.5.1 Real- und Imaginärteil

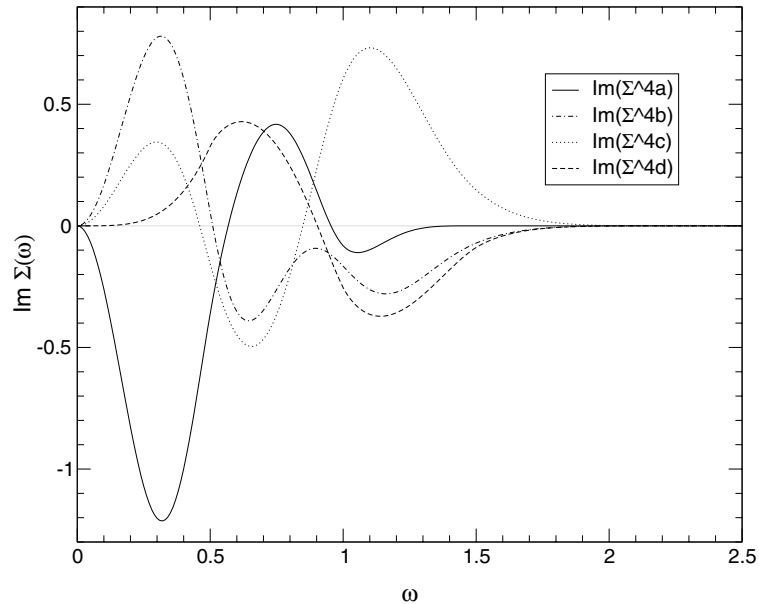


Abbildung 3.2 Die vier verschiedenen Kurven zeigen die Anteile der Vierten Ordnung zum Imaginärteil der Selbstenergie.

In Abbildung 3.2 sind die Ergebnisse der Berechnung der Vierten-Ordnungsbeiträge zum Imaginärteil der Selbstenergie zu sehen. Hieran kann man deutlich erkennen, wie gefährlich es sein kann, wenn man ganze Diagrammklassen von vorneherein vernachlässigt, indem man seine Näherung nur auf ausgewählten Diagrammklassen aufbaut. Beispielsweise haben MENGE und MÜLLER-HARTMANN [37] lediglich die am einfachsten zugängliche Diagrammkategorie der Blasen- und Leiterdiagramme berücksichtigt, denen $\Sigma^{(4a)}(\omega)$ und $\Sigma^{(4d)}(\omega)$ zuzuordnen sind. An Abbildung 3.2 kann man sofort ablesen, daß man durch die Vernachlässigung der anderen Kurven einen groben Fehler macht, denn alle Anteile der vierten Ordnung sind gleich stark.

Um $\text{Im}\Sigma^{(4)}(\omega)$, den Imaginärteil des Selbstenergiebeitrags zur vierten Ordnung, zu erhalten, müssen die vier verschiedenen Anteile gemäß (3.34) addiert und verdreifacht werden. Der dazugehörige Realteil der Selbstenergie wird analog zur zweiten Ordnung mittels Kramers-Kronig-Transformation berechnet. Die Ergebnisse sind in Abbildung 3.3 dargestellt.

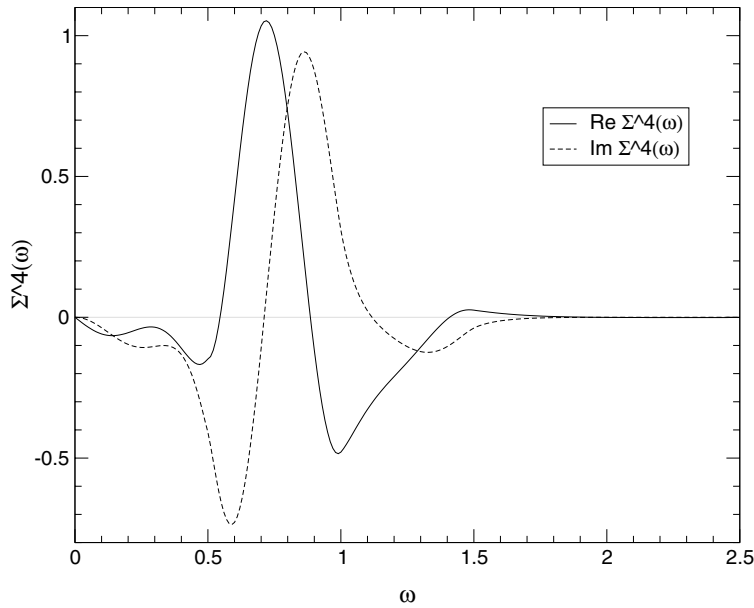


Abbildung 3.3 Realteil (durchgezogene Linie) und Imaginärteil (gestrichelte Linie) des Vierten-Ordnungsbeitrags zur Selbstenergie.

Wie man an Abbildung 3.3 erkennt, liegen die interessanten neuen Strukturen der vierten Ordnung bei $0.5 \leq \omega \leq 1.0$ und nicht bei $0.1 \leq \omega \leq 0.5$, wie nach $\text{Im} \Sigma^{(4a)}(\omega)$ zu erwarten wäre. Das große spektrale Gewichte dieser Kurve wird in diesem Frequenzintervall nahezu vollständig von den anderen Kurven aufgehoben. Das zeigt deutlich, wie falsch man liegen kann, wenn man seine Berechnungen nur auf eine Diagrammklasse stützt. Man erwartet, daß sich neue Strukturen in den zu berechnenden Observablen ebenfalls in diesem Frequenzbereich zeigen.

Real- und Imaginärteil zeigen das erwartete Fermiflüssigkeitsverhalten bei kleinen Frequenzen. Der Realteil ist in diesem Bereich linear mit einer Steigung

$$\left. \frac{\partial}{\partial \omega} \text{Re} \Sigma^{(4)}(\omega) \right|_{\omega=0} \equiv -\sigma_4 = (-0.739 \pm 10^{-3}) U^4. \quad (3.84)$$

Gemeinsam mit dem Anteil der zweiten Ordnung (3.26) erhält man für das Quasiteilchengewicht (2.93)

$$Z(U)^{-1} = 1 + \sigma_2 U^2 + \sigma_4 U^4 + \mathcal{O}(U^6) \quad (3.85)$$

$$= 1 - (1.307 \pm 10^{-3}) U^2 + (0.739 \pm 10^{-3}) U^4 + \mathcal{O}(U^6). \quad (3.86)$$

Wie in der zweiten Ordnung zeigt der Imaginärteil für kleine Frequenzen ein quadratisches Verhalten,

$$\text{Im} \Sigma^{(4)}(\omega) \simeq (-4.197 \pm 10^{-3}) U^4 \omega^2. \quad (3.87)$$

Der Imaginärteil der Selbstenergie muß nach (2.97) für positive Frequenzen immer negativ sein. Der Vierte-Ordnungsanteil zeigt dieses Verhalten so noch nicht. Wird er zum Beitrag der zweiten Ordnung addiert,

$$\Sigma^{(2+4)}(\omega) \equiv \Sigma^{(2)}(\omega) + \Sigma^{(4)}(\omega), \quad (3.88)$$

muß der Parameter U so klein gewählt werden, daß die positiven Beiträge der vierten Ordnung von der negativen zweiten Ordnung kompensiert werden und die Summe aus beiden die Ungleichung (2.97) erfüllt. Die maximale Wechselwirkungsstärke $U_{\max} = 0.6365 W$, bis zu der man der Störungsentwicklung höchstens Vertrauen schenken kann, liefert gleichzeitig einen Konsistenzcheck.

3.5.2 Zustandsdichte

Gleichung (2.85) zeigt einen Weg, um aus der berechneten Selbstenergie an die wechselwirkende Zustandsdichte zu gelangen,

$$D^{(4)}(\omega) = -\frac{8}{\pi} \text{Im} \left[\omega - \Sigma^{(2+4)}(\omega; U) - \sqrt{[\omega - \Sigma^{(2+4)}(\omega; U)]^2 - \frac{1}{4}} \right]. \quad (3.89)$$

Allerdings liegt die Zustandsdichte auf diesem Wege nicht als klare Entwicklung in U bis zur vierten Ordnung vor. Die Entwicklung des Wurzelterms bringt auch höhere Ordnungen $\mathcal{O}(U^n)$ ($n = 6, 8, \dots$) mit sich. Die Abbildung (3.4) zeigt die Ergebnisse der Berechnung von Gleichung (3.89) für $U = 0.4 W$ und $U = 0.6 W$. Die zweite Ordnung wird dabei analog zu Gleichung (3.89) mit $\Sigma^{(2)}(\omega; U)$ anstelle von $\Sigma^{(2+4)}(\omega; U)$ bestimmt. Wie im vorigen Kapitel vorausgesagt, entstehen in der vierten Ordnung im Frequenz-Intervall $0.5 \leq \omega \leq 1.0$ neue Strukturen, die in der zweiten Ordnung für $U = 0.4 W$ noch gar nicht und für $U = 0.6 W$ noch nicht so ausgeprägt vorhanden sind. Man kann hier die Entstehung des oberen Hubbard-Bandes beobachten, die bemerkenswerterweise schon bei recht kleinen Wechselwirkungsstärken $U \approx 0.4 W$ auftritt.

3.5.3 Grundzustandsenergie und mittlere Doppelbesetzung

In der vierten Ordnung stehen bisher keine Berechnungen der Grundzustandsenergie mittels Goldstone-Diagrammen zur Verfügung. Mit Hilfe der Selbstenergie kann die Grundzustandsenergie jedoch über das erste Moment (2.89) bestimmt

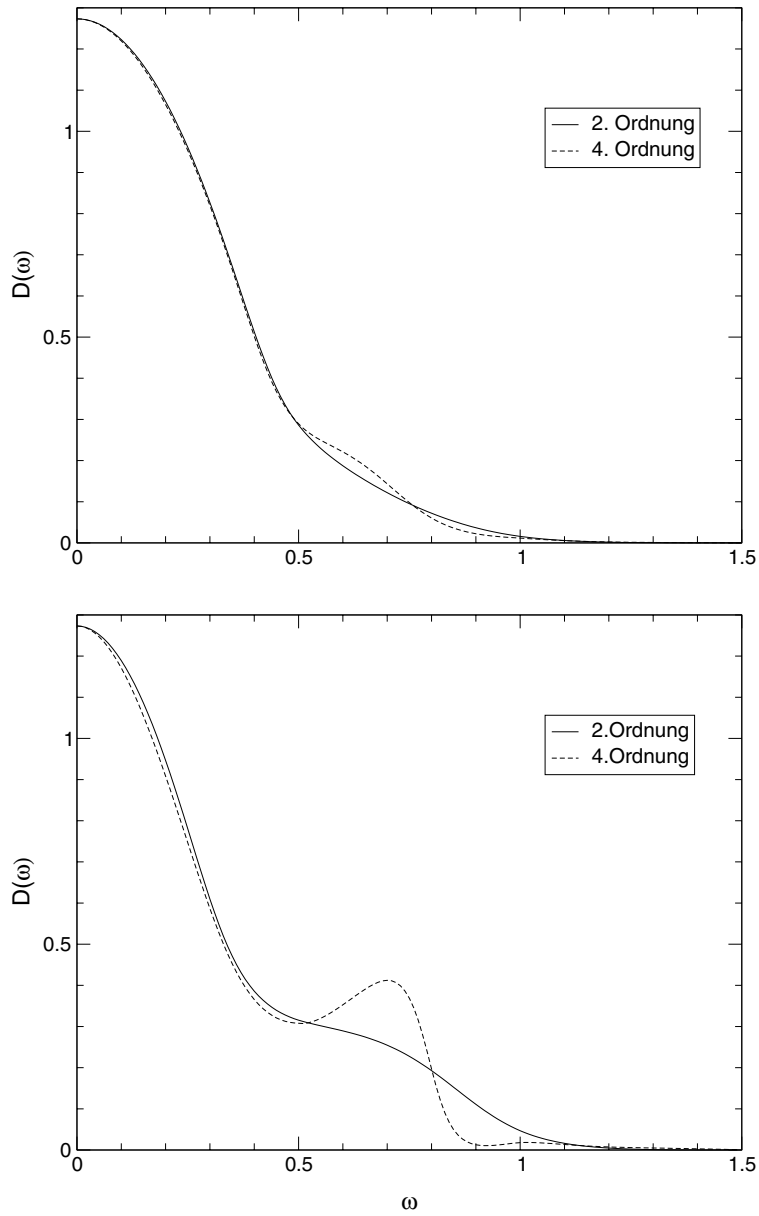


Abbildung 3.4 Wechselwirkende Zustandsdichten in zweiter (durchgezogene Linie) und vierter Ordnung (gestrichelte Linie) für $U = 0.4W$ und $U = 0.6W$ mit $W = 1$.

werden. Dazu muß man zunächst die Greenfunktion und Zustandsdichte genauer betrachten. Nach Gleichung (2.31) kann man für die impulsunabhängige Greenfunktion folgern

$$G_{\sigma}(t) = -i \left[\frac{1}{L} \sum_{\mathbf{1}} \left(\theta(t) \langle \hat{c}_{\mathbf{1}\sigma} e^{-i(\hat{H}-E_0)t} \hat{c}_{\mathbf{1}\sigma}^+ \rangle - \theta(-t) \langle \hat{c}_{\mathbf{1}\sigma}^+ e^{i(\hat{H}-E_0)t} \hat{c}_{\mathbf{1}\sigma} \rangle \right) \right]. \quad (3.90)$$

Über die Fouriertransformierte und die Theta-Funktion,

$$G_{\sigma}(\omega) = \int dt e^{i\omega t} G_{\sigma}(t), \quad (3.91)$$

$$\theta(t) = i \int \frac{dx}{2\pi} \frac{e^{ixt}}{x + i\delta}, \quad (3.92)$$

sowie die Dirac-Identitäten (2.74) erhält man für die wechselwirkende Zustandsdichte

$$D_{\sigma}(\omega) = -\text{sgn}(\omega) \left[-\frac{1}{L} \sum_{\mathbf{1}} \langle \hat{c}_{\mathbf{1}\sigma} \delta(\omega - (\hat{H} - E_0)) \hat{c}_{\mathbf{1}\sigma}^+ \rangle + \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{1}} \langle \hat{c}_{\mathbf{1}\sigma}^+ \delta(\omega + (\hat{H} - E_0)) \hat{c}_{\mathbf{1}\sigma} \rangle \right]. \quad (3.93)$$

Eingesetzt in Gleichung (2.89) berechnet sich das erste Moment als

$$M_1 = \frac{1}{L} \sum_{\sigma\mathbf{1}} \langle \hat{c}_{\mathbf{1}\sigma}^+ (\hat{H} - E_0) \hat{c}_{\mathbf{1}\sigma} \rangle = \frac{1}{L} \sum_{\sigma\mathbf{1}} \langle \hat{c}_{\mathbf{1}\sigma}^+ [\hat{H}, \hat{c}_{\mathbf{1}\sigma}]_- \rangle \quad (3.94)$$

$$= - \left(\frac{\langle \hat{T} \rangle}{L} + \frac{2U}{L} \langle \hat{D} \rangle - \frac{U}{2} \right) = - \left(\frac{E_0}{L} + \frac{U}{L} \frac{\partial E_0}{\partial U} \right). \quad (3.95)$$

Will man die Grundzustandsenergie bis zur vierten Ordnung bestimmen,

$$\frac{E_0}{L} = t + \alpha U^2 + \beta U^4 + \mathcal{O}(U^6), \quad (3.96)$$

kommt man über das erste Moment an den noch unbekanntten Vorfaktor β heran, denn nach Gleichung (3.95) gilt

$$M_1^{(4)} = -t - 3\alpha U^2 - 5\beta U^4 + \mathcal{O}(U^6). \quad (3.97)$$

Mit Hilfe der berechneten Selbstenergie $\Sigma^{(2+4)}(\omega)$ wiederum kann $M_1^{(4)}(U)$ bestimmt werden, indem man in die Gleichung (2.89) einsetzt,

$$M_1^{(4)}(U) = 2 \int_0^{\infty} d\omega \omega D_{\sigma}^{(4)}(\omega; U) \quad (3.98)$$

$$= -\frac{16}{\pi} \int_0^{5/2} d\omega \omega \operatorname{Im} \left[\omega - \Sigma^{(2+4)}(\omega; U) - \sqrt{[\omega - \Sigma^{(2+4)}(\omega; U)]^2 - \frac{1}{4}} \right]. \quad (3.99)$$

Ein großes Problem dieses indirekten Ansatzes ist die Tatsache, daß man die Zustandsdichte nicht als klare Entwicklung in U vorliegen hat, sondern immer auch höhere Ordnungen vorhanden sind. Das gleiche gilt damit natürlich auch für $M_1(U)$. Um einen möglichst sauberen Vierten-Ordnungsbeitrag zu erhalten, wird zur Bestimmung des Parameters β der Zweite-Ordnungsbeitrag abgezogen.

$$\Delta M_1^{(4)}(U) = -\frac{16}{\pi} \int_0^{5/2} d\omega \omega \operatorname{Im} \left[\omega - \Sigma^{(2+4)}(\omega; U) - \sqrt{[\omega - \Sigma^{(2+4)}(\omega; U)]^2 - \frac{1}{4}} \right. \\ \left. - \left(\omega - \Sigma^{(2)}(\omega; U) - \sqrt{[\omega - \Sigma^{(2)}(\omega; U)]^2 - \frac{1}{4}} \right) \right]. \quad (3.100)$$

Um eine Abschätzung für die Genauigkeit zu erhalten, die diese Methode mit sich bringt, wird auf analogem Wege der Vorfaktor α nochmals bestimmt und mit dem hochgenauen Wert (3.33) verglichen. Man erhält das α mit einer absoluten Genauigkeit von $\mathcal{O}(10^{-5})$, wenn man für

$$\Delta M_1^{(2)}(U) = -\frac{16}{\pi} \int_0^{3/2} d\omega \omega \operatorname{Im} \left[\omega - \Sigma^{(2)}(\omega; U) - \sqrt{[\omega - \Sigma^{(2)}(\omega; U)]^2 - \frac{1}{4}} \right. \\ \left. - \left(\omega - \sqrt{\omega^2 - \frac{1}{4}} \right) \right]. \quad (3.101)$$

einen Fit der folgenden Form durchführt,

$$\Delta M_1^{(2)}(U) = a_0 U^2 + a_1 U^4 = (0.2504 \pm 3 \cdot 10^{-5}) U^2 + \mathcal{O}(10^{-2}) U^4. \quad (3.102)$$

Damit ergibt sich für den Vorfaktor

$$\alpha = -\frac{a_0}{3} = 0.08346 \pm 10^{-5}. \quad (3.103)$$

Ein Fit der resultierenden Kurve aus Gleichung (3.100)

$$\Delta M_1^{(4)}(U) = b_0 U^4 + b_1 U^6 = (0.031 \pm 10^{-3}) U^4 + \mathcal{O}(10^{-2}) U^4 \quad (3.104)$$

ergibt für den Parameter β

$$\beta = -\frac{b_0}{5} = -0.0062 \pm 2 \cdot 10^{-4}. \quad (3.105)$$

Die mittlere Doppelbesetzung läßt sich aus den vorhergegangenen Rechnungen relativ einfach bestimmen. Aus dem Zusammenhang

$$\bar{d}(U) \equiv \frac{1}{4} + \frac{\langle \hat{D} \rangle}{L} = \frac{1}{4} + \frac{1}{L} \frac{\partial E_0}{\partial U} \quad (3.106)$$

erhält man das Vierte-Ordnungsergebnis

$$\bar{d}(U) = \frac{1}{4} + 2\alpha U + 4\beta U^3 + \mathcal{O}(U^5) \quad (3.107)$$

$$= 0.25 - (0.16692 \pm 2 \cdot 10^{-5}) U - (0.0248 \pm 8 \cdot 10^{-4}) U^3 + \mathcal{O}(U^5). \quad (3.108)$$

Da die mittlere Doppelbesetzung positiv definit ist, liefert dies ein Kriterium, daß die Anwendbarkeit von (3.108) auf $U \leq (1.12 \pm 10^{-2}) W$ begrenzt. Aus dem Vergleich mit der störungstechnisch ermittelten Grundzustandsenergie des Mott-Hubbard-Isolators bis zur dritten Ordnung in $1/U$ bei halber Bandfüllung [23]

$$\frac{E_0}{L} = -\frac{U}{4} - \frac{1}{32U} - \frac{1}{512U^2} + \mathcal{O}(U^{-5}), \quad (3.109)$$

bzw. mit der entsprechenden mittleren Doppelbesetzung

$$\bar{d}(U) = \frac{1}{32U^2} + \frac{3}{512U^4} + \mathcal{O}(U^{-6}) \quad (3.110)$$

ergibt sich eine noch strengere Bedingung. Die beiden Kurven für die mittlere Doppelbesetzung (3.108) und (3.110) kreuzen sich bei einer Wechselwirkungsstärke $U_{\text{cross}} = 1.056 W$. Spätestens dann hört die Anwendbarkeit der Entwicklung für schwache Kopplung auf. Es ist bemerkenswert, daß die Schätzung für die Öffnung der Lücke aus [23] bei $U_{c,1} = (1.105 \pm 10^{-2})$ liegt. Die Tatsache, daß beide Werte so gut wie übereinstimmen, könnte ein Indiz dafür sein, daß der Mott-Hubbard-Übergang in der Tat kontinuierlich bei $U_{c,1} = U_c$ ohne Unstetigkeit in \bar{d} stattfindet.

Die Kurven der Grundzustandsenergien haben im Bereich $U \approx W$ keinen Schnittpunkt. Im obigen Fall findet man eine minimale Energiedifferenz bei U_{cross} mit

$$E_0^{\text{Iso}}(U_{\text{cross}}) - E_0^{\text{Met}}(U_{\text{cross}}) = (0.018 \pm 10^{-3}) W. \quad (3.111)$$

4 Vergleich mit anderen Methoden

Dieses Kapitel beginnt mit einer Darstellung des Single-Impurity Anderson-Modells (SIAM), einem effektiven Einplatz-Modell, das in $d = \infty$ äquivalent zum Hubbard-Modell wird. Das bedeutet, daß die selbstkonsistent ermittelte Greenfunktion des SIAM das Hubbard-Modell im Limes hoher Dimensionen beschreibt. Es folgt eine Einführung verschiedener numerischer und analytischer Näherungsmethoden, die auf dem SIAM basieren. Deren Ergebnisse werden mit den Resultaten der U -Störungstheorie in vierter Ordnung verglichen. Im letzten Abschnitt wird eine weitere Methode, die Random Dispersion-Approximation (RDA), vorgestellt, die völlig unabhängig vom SIAM und der Störungsentwicklung ist.

4.1 Single-Impurity Anderson-Modell (SIAM)

Im Limes hoher Gitterdimensionen und unter den Bedingungen der Translationsinvarianz sowie Konvergenz der Störungsentwicklung in starker und schwacher Kopplung gibt es einen engen Zusammenhang zwischen dem Hubbard-Modell und Modellen mit einer Hubbard-Wechselwirkung U , die sich nur auf einen Gitterplatz beschränkt. Diese Modelle weisen ebenfalls eine Selbstenergie auf, die nur von einem Gitterplatz abhängt. Aus diesem Grund kann man ein effektives *Einplatz-Modell* konstruieren, auf das man das unendlichdimensionale Hubbard-Modell abbilden kann, so daß die vollen Greenfunktionen und Selbstenergien beider Modelle übereinstimmen (*Dynamische Molekular-Feld-Theorie, DMFT*). Im Gegensatz zu den Spin-Modellen erhält man jedoch kein statisches sondern ein dynamisches, das heißt, frequenzabhängiges Molekularfeld, wodurch eine vollständige analytische Lösung der DMFT verhindert wird.

Die Grundidee der DMFT ist folgende: Alle Modelle mit einer Hubbard-Wechselwirkung U am Gitterplatz **I** haben eine identische Entwicklung in Skelettdiagramme, insbesondere sind die Skelettdiagramme des Hubbard-Modells identisch zu denen des Einplatz-Modells

$$\hat{H}^{\text{1-Platz}} = \hat{H}_0^{\text{1-Platz}} + U \hat{n}_{\uparrow} \hat{n}_{\downarrow} , \quad (4.1)$$

wo $\hat{H}_0^{\text{1-Platz}}$ ein Einteilchenproblem beschreibt. Man muß also nur noch das identische Fleisch einfügen, um äquivalente vollständige Selbstenergien zu erzielen.

Daraus lassen sich zwei Selbstkonsistenzbedingungen für das Einplatz-Modell gewinnen, mit denen man das Einplatz-Modell in $d = \infty$ exakt auf das Hubbard-Modell abbilden kann.

- (1) Die vollen Greenfunktionen beider Modelle müssen übereinstimmen,

$$G_{\mathbf{lm}}^{1\text{-Platz}}(\omega) = G_{\mathbf{lm}}(\omega) . \quad (4.2)$$

- (2) Die vollständigen Selbstenergien müssen auch übereinstimmen,

$$\Sigma_{\mathbf{ll}}^{1\text{-Platz}}(\omega) = \Sigma_{\mathbf{ll}}(\omega) . \quad (4.3)$$

Es gibt eine ganze Reihe von Molekular-Feld-Modellen, die auf dieser Grundidee basieren [7, 34, 35]. Eine Realisation ist das effektive *Single-Impurity Anderson-Modell* (SIAM)

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{And}} = & \sum_{\sigma} \int d\epsilon \epsilon \hat{\psi}_{\sigma}^{+}(\epsilon) \hat{\psi}_{\sigma}(\epsilon) + U \left(\hat{d}_{\uparrow}^{+} \hat{d}_{\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{d}_{\downarrow}^{+} \hat{d}_{\downarrow} - \frac{1}{2} \right) \\ & + \sum_{\sigma} \int d\epsilon \sqrt{D_{\sigma}^0(\epsilon)} V(\epsilon) \left(\hat{\psi}_{\sigma}^{+}(\epsilon) \hat{d}_{\sigma} + \hat{d}_{\sigma}^{+} \hat{\psi}_{\sigma}(\epsilon) \right) , \end{aligned} \quad (4.4)$$

das eine Hybridisierung von nichtwechselwirkenden Badelektronen $\hat{\psi}_{\sigma}(\epsilon)$ und Elektronen der Verunreinigung \hat{d}_{σ} beschreibt. Dabei ist

$$\Delta(\epsilon) = \pi D_{\sigma}^0(\epsilon) V(\epsilon)^2 \quad (4.5)$$

die Stärke der Hybridisierung. Die freie Bad-Greenfunktion ($U = 0$) ist gegeben durch die Hybridisierungsfunktion $\mathcal{H}(\omega)$

$$G_{\sigma, \text{And}}^0(\omega) = [\omega - \mathcal{H}(\omega)]^{-1} , \quad \text{wobei} \quad (4.6)$$

$$\mathcal{H}(\omega) \equiv \int \frac{d\epsilon}{\pi} \frac{\Delta(\epsilon)}{\omega - \epsilon} . \quad (4.7)$$

Ein endlicher Wert für $\Delta(\epsilon)$ führt zu einer endlichen Zustandsdichte an der Fermi-Energie. Dann existieren Landau-Quasiteilchen und das System befindet sich in der metallischen Phase. Verschwindet die effektive Hybridisierung, so entkoppeln die Badelektronen und die Elektronen der Verunreinigung und eine isolierende Phase wird beschrieben.

Um die Diskussion zu erleichtern, wird hier von translationsinvarianten Systemen ausgegangen. Die Selbstkonsistenzbedingungen

$$G_{\sigma, \text{And}}(\omega) = G_{\sigma}(\omega) , \quad (4.8)$$

$$\Sigma_{\sigma, \text{And}}(\omega) = \Sigma_{\sigma}(\omega) \quad (4.9)$$

legen die freie Greenfunktion $G_{\sigma, \text{And}}^0(\omega)$ fest,

$$\left[G_{\sigma, \text{And}}^0(\omega) \right]^{-1} = \left[G_{\sigma, \text{And}}(\omega) \right]^{-1} + \Sigma_{\sigma, \text{And}}(\omega) . \quad (4.10)$$

Der Selbstkonsistenzzyklus beginnt mit der Wahl der Hybridisierungsstärke $\Delta(\epsilon)$ bzw. der einfachen Greenfunktion $G_{\sigma, \text{And}}^{0, \text{B}}(\omega)$ (B=Beginn). Danach muß \hat{H}_{And} für $G_{\sigma, \text{And}}^{\text{B}}(\omega)$ gelöst werden, wozu man bis heute analytisch nicht in der Lage ist. Die Selbstkonsistenzbedingungen werden innerhalb der Dyson-Gleichungen für das Hubbard-Modell umgesetzt. Man setzt

$$\Sigma_{\sigma, \text{And}}^{\text{B}}(\omega) = \left[G_{\sigma, \text{And}}^{0, \text{B}}(\omega) \right]^{-1} - \left[G_{\sigma, \text{And}}^{\text{B}}(\omega) \right]^{-1} \quad (4.11)$$

und fordert

$$\Sigma_{\sigma}(\omega) = \Sigma_{\sigma, \text{And}}^{\text{B}}(\omega) . \quad (4.12)$$

Dann berechnet man

$$G_{\sigma}(\omega) = \int d\epsilon \frac{D_{\sigma}^0(\epsilon)}{\omega - \epsilon - \Sigma_{\sigma}(\omega)} \quad (4.13)$$

aus der Dyson-Gleichung und setzt

$$G_{\sigma, \text{And}}^{\text{E}}(\omega) = G_{\sigma}(\omega) \quad (\text{E=Ende}), \quad (4.14)$$

$$\left[G_{\sigma, \text{And}}^{0, \text{E}}(\omega) \right]^{-1} = \left[G_{\sigma}(\omega) \right]^{-1} + \left[\Sigma_{\sigma}(\omega) \right]^{-1} . \quad (4.15)$$

Stimmen $G_{\sigma, \text{And}}^{0, \text{E}}(\omega)$ und $G_{\sigma, \text{And}}^{0, \text{B}}(\omega)$ nicht miteinander überein, muß ein neuer Zyklus gestartet werden. Hat man Selbstkonsistenz erreicht, beschreibt die Greenfunktion des Verunreinigungsproblems das Hubbard-Modell im Limes hoher Dimensionen. Auf dem Bethe-Gitter ist ein expliziter Ausdruck für die einfache Greenfunktion bekannt, vgl. Gleichung (2.77) diesmal mit $t = W/4 = 1$,

$$G_{\sigma}^0(z) = \frac{1}{2} \left[z - \sqrt{z^2 - 4} \right] . \quad (4.16)$$

Setzt man $z = \omega - \Sigma_{\sigma}(\omega)$, erhält man mit Gleichung (2.80) folgenden Ausdruck

$$\omega - \Sigma_{\sigma}(\omega) = G_{\sigma}(\omega) + \left[G_{\sigma}(\omega) \right]^{-1} . \quad (4.17)$$

Andererseits folgt aus (4.6) und (4.10)

$$\omega - \Sigma_{\sigma}(\omega) = \mathcal{H}(\omega) + \left[G_{\sigma}(\omega) \right]^{-1} , \quad (4.18)$$

so daß man im Falle eines Bethe-Gitters auf den einfachen Zusammenhang

$$\mathcal{H}(\omega) = G_\sigma(\omega) \quad (4.19)$$

zwischen Greenfunktion und Hybridisierungsfunktion kommt [7]. Da das kontinuierliche SIAM nicht analytisch exakt gelöst werden kann, müssen Approximationen vorgenommen werden, um die Selbstkonsistenzschleife zu schließen. Für eine approximative Behandlung sind verschiedene mögliche Implementierungen denkbar. In den folgenden Unterkapiteln werden drei numerische Methoden, die *Fixed-Energy Exact Diagonalization* (FE-ED), die *Dynamical Density-Matrix Renormalization Group* (DDMRG) und die *Numerische Renormierungsgruppe* (NRG), sowie eine analytische Methode, die *Iterierte Störungstheorie* (IPT) kurz erläutert. Die Ergebnisse dieser Methoden werden mit denen der U -Störungstheorie verglichen.

4.1.1 Fixed-Energy Exakte Diagonalisierung (FE-ED)

Aus den verschiedenen denkbaren Implementationen für eine approximative Behandlung wählt die FE-ED [23] als Realisation das diskretisierte Single-Impurity Anderson-Modell in „Stern-Geometrie“,

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{SIAM}}^* = & \sum_{\sigma} \sum_{l=1}^{n_s-1} \epsilon_l \hat{\psi}_{\sigma,l}^+ \hat{\psi}_{\sigma,l} + U \left(\hat{d}_1^+ \hat{d}_1 - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{d}_1^+ \hat{d}_1 - \frac{1}{2} \right) \\ & + \sum_{\sigma} \sum_{l=1}^{n_s-1} V_l \left(\hat{\psi}_{\sigma,l}^+ \hat{d}_\sigma + \hat{d}_\sigma^+ \hat{\psi}_{\sigma,l} \right). \end{aligned} \quad (4.20)$$

Dabei sind V_l reelle, positive Hybridisierungsmatrix-Elemente. Die Hybridisierung findet analog zum kontinuierlichen SIAM zwischen dem Gitterplatz der Verunreinigung und den $(n_s - 1)$ Bad-Gitterplätzen mit den Energien $\epsilon_1 < \epsilon_2 < \dots < \epsilon_{n_s-1}$ statt. Wie bei (4.4) erfahren die Elektronen die Wechselwirkung U nur auf dem Gitterplatz der Verunreinigung. Um Teilchen-Loch-Symmetrie zu gewährleisten, muß $\epsilon_{n_s-l} = -\epsilon_l$ und $V_{n_s-l} = V_l$ mit $l = 1, \dots, n_s - 1$ gelten. Bei geradem n_s existiert ein Bad-Zustand bei $\epsilon = 0$.

Für ein gegebenes Set an Parametern (ϵ_l, V_l) wird die zum Modell (4.20) gehörige Einteilchen-Greenfunktion

$$G_\sigma^{(n_s)}(t) = -i \langle T[\hat{d}_\sigma(t) \hat{d}_\sigma^+] \rangle_{\text{SIAM}^*} \quad (4.21)$$

in der FE-ED mit Hilfe der (dynamischen) Lanczos-Technik numerisch berechnet. Man geht davon aus, daß die Hybridisierungsfunktion

$$\mathcal{H}^{(n_s)}(\omega) = \sum_{l=1}^{n_s-1} \frac{V_l^2}{\omega - \epsilon_l + i\eta \operatorname{sgn}(\omega)} \quad (4.22)$$

im Limes $n_s \rightarrow \infty$ äquivalent zur Hybridisierungsfunktion des kontinuierlichen Problems (4.4) wird,

$$\mathcal{H}(\omega) = \lim_{n_s \rightarrow \infty} \mathcal{H}^{(n_s)}(\omega) . \quad (4.23)$$

Dementsprechend sollte die Greenfunktion konvergieren

$$G_\sigma(t) = \lim_{n_s \rightarrow \infty} G_\sigma^{(n_s)}(t) . \quad (4.24)$$

Im kontinuierlichen Fall schließt sich auf dem Bethe-Gitter mit der einfachen Relation (4.19) die Selbstkonsistenzschleife. Die Parameter (ϵ_l, V_l) müssen so gewählt werden, daß die Einteilchen-Greenfunktion und die Hybridisierungsfunktion Gleichung (4.19) erfüllen.

Jedes numerische Schema zur Lösung der DMFT hat mit zwei grundlegenden Problemen zu kämpfen. Erstens benötigt die DMFT die Greenfunktion $G_\sigma(\omega)$ auf der gesamten kontinuierlichen Frequenzachse. Aber es stehen nur Informationen für endlich viele, diskrete Energien ϵ_l zur Verfügung. Im Gegensatz zu numerischen Standardproblemen in der Vielteilchentheorie ist bei numerischen DMFT-Rechnungen nicht von vornherein klar, wie die Observablen als Funktion von $1/n_s$ skalieren. Obendrein ist für festes n_s die selbstkonsistente Lösung nicht unbedingt eindeutig. Es kann auch mehr als ein selbstkonsistentes Set (ϵ_l, V_l) geben.

Zweitens gilt die Selbstkonsistenzbedingung (4.19) nur für kontinuierliche $\mathcal{H}(\omega)$ und $G_\sigma(\omega)$, nicht für deren diskretisierte Gegenstücke. Dadurch kann man nicht garantieren, daß die verschiedenen numerischen Schemata letztendlich zu einer gemeinsamen Lösung für $n_s \rightarrow \infty$ führen, zumal die Skalierung unklar ist.

Die FE-ED bietet folgendes Verfahren zur Lösung dieser Probleme an. Im metallischen Zustand kann man von einer Zustandsdichte ausgehen, die symmetrisch um $\omega = 0$ ist und sich auf das Frequenzintervall

$$|\omega| \leq \frac{W^*}{2} \quad (4.25)$$

mit einer effektiven Bandbreite W^* beschränkt. Es muß also ein endliches Frequenzintervall aufgelöst werden. Dabei sollte W^* so groß wie nötig und so klein wie möglich gewählt werden, so daß man sich sicher sein kann, kein signifikantes spektrales Gewicht für $|\omega| > W^*/2$ zu haben. Für die FE-ED nimmt man $W^* = 9t$, was für $U \leq W$ ausreicht, um die wesentlichen Strukturen der Zustandsdichte wie Quasiteilchengewicht und Hubbard-Bänder zu erfassen. Ein grundlegendes Prinzip der FE-ED ist die Einteilung der effektiven Bandbreite in äquidistante Intervalle der Breite $\delta W = W^*/(n_s - 1)$,

$$I_l = \left[-\frac{W^*}{2} + (l-1)\delta W, -\frac{W^*}{2} + l\delta W \right] \quad \text{mit} \quad 1 \leq l \leq n_s - 1, \quad (4.26)$$

sowie die Fixierung der Energieniveaus in der Mitte der Intervalle I_l ,

$$\epsilon_l = -\frac{W^*}{2} + \frac{l-1}{2} \delta W \quad \text{mit } 1 \leq l \leq n_s - 1. \quad (4.27)$$

So kann man sich bei der FE-ED sicher sein, daß die Auflösung systematisch als Funktion von $1/n_s$ wächst, was bei der Caffarel-Krauth Implementierung der Exakten Diagonalisierung [7, 11, 13, 18, 19] nicht garantiert ist.

In der FE-ED verwendet man im Diagonalisierungsschema $n_s \leq 15$. Behält man in der Lanczos-Diagonalisierung $n_L \approx 100$ Zustände bei, weist der Imaginärteil der Greenfunktion $\text{Im } G_\sigma^{(n_s)}(\omega_r)$ ($r = 1, \dots, n_L$) n_L Peaks auf, die mit einer konstanten Verbreiterung δW versehen werden. Indem man

$$w_l = \int_{I_L} d\omega \sum_{r=1}^{n_L} \text{Im } G_\sigma^{(n_s)}(\omega_r) \frac{\theta(\omega - \omega_r + \delta W/2) - \theta(\omega - \omega_r - \delta W/2)}{\delta W} \quad (4.28)$$

setzt, wird das in jedem Intervall gesammelte spektrale Gewicht $w_l = V_l^2$ zugewiesen.

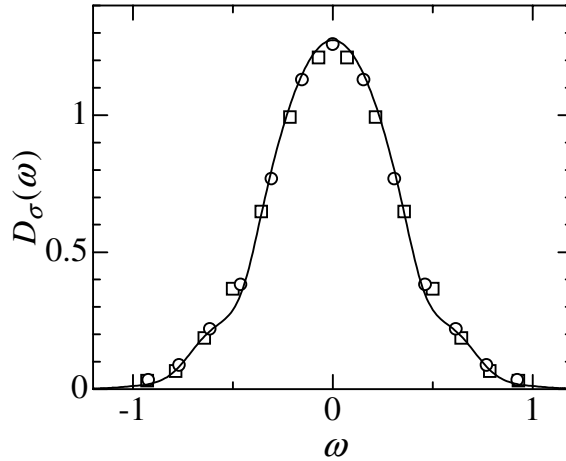


Abbildung 4.1 Die Hybridisierungsfunktion $\mathcal{H}^{(n_s)}(\omega)$ für $n_s = 14$ (Kreise) und $n_s = 15$ (Quadrate) wird mit der Zustandsdichte aus der Störungstheorie bis zur vierten Ordnung (durchgezogene Linie) für $U = 0.4 W$ verglichen, siehe [47].

Als geeigneten Input verwendet man die Resultate der Störungstheorie in vierter Ordnung für schwache Wechselwirkung. Die Abbildung (4.1) zeigt die Ergebnisse der FE-ED-Zustandsdichte für $n_s = 14$ und $n_s = 15$ sowie $U = 0.4 W = 1.6 t$ im Vergleich zu den perturbativen Resultaten in vierter Ordnung. Wie man sieht, ist die Übereinstimmung nahezu perfekt.

Es muß betont werden, daß das Ergebnis der FE-ED nicht vom Input abhängt, da die Wahl verschiedener Startkonfigurationen für gegebenes n_s immer zur selben selbstkonsistenten Lösung führt. Diese Stabilität wird durch die Fixierung der Energien ϵ_l erreicht. Es ist demnach legitim, aus Abbildung (4.1) zu schließen, daß sich beide Methoden für schwache Kopplung gegenseitig bestätigen.

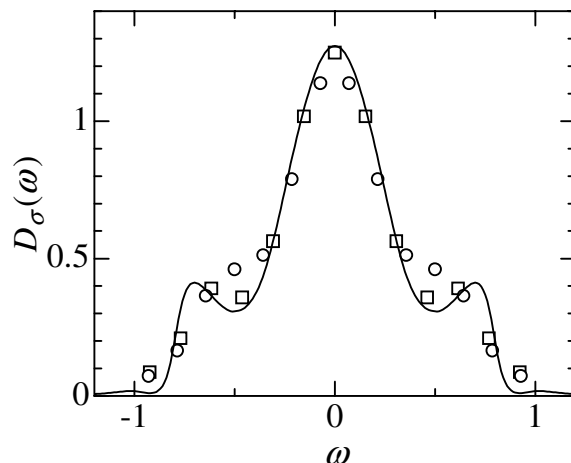


Abbildung 4.2 Die Hybridisierungsfunktion $\mathcal{H}^{(n_s)}(\omega)$ für $n_s = 14$ (Kreise) und $n_s = 15$ (Quadrate) im Vergleich mit der Zustandsdichte aus der Störungstheorie bis zur vierten Ordnung (durchgezogene Linie) für $U = 0.6W$ [47].

In Abbildung (4.2) sind die entsprechenden Zustandsdichten für $U = 0.6W$ zu sehen, wo man die ersten Abweichungen beobachten kann. Leider ist die Auflösung noch so begrenzt, daß man nicht sagen kann, ob die Abweichung in $D_\sigma(\omega)$ zwischen den beiden Methoden bei $\omega \approx 0.5W$ aufgrund von Finite-Size-Effekten oder fehlenden Termen der sechsten Ordnung zustande kommt. Die Systemgröße n_s ist jedoch aufgrund des großen Speicherbedarfs (3 GByte RAM für $n_s = 15$), die das Lanczos-Diagonalisierungsverfahren mit sich bringt, nach oben beschränkt.

Auf der anderen Seite hat die FE-ED gegenüber anderen Methoden zur Lösung der DMFT zwei große Vorteile. Es gibt keine Unklarheiten über das Skalierungsverhalten als Funktion der Systemgröße n_s und man ist sich der Stabilität der selbstkonsistenten Lösung sicher. Vor kurzem ist eine neue Methode, die Dynamische Dichte-Matrix Renormierungsgruppe (DDMRG) entwickelt worden, die die Vorteile der FE-ED beibehält und eine mindestens um das Vierfache verbesserte Auflösung bietet. Diese Methode und ihre Ergebnisse werden im folgenden Unterkapitel präsentiert.

4.1.2 Dynamische Dichte-Matrix-Renormierungsgruppe (DDMRG)

Die DDMRG ist sowohl eine Verbesserung der FE-ED als auch eine Erweiterung der hocheffizienten *Dichte-Matrix-Renormierungsgruppe* (DMRG), einer numerischen Methode, die das Energie-Funktional

$$E(|\Psi\rangle) = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \quad (4.29)$$

im Unterraum der normierten Zustände $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ variationell minimiert. Bei jedem Renormierungsschritt behält man m Dichte-Matrix-Eigenzustände, um eine variationelle Basis der Dimension $\sim m^2$ aufzubauen. Für (effektive) eindimensionale Systeme liefert die DDMRG eine hochgenaue Schätzung für Grundzustandseigenschaften von einhundert und mehr wechselwirkenden Elektronen auf einer Kette von Gitterplätzen. Für genauere Ausführungen siehe [43]. Dieses Konzept wird in der DDMRG auf die Minimierung frequenzabhängiger Funktionale verallgemeinert, die im Falle der lokalen Greenfunktion und positiver Frequenzen die Form haben,

$$\begin{aligned} W_\eta(|\Psi\rangle; \omega) = & \langle \Psi | (E_0 + \omega - \hat{H})^2 + \eta^2 | \Psi \rangle \\ & + \eta \langle \Psi_0 | \hat{c}_{m,\sigma} | \Psi \rangle + \eta \langle \Psi | \hat{c}_{m,\sigma}^+ | \Psi_0 \rangle . \end{aligned} \quad (4.30)$$

Analog zur FE-ED wählt man zur Auflösung der effektiven Bandbreite äquidistante Energieintervalle I_l , in deren Mitte man die Energieniveaus ϵ_l fixiert. Auch hier kann man sich somit sicher sein, daß die Auflösung der Zustandsdichte sich erhöht, wenn man n_s vergrößert. Im nächsten Schritt wird das diskretisierte SIAM (4.20) mittels eines Tridiagonalisierungsverfahrens auf eine halbinendliche Kette abgebildet, da die DMRG nur auf eindimensionalen Ketten arbeitet. Dieses Verfahren liefert die Hüpf-Matrix-Elemente \tilde{t}_n und die Hybridisierung V zwischen der Verunreinigung und dem Gitterplatz c_0 ,

$$\bullet \overset{d}{\underset{\cdot}{\circ}} \xrightarrow{V} \overset{\circ}{\underset{\cdot}{\circ}}_0 \xrightarrow{\tilde{t}_0} \overset{\circ}{\underset{\cdot}{\circ}}_1 \xrightarrow{\tilde{t}_1} \overset{\circ}{\underset{\cdot}{\circ}}_2 \xrightarrow{\tilde{t}_2} \overset{\circ}{\underset{\cdot}{\circ}}_3 \dots$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{SIAM}} = & \sum_{\sigma} \sum_{n=0}^{n_s-2} \tilde{t}_n (\hat{c}_{n,\sigma}^+ \hat{c}_{n+1,\sigma} + \hat{c}_{n+1,\sigma}^+ \hat{c}_{n,\sigma}) + U \left(\hat{d}_\uparrow^+ \hat{d}_\uparrow - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{d}_\uparrow^+ \hat{d}_\uparrow - \frac{1}{2} \right) \\ & + V \sum_{\sigma} (\hat{c}_{0,\sigma}^+ \hat{d}_\sigma + \hat{d}_\sigma^+ \hat{c}_{0,\sigma}) . \end{aligned} \quad (4.31)$$

Für einen einzelnen DDMRG-Durchlauf wird eine bestimmte Frequenz ω_j ausgewählt und festgehalten. Auch hier wählt man eine äquidistante Rasterung der

effektiven Bandbreite W^* mit

$$\omega_{j+1} - \omega_j = \delta\omega = \frac{\delta W}{2} = \frac{W^*}{2(n_s - 1)}. \quad (4.32)$$

Das optimale Funktional ist stationär bezüglich Variationen in $|\Psi\rangle$ und lautet explizit

$$\begin{aligned} W_\eta^{\text{opt}}(\omega_j) &= -\eta^2 \langle \Psi_0 | \hat{c}_{m,\sigma} \left[(E_0 + \omega_j - \hat{H})^2 + \eta^2 \right]^{-1} \hat{c}_{m,\sigma}^+ | \Psi_0 \rangle \\ &= -\eta^2 \sum_n \frac{|\langle \Psi_0 | \hat{c}_{m,\sigma} | \Psi_n \rangle|^2}{(E_0 + \omega_j - E_n)^2 + \eta^2} \end{aligned} \quad (4.33)$$

mit den exakten Eigenzuständen $|\Psi_n\rangle$ und Eigenenergien E_n . Über das optimale Funktional liefert die DDMRG im thermodynamischen Limes bis auf einen Faktor $-\pi\eta$ die exakte lokale Zustandsdichte an der Stelle ω_j für eine endliche Kette der Länge n_s , allerdings gefaltet mit einer Lorentzkurve der endlichen Breite η ,

$$D_\sigma^\eta(\omega_j) = -\frac{1}{\pi\eta} W_\eta^{\text{opt}}(\omega_j). \quad (4.34)$$

Um das Spektrum einer unendlichen Kette zu erhalten, muß η als Funktion der Systemgröße skaliert werden [44]. Wählt man η zu klein, weist die DDMRG-Zustandsdichte Finite-Size Peaks auf, und bei zu großem η wird die relevante Information verschmiert. Die Empirik hat gezeigt, daß man $\eta \approx \delta\omega$ einsetzen sollte. Damit skaliert die Auflösung mit der inversen Systemgröße. Man entfaltet die DDMRG-Daten, indem man die lineare Gleichung

$$D_\sigma^\eta(\omega_j) = \sum_{i=1}^{2(n_s-1)} \frac{\delta\omega}{\pi} D_\sigma(\omega_i) \frac{\eta}{(\omega_i - \omega_j)^2 + \eta^2} \quad (4.35)$$

löst. Im Limes $\eta \rightarrow 0$ erhalte man die Werte der exakten Zustandsdichte an der Stelle $\omega = \omega_j$. Für endliches η erhält man eine genaue Schätzung der Zustandsdichte mit Fehlern in der Größenordnung von η^2 .

Im nächsten Schritt wird das Gewicht im Intervall I_l integriert

$$w_l = \int_{I_l} d\omega D_\sigma(\omega) \quad (4.36)$$

und dieses Gewicht $w_l = V_l^2$ zugewiesen. Solange $D_\sigma(\omega)$ noch nicht konvergiert ist, muß der Selbstkonsistenzzyklus ein weiteres Mal durchlaufen werden.

Auf diesem Wege liefert die DDMRG ein Set an Werten für die Zustandsdichte, das für dasselbe n_s doppelt so dicht ist wie das Set aus der Lanczos-Diagonalisierung.

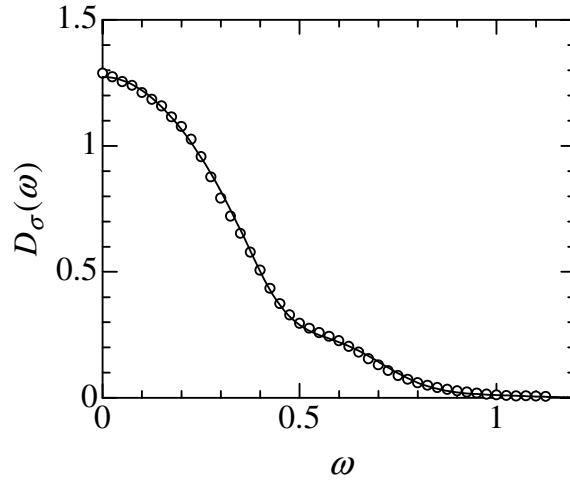


Abbildung 4.3 Die Zustandsdichte für $U = 0.4W$ aus DDMRG-Rechnungen (Kreise) auf $n_s = 32$ Gitterplätzen nach der Entfaltung im Vergleich mit der vierten Ordnung der Störungstheorie (durchgezogene Linie) [47].

Zudem kann die DDMRG bis zu $n_s = 48$ Gitterplätze verarbeiten, wobei $m = 500$ Zustände in der Renormierung beibehalten werden. Dabei fungiert lediglich die CPU-Zeit als limitierender Faktor. Mit $n_s = 32$ gewinnt die DDMRG gegenüber der FE-ED einen Faktor vier in der Auflösung. Der Hauptvorteil der Entfaltungstransformation, siehe (4.35), liegt darin, daß keine weiteren Finite-Size-Extrapolationen erforderlich sind. Die so erhaltenen Resultate konvergieren in etwa wie $(1/n_s)^2$ gegen das exakte Resultat. In [45] wird die DDMRG-Technik detaillierter beschrieben.

Wie man an Abbildung 4.3 sieht, findet man zwischen der DDMRG-Zustandsdichte und $D_\sigma^{(4)}(\omega)$ aus der Störungsrechnung eine exzellente Übereinstimmung. Damit wird die Zuverlässigkeit beider Ergebnisse bei schwacher Kopplung bestätigt. Abbildung 4.4 zeigt, daß es bei $U = 0.6W$ keine perfekte Übereinstimmung mehr gibt. Man kann aber diesmal die Abweichung eindeutig auf fehlende Terme der sechsten Ordnung zurückführen, da die hohe Auflösung der DDMRG keine Zweifel übrig läßt. Die Größe der Abweichung bei $\omega = 0.75W$ ist konsistent mit einer Korrektur der Ordnung $(0.6)^2 = 36\%$ relativ zur vierten Ordnung, die in diesem Frequenz-Bereich gegenüber der zweiten Ordnung dominiert. Die Position des Hubbard-Bandes wird durch die vierte Ordnung zwar nicht korrekt wiedergegeben, die Höhe des Bandes stimmt jedoch mit dem DDMRG-Resultat gut überein. Damit wird die Beobachtung der Störungsentwicklung bestätigt, daß die Ausbildung der Hubbard-Bänder schon bei recht kleinen Wechselwirkungsstärken, $U \approx 0.4W$, einsetzt.

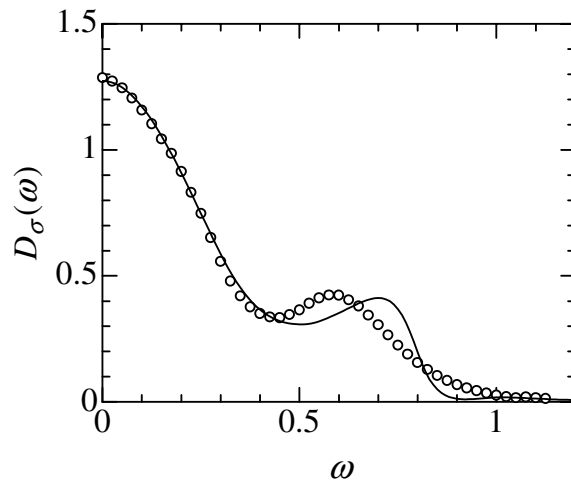


Abbildung 4.4 Die Zustandsdichte für $U = 0.6W$ aus DDMRG-Rechnungen (Kreise) auf $n_s = 32$ Gitterplätzen nach der Entfaltung im Vergleich mit der vierten Ordnung der Störungstheorie (durchgezogene Linie) [47].

4.1.3 Numerische Renormierungsgruppe (NRG)

Um das Problem des analytisch nicht exakt lösaren Single-Impurity Anderson-Modells in den Griff zu bekommen, wählt die Numerische Renormierungsgruppe [12] das folgende Vorgehen. Im ersten Schritt wird das kontinuierliche Leitungsband logarithmisch diskretisiert, indem man es in unendlich viele Intervalle $[\xi_{n+1}, \xi_n]$ und $[-\xi_n, -\xi_{n+1}]$ mit $\xi_n = (W^*/2)\Lambda^{-n}$ aufteilt. Λ ist dabei der NRG-Diskretisierungsparameter. Alle Zustände in einem dieser Energieintervalle werden durch einen einzelnen Badzustand ersetzt. Man erhält so auf Kosten einer schlechten Auflösung im Hochenergiesektor eine sehr feine Auflösung bei kleinen Energien $\omega \rightarrow 0$.

Im zweiten Schritt wird dieses diskretisierte Modell analog zur DDMRG auf eine halbunendliche Kette abgebildet, wobei hier die Hüpfmatrix-Elemente aufgrund der logarithmischen Diskretisierung exponentiell mit $\Lambda^{-n/2}$ abfallen. Die NRG-Iteration startet mit dem isolierten Verunreinigungsproblem und nimmt einen nach dem anderen Bad-Zustand hinzu. Die Zahl der Zustände wächst dabei exponentiell zur Clustergröße an, was ein Abschneideschema erzwingt. Nur die Zustände mit den niedrigsten Energien werden behalten. Man hofft, daß die Hochenergiezustände das Niederenergieverhalten nicht drastisch beeinflussen.

Die Einteilchen-Spektralfunktion (2.45) ist am Ende der NRG-Iteration als diskrete Menge an δ -Peaks gegeben, die logarithmisch verteilt sind, das heißt, für $\omega \rightarrow 0$ rücken die Peaks immer näher aneinander. Die Selbstkonsistenzschleife des SIAM

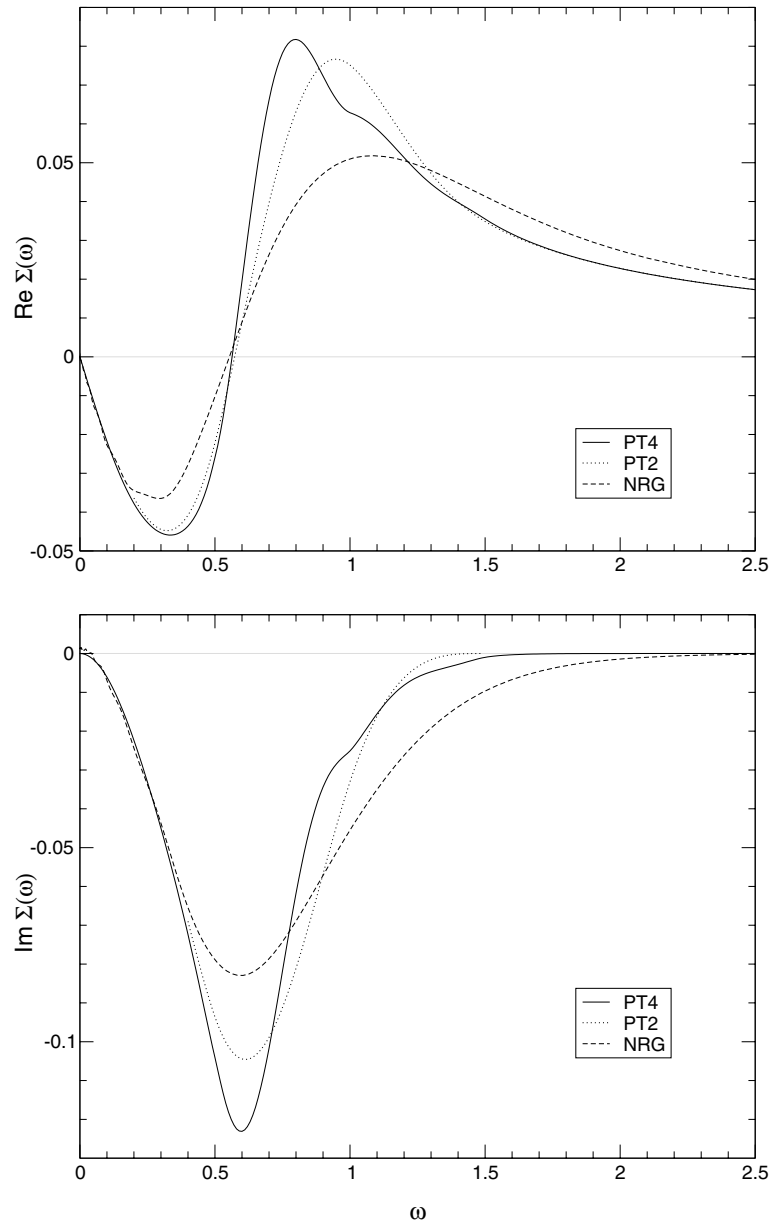


Abbildung 4.5 Real- und Imaginärteil der Selbstenergie in zweiter (gepunktete Linie) und vierter Ordnung (durchgezogene Linie) im Vergleich mit den Ergebnissen der NRG (gestrichelte Linie) für $U = 0.4 W$.

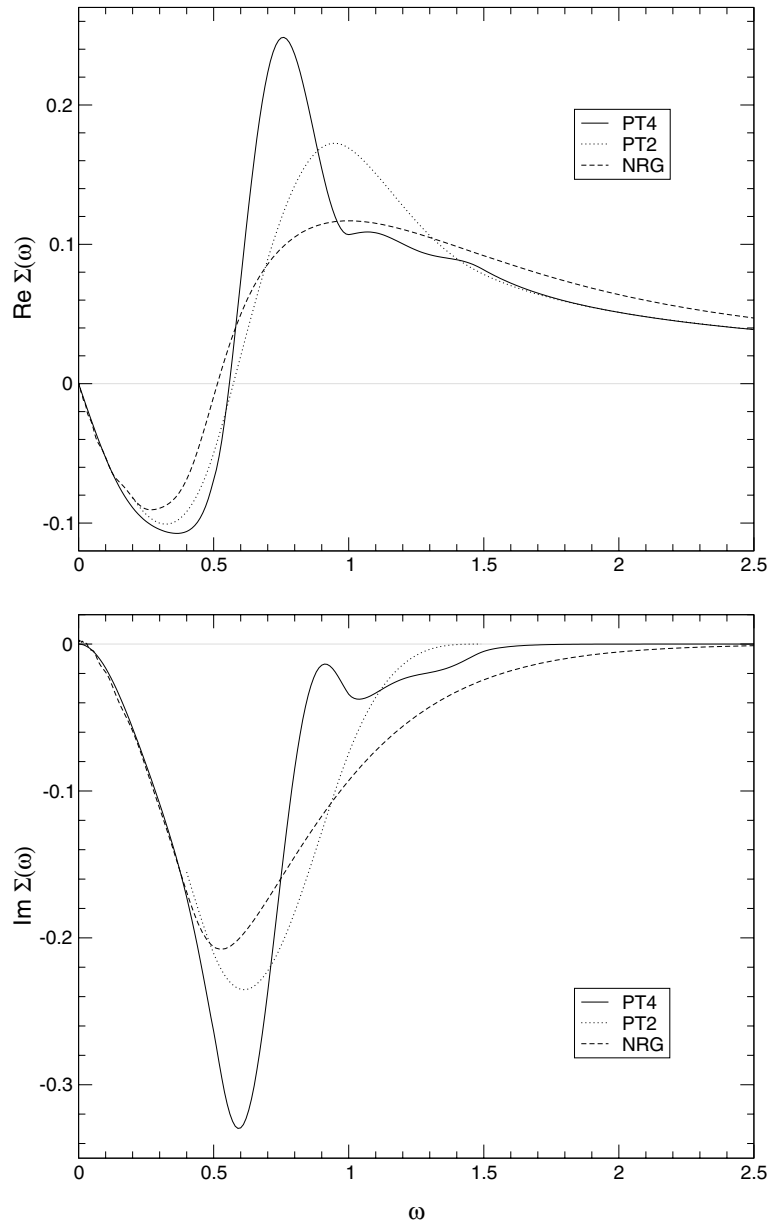


Abbildung 4.6 Real- und Imaginärteil der Selbstenergie in zweiter (gepunktete Linie) und vierter Ordnung (durchgezogene Linie) im Vergleich mit den Ergebnissen der NRG (gestrichelte Linie) für $U = 0.6W$.

erfordert jedoch eine kontinuierliche Funktion. Das weitere Vorgehen beinhaltet dementsprechend eine logarithmische Verbreiterung der Peaks,

$$\delta(\omega - \omega_n) \rightarrow \frac{e^{-b^2/4}}{b\omega_n\sqrt{\pi}} \exp\left[-\frac{1}{b^2}(\ln \omega - \ln \omega_n)\right]. \quad (4.37)$$

Das ganze Verfahren der NRG ist so angelegt, daß der Niederenergiesektor gut aufgelöst wird und man dafür jedoch hohe Energieskalen nur schlecht auflösen kann. Die Hubbard-Bänder werden beispielsweise nur durch ein oder zwei Peaks erfaßt. Dafür hofft man auf eine detaillierte Auflösung des Quasiteilchenpeaks.

In den Abbildungen 4.5 und 4.6 sind die Ergebnisse der NRG für die Selbstenergie mit $U = 0.4W$ sowie $U = 0.6W$ dargestellt. Es fällt auf, daß der Imaginärteil der NRG-Selbstenergie für $\omega = 0$ einen kleinen Shift aufweist, der sich bei der NRG selbst bei $T = 0$ nicht vermeiden läßt. Im Vergleich mit den ebenfalls abgebildeten Ergebnissen der Störungsrechnung der zweiten und vierten Ordnung in U/W sieht man sofort, daß die Abweichung für kleine Frequenzen vernachlässigbar klein sind, es jedoch im mittleren und hohen Frequenzbereich große Unterschiede zur vierten Ordnung gibt. Vor allem bei $U = 0.6W$ werden die Strukturen der Selbstenergie in vierter Ordnung für $0.5 \leq \omega \leq 1.5$ von der NRG nicht aufgelöst.

Es wundert deswegen auch nicht, daß sich für $U = 0.4W$ in der Zustandsdichte in NRG im Gegensatz zur exakten Lösung noch keine Hubbard-Bänder abzeichnen. Die Daten für die Zustandsdichte in NRG-Näherung werden analog zu (3.89) mit Hilfe der entsprechenden NRG-Selbstenergie generiert. In der Abbildung 4.7 ist die Zustandsdichte der NRG im Vergleich zur Störungstheorie für $U = 0.4W$ und $U = 0.6W$ zu sehen. Selbst bei $U = 0.6W$, wo die Hubbard-Bänder deutlich zu sehen sind, zeigt die NRG lediglich schmale Schultern. Daraus muß man schließen, daß die NRG Probleme bei Frequenzen in der Größenordnung der Hubbard-Bänder hat. Deren Höhe und Position wird von der NRG nicht zuverlässig bestimmt. Die Ausbildung der Hubbard-Bänder setzt bei zu großen U ein und es steckt zu viel Gewicht in dem Quasiteilchenpeak. Das könnte ein Indiz dafür sein, daß die NRG mit ihrer Schätzung für das Verschwinden des Quasiteilchenpeaks bei einer zu großen kritischen Wechselwirkungsstärke $U_{c,2}$ liegt.

4.1.4 Iterierte Störungstheorie (IPT)

Mit der Zweiten-Ordnungsstörungstheorie in U nutzt die *Iterierte Störungstheorie* (IPT) [15, 46] den wohl einfachsten Weg, um Einblick in das SIAM zu erhalten. Dabei setzt man das chemische Potential auf $\mu = 0$ und erhält so Lösungen relativ zur paramagnetischen Hartree-Fock-Lösung. Im symmetrischen Hubbard-Modell

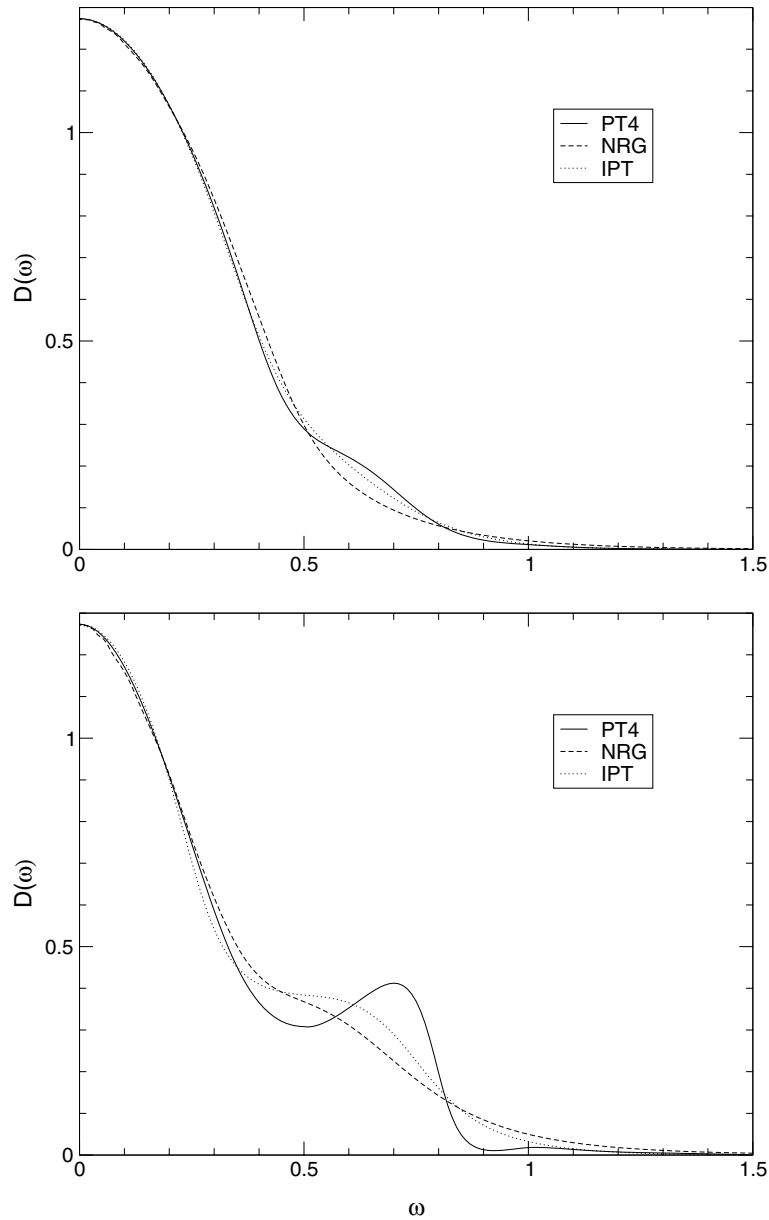


Abbildung 4.7 Die Ergebnisse der Störungstheorie in vierter Ordnung (durchgezogene Linie) für die Zustandsdichte werden mit den Ergebnissen der NRG (gestrichelte Linie) und IPT (gepunktete Linie) für $U = 0.4 W$ und $U = 0.6 W$ verglichen.

(2.13) ist das ein Trick, um die Resultate der Zweiten-Ordnungsstörungstheorie in U formal auch für starke Wechselwirkung anzuwenden. Der Grund dafür ist die günstige Struktur der Selbstenergie für halbe Bandfüllung im Atomaren Limes,

$$\Sigma_{\sigma}^{\text{Atom}}(\omega, n = 1) = \frac{U}{2} + \frac{U^2}{4\omega}, \quad (4.38)$$

die nur quadratisch in U ist [5, 26]. Deswegen hat die in zweiter Ordnung in U/t perturbativ bestimmte Zustandsdichte auch für große U eine qualitativ korrekte Struktur. Das obere und untere Hubbard-Band zeichnen sich an der richtigen Position ab.

Wegen des engen Zusammenhangs zwischen Hubbard-Modell und SIAM funktioniert der perturbative Ansatz der IPT qualitativ korrekt sowohl für schwache als auch für starke Wechselwirkung. Die Resultate in der kritischen Region in der Nähe des Metall-Isolator-Übergangs müssen jedoch sorgfältig analysiert werden.

$$\Sigma^{\text{IPT}} = \text{Diagram} \quad (4.39)$$

Die Propagatoren im obigen IPT-Ansatz sind dabei spinunabhängige Bad-Greenfunktionen

$$\mathcal{G}(\omega) = \frac{1}{(4/W)^2 G^{-1}(\omega) + \Sigma(\omega)}. \quad (4.40)$$

Für $Z \rightarrow \infty$ hängen die Selbstenergie und die lokale Einteilchen-Greenfunktion über

$$G(\omega) = \frac{1}{\omega - (W/4)^2 G(\omega) - \Sigma(\omega)} \quad (4.41)$$

miteinander zusammen. Für die Bad-Greenfunktion ergibt sich somit

$$\mathcal{G}(\omega) = \frac{1}{\omega - (W/4)^2 G(\omega)}. \quad (4.42)$$

Die Selbstenergie wird approximiert durch

$$\Sigma(\omega; \mathcal{G}(\omega)) = U^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Omega}{2\pi i} \Pi(\Omega) \mathcal{G}(\omega - \Omega) \quad (4.43)$$

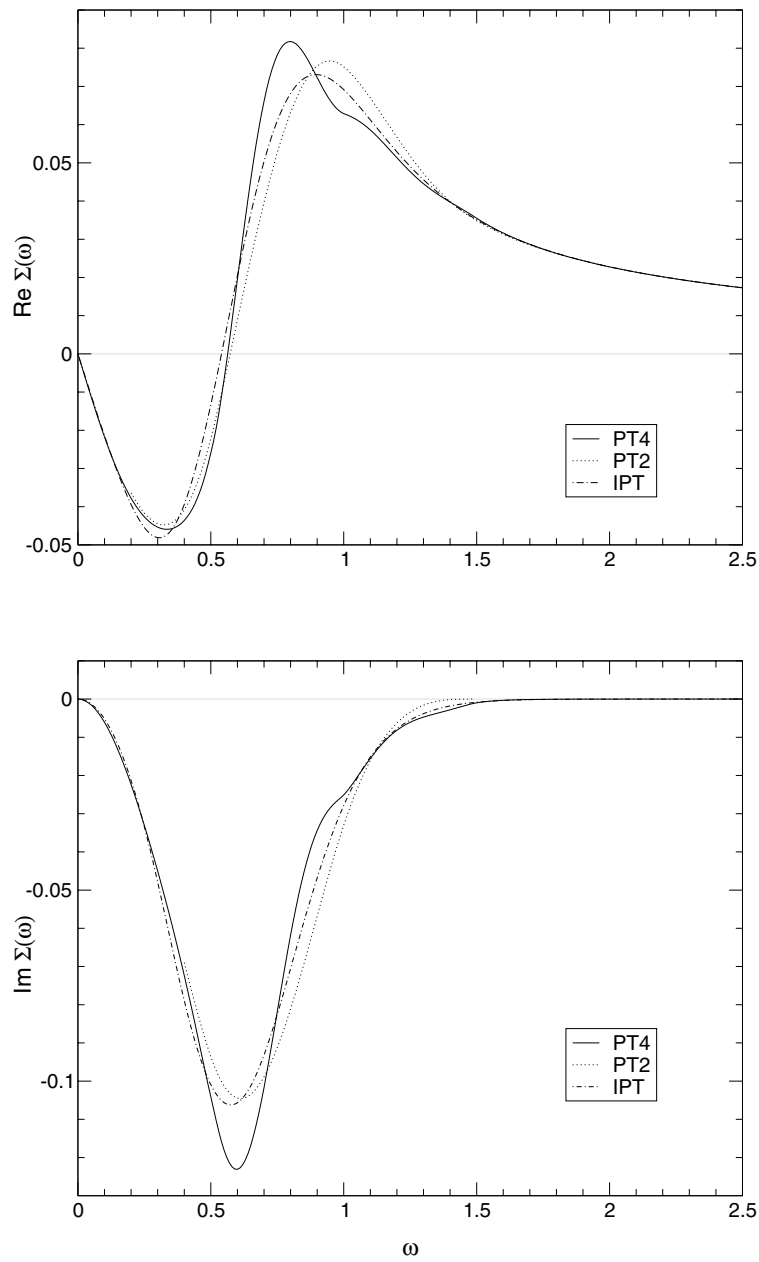


Abbildung 4.8 Real- und Imaginärteil der Selbstenergie in zweiter (gepunktete Linie) und vierter Ordnung (durchgezogene Linie) im Vergleich mit den Ergebnissen der IPT (gestrichelte Linie) für $U = 0.4W$.

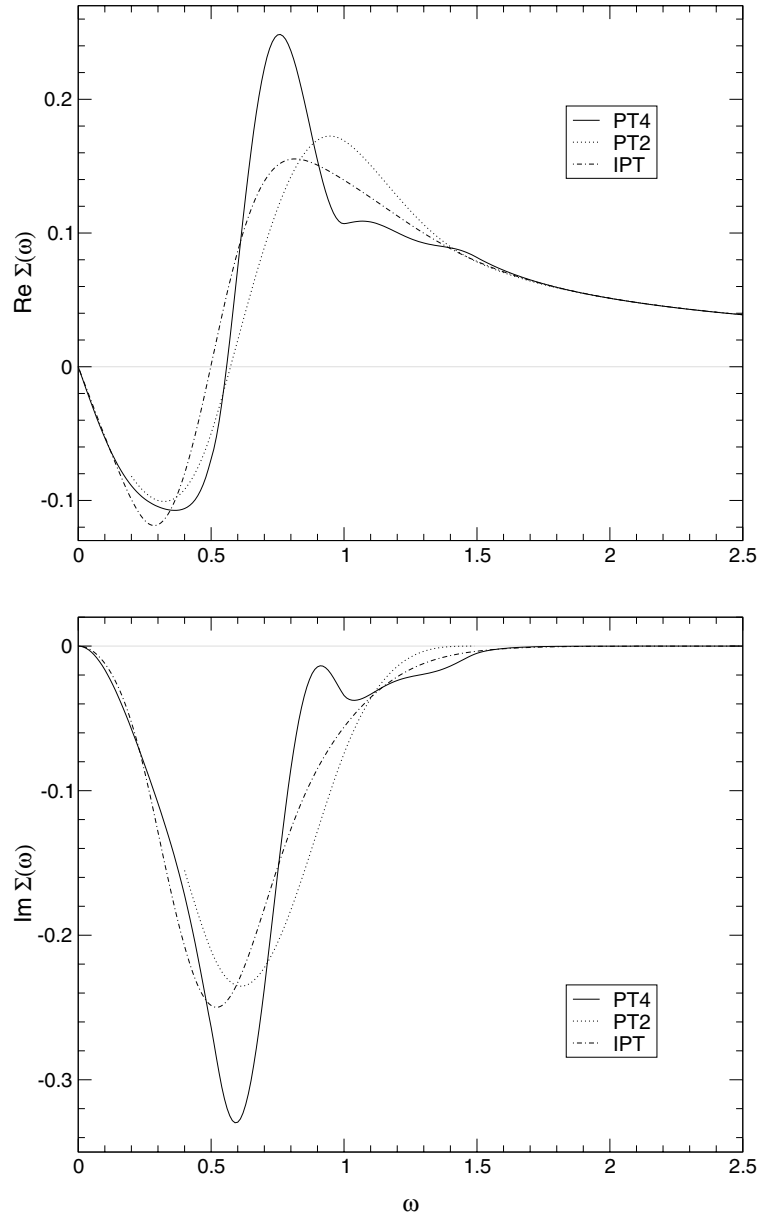


Abbildung 4.9 Real- und Imaginärteil der Selbstenergie in zweiter (gepunktete Linie) und vierter Ordnung (durchgezogene Linie) im Vergleich mit den Ergebnissen der IPT (gestrichelte Linie) für $U = 0.6 \text{ W}$.

mit der Polarisationsblase der Bad-Greenfunktionen

$$\Pi(\Omega) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \mathcal{G}(\omega_1) \mathcal{G}(\omega_1 - \Omega) . \quad (4.44)$$

Für eine gegebene Bad-Greenfunktion definiert Gleichung (4.43) den Startpunkt des Iterationszirkels. $\mathcal{G}(\omega)$ muß auf diesem Wege selbstkonsistent bestimmt werden. Per Konstruktion erhält man in der IPT im Limes schwacher Wechselwirkung die Störungstheorie in zweiter Ordnung. Die Diagramme der vierten Ordnung mit Vertexkorrekturen (3.47) und (3.59) werden vernachlässigt, wobei die anderen Diagramme anders gewichtet werden. Somit ist diese Methode bei einer moderaten Wechselwirkung unkontrolliert.

In den Abbildungen 4.8 und 4.9 werden die Selbstenergien der IPT und der Störungstheorie für $U = 0.4W$ und $U = 0.6W$ miteinander verglichen. Zumindest für $U = 0.4W$ ist die IPT deutlich näher an der Vierten-Ordnungslösung als die NRG. Die Strukturen im Bereich $0.5 \leq \omega \leq 1.5$ werden von der IPT jedoch auch nicht aufgelöst. Auch im Vergleich der Zustandsdichte in IPT mit der Vierten-Ordnungstörungstheorie in Abbildung 4.7 zeigen sich die Ergebnisse der IPT denen der NRG überlegen. Für die Ausbildung der Schultern bei $U = 0.4W$ gibt es jedoch auch bei der IPT noch keine Anzeichen und die Höhe der Hubbard-Bänder bei $U = 0.6W$ wird ebenfalls nicht korrekt wiedergegeben. Ähnlich wie die NRG sagt die IPT den Beginn der Ausbildung der Hubbard-Bänder bei zu großen U voraus. Dies ist konsistent mit den Erkenntnissen aus [22, 23]. Der Vergleich mit den Ergebnissen der $1/U$ -Störungstheorie zeigt, daß die IPT die Stabilität des Isolators unterschätzt. Offenbar wird die Stabilität des Metalls dafür überschätzt.

4.2 Random Dispersion-Approximation (RDA)

4.2.1 Methode

Ein alternativer Zugang zum Hubbard-Modell im Limes hoher Dimensionen ist die *Random Dispersion-Approximation* (RDA) [8, 5]. Diese Methode basiert nicht wie die anderen auf der DMFT und ist auch nicht auf die Konvergenz der Störungsreihen angewiesen. Somit liefert sie einen völlig unabhängigen Check für die Zuverlässigkeit der Ergebnisse der DMFT-Verfahren sowie der Störungstheorien.

Die Dispersionsrelation $\epsilon(\mathbf{k})$ wird durch die nichtwechselwirkende Zustandsdichte $D^0(\epsilon)$ (2.8) und durch ihre Korrelationsfunktionen, wie zum Beispiel (2.23) charakterisiert. In der RDA wird $\epsilon(\mathbf{k})$ durch die Zufallsverteilung $\epsilon^{\text{RDA}}(\mathbf{k})$ ersetzt. Die

nichtwechselwirkende Zustandsdichte

$$D^{\text{RDA}}(\epsilon) = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\epsilon - \epsilon^{\text{RDA}}(\mathbf{k})) \quad (4.45)$$

fungiert dabei als Wahrscheinlichkeitsverteilung, wobei

$$D^{\text{RDA}}(\epsilon) = D^0(\epsilon) \quad (4.46)$$

gilt. Desweiteren faktorisieren in der RDA alle Korrelationsfunktionen. Dies ist eine charakteristische Eigenschaft der Dispersionsrelation $\epsilon(\mathbf{k})$ im Limes hoher Dimensionen in paramagnetischen Systemen, so daß die RDA mit der semielliptischen Zustandsdichte $D^0(\epsilon)$ in $d = \infty$ exakt wird.

Um im thermodynamischen Limes Gleichung (4.46) zu garantieren, wird die eindimensionale Dispersionsrelation $\epsilon(k)$ als Lösung der impliziten Gleichung

$$\frac{k}{2} = \frac{2\epsilon(k)}{W} \sqrt{1 - \left(\frac{2\epsilon(k)}{W}\right)^2} + \arcsin\left(\frac{2\epsilon(k)}{W}\right) \quad (4.47)$$

bestimmt. Für eine numerische Analyse muß $\epsilon_{\sigma}^{\mathcal{Q}}(k)$ einer Realisation \mathcal{Q} ($\mathcal{Q} = (\mathcal{Q}_{\uparrow}, \mathcal{Q}_{\downarrow})$) der Zufallsverteilung spezifiziert werden, was den Hubbard-Hamilton-Operator

$$\hat{H}^{\mathcal{Q}} = \sum_{k,\sigma} \epsilon^{\mathcal{Q}\sigma}(k) \hat{c}_{k\sigma}^+ \hat{c}_{k\sigma} + U \hat{D} \quad (4.48)$$

eines formal eindimensionalen Gitters definiert. Für die praktische Umsetzung wählt man ein eindimensionales Gitter im Impulsraum aus L Gitterpunkten

$$k_l = \frac{2\pi}{L} \left(-\frac{L+1}{2} + l \right) \quad l = 1, \dots, L. \quad (4.49)$$

Als nächstes wird eine Permutation \mathcal{Q}_{σ} gewählt, die die Sequenz $1, \dots, L$ permutiert, wodurch eine Realisation der RDA-Dispersion $\epsilon(k_{\mathcal{Q}_{\sigma}[l]})$ definiert wird. Die numerische Aufgabe besteht dann in der Diagonalisierung des korrespondierenden Hamilton-Operators (4.48). Für gegebenes U und L wird auf diesem Wege die Grundzustandsenergie $E_0^{\mathcal{Q}}(N, U)$ und die Impulsverteilung

$$n^{\mathcal{Q}}(\epsilon; U) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \langle \hat{n}_{k_l\sigma} \rangle \Big|_{\epsilon(k_l)=\epsilon} \quad (4.50)$$

sowie das Quasiteilchengewicht

$$Z^{\mathcal{Q}} = n^{\mathcal{Q}}(\epsilon = 0^-) - n^{\mathcal{Q}}(\epsilon = 0^+) \quad (4.51)$$

bei halber Bandfüllung berechnet, wobei $\langle \dots \rangle$ die Grundzustandserwartungswerte für die Realisation Q sind. Um Mittelwerte physikalischer Größen für eine feste Systemgröße L bestimmen zu können, muß im darauffolgenden Schritt über die Anzahl N_Q der Realisation Q gemittelt werden, beispielsweise

$$n(\epsilon; U) = \frac{1}{N_Q} \sum_Q n^Q(\epsilon; U). \quad (4.52)$$

Die Genauigkeit der Methode liegt bei $\mathcal{O}(1/N_Q)$. Typische Werte für N_Q sind $\mathcal{O}(10^2)$ für $6 \leq L \leq 16$.

4.2.2 Impulsverteilung

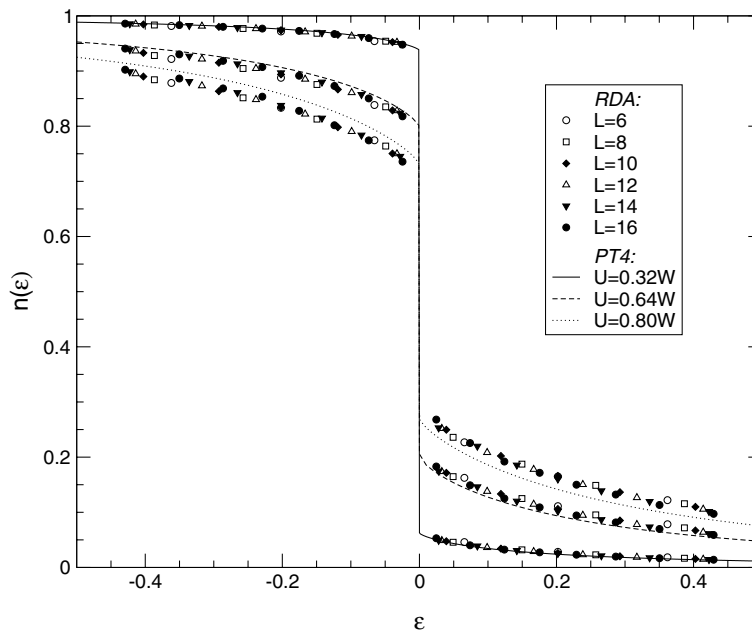


Abbildung 4.10 Die aus der Vierten-Ordnungstörungstheorie resultierende Impulsverteilung wird mit den Ergebnissen der RDA für $U = 0.32 W$, $U = 0.64 W$ und $U = 0.80 W$ verglichen.

Abbildung 4.10 zeigt die RDA-Impulsverteilung im Vergleich zu den Resultaten der vierten Ordnung der U -Störungstheorie, die anhand der Gleichung (2.98) erzeugt werden. Für schwache Kopplung liegen die RDA-Daten direkt auf den Kurven der vierten Ordnung. Die Abweichung für größere Wechselwirkungsstärken

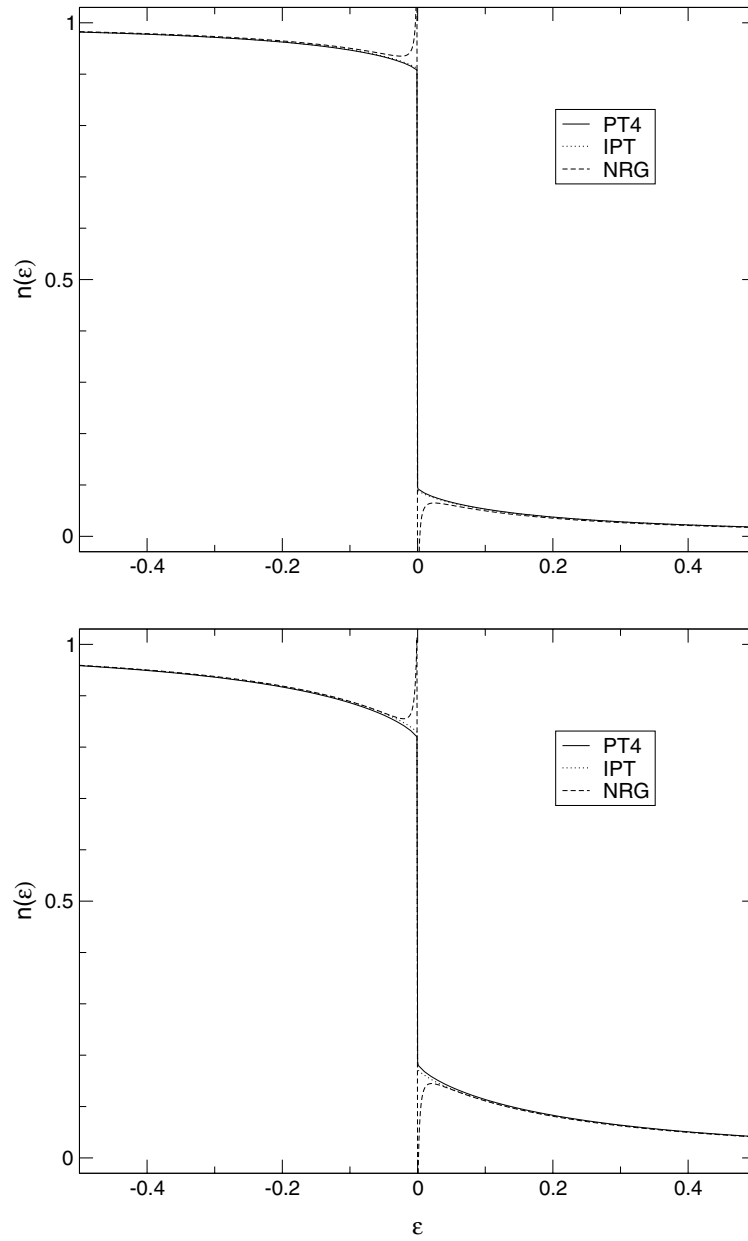


Abbildung 4.11 Die aus der Vierten-Ordnungsstörungstheorie resultierende Impulsverteilung wird mit den Ergebnissen der NRG und IPT für $U = 0.4W$ und $U = 0.6W$ verglichen.

sind wahrscheinlich auf fehlende Terme höherer Ordnungen in der Störungsentwicklung zurückzuführen. Daß die Resultate der vierten Ordnung selbst für so große Wechselwirkungsstärken wie $U \approx 0.8W$ eine vernünftige Beschreibung der Impulsverteilung liefern, ist erstaunlich. Ähnlich wie die Grundzustandsenergie ist auch die Impulsverteilung als integrale Größe offenbar im Gegensatz zur Zustandsdichte und insbesondere zur Selbstenergie keine besonders sensitive Größe.

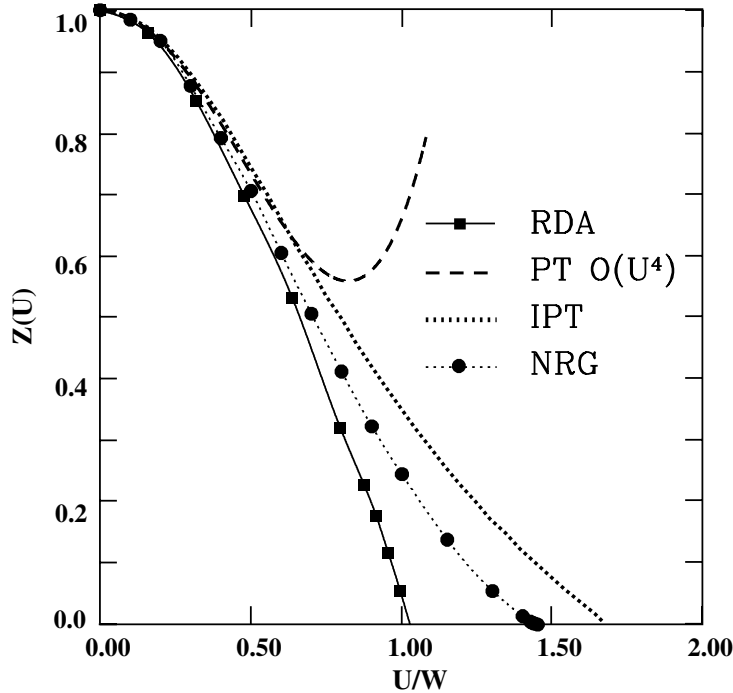


Abbildung 4.12 Die perturbative Kurve vierter Ordnung (gestrichelte Linie) für das Quasiteilchengewicht wird mit Ergebnissen der RDA (Quadrate), NRG (Kreise) und IPT (fein gestrichelte Linie) verglichen [48].

Ebenfalls gemäß Gleichung (2.98) werden die Daten für die Impulsverteilungen der NRG und IPT generiert. Diese Ergebnisse sind im Vergleich zu denen der Störungstheorie in Abbildung 4.11 zu sehen. Trotz ihrer Mängel in der Selbstenergie bei mittleren Frequenzen wird die Impulsverteilung von beiden Methoden sehr zufriedenstellend beschrieben. Anscheinend kann man anhand der Impulsverteilung für kleine und mittlere Wechselwirkungsstärken nicht sensibel genug testen, wie gut eine Näherung für die Selbstenergie ist. In der Nähe des Sprungs zeigen sich die ersten signifikanten Unterschiede. Die Sprunghöhe entspricht nach Gleichung (2.99) dem Quasiteilchengewicht. Die Ausreißer der NRG-Kurven in der Nähe des

Sprungs sind auf den Offset der NRG-Daten beim Imaginärteil der Selbstenergie zurückzuführen. Sie erschweren die Ermittlung des Quasiteilchengewichts auf diesem Wege. Die IPT-Daten liegen für negative Energien immer über und für positive Energien immer unter den perturbativen Kurven, wodurch das Quasiteilchengewicht der IPT tendenziell zu groß herauskommt

Auch in Abbildung (4.12), wo die Ergebnisse der RDA, NRG und IPT für das Quasiteilchengewicht als Funktion von U/W im Vergleich mit den perturbativen Resultaten zu sehen sind, liegen die IPT-Daten konsistent zu hoch. Die NRG- und IPT-Kurven erhält man mit Gleichung (2.93) über den Realteil der Selbstenergie. Für die Kurve der vierten Ordnung invertiert man Gleichung (3.86) und erhält

$$Z(U) = 1 - (1.307 \pm 10^{-3}) U^2 + (0.969 \pm 2 \cdot 10^{-3}) U^4 + \mathcal{O}(U^6) . \quad (4.53)$$

Innerhalb des Gültigkeitsbereichs der vierten Ordnung stimmen die Resultate der vierten Ordnung mit denen der NRG und RDA im Rahmen der numerischen Genauigkeit überein. Diese beiden Methoden unterstützen jedoch unterschiedliche Szenarien für den Mott-Hubbard-Isolator, so daß die vierte Ordnung anhand der Kurven für das Quasiteilchengewicht keine Entscheidung für eines der beiden Szenarien liefern kann.

5 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wird auf der Basis der diagrammatischen U -Störungstheorie der Vierte-Ordnungsbeitrag der Selbstenergie des Hubbard-Modells bei halber Bandfüllung im Limes hoher Dimensionen berechnet. Die Auswertung der vier verschiedenen Diagramme der vierten Ordnung macht deutlich, daß alle einen gleich wichtigen Beitrag zur Selbstenergie liefern und daß die Vernachlässigung bestimmter Diagrammklassen zu erheblichen Fehlern führen kann. Sowohl Kontrollrechnungen zu jedem einzelnen Diagramm als auch der Vergleich mit unabhängigen Methoden wie der Fixed-Energy Exakten Diagonalisierung (FE-ED), der Dynamischen Dichte-Matrix-Renormierungsgruppe (DDMRG) und der Random Dispersion-Approximation (RDA) bestätigen die Zuverlässigkeit der Ergebnisse, zeigen aber auch die Grenzen der Anwendbarkeit auf, die etwa bei $U \leq 0.6 W$ liegen. Bei größeren Wechselwirkungsstärken machen sich die fehlenden Terme höherer Ordnungen bemerkbar. Erste Andeutungen der sich ausbildenden Hubbard-Bänder finden sich schon bei recht kleinen Wechselwirkungsstärken $U \approx 0.4 W$. Diese Beobachtung wird von den Resultaten der FE-ED und DDMRG bestätigt. Die FE-ED arbeitet kontrolliert, hat aber mit großen Finite-Size-Effekten und einer schwachen Auflösung zu kämpfen. Die DDMRG behält die Stärken der FE-ED bei und verbessert die Auflösung um mehr als das Vierfache. Der Vergleich mit der vierten Ordnung bestätigt die Zuverlässigkeit dieser neuen Methode und läßt hoffen, daß die DDMRG es schafft, in den interessantesten Bereich um den Mott-Hubbard-Übergang herum vorzustoßen.

Ein Vergleich mit der Numerischen Renormierungsgruppe (NRG) und der Iterierten Störungstheorie (IPT) zeigt die Schwächen der von ihnen ermittelten Selbstenergien auf, die im mittleren Frequenz-Bereich liegen. Eine Ausbildung der Hubbard-Bänder in der zugehörigen Zustandsdichte setzt bei beiden Methoden erst spät bei $U \approx 0.6 W$ ein, wobei die IPT-Resultate denen der NRG leicht überlegen sind. Bei der NRG kann man nicht beurteilen, inwieweit die schlechte Auflösung in mittleren und hohen Energieskalen problematisch bei der Bestimmung des Metall-Isolator-Übergangs ist. Die IPT erzielt bei kleinen Wechselwirkungsstärken erstaunlich gute Ergebnisse, arbeitet jedoch unkontrolliert, so daß man auch hier nicht beurteilen kann, wie sich das auf die Ergebnisse in der Nähe des Übergangs auswirkt.

Über die Qualität der RDA-Resultate kann man aufgrund eines Vergleichs mit den perturbativen Ergebnissen nicht viel sagen, da die vierte Ordnung in diesem Fall wenig Testwirkung zeigt. Es hat sich herausgestellt, daß ein Vergleich der Impulsverteilungen keinen sensiblen Test darstellt, um die Qualität von Ergebnissen für die Selbstenergie zu überprüfen. Es zeigten sich bei der U -Störungstheorie, RDA, NRG und IPT keine nennenswerten Unterschiede in den Impulskurven bis auf den Bereich dicht an der Sprungstelle. Im Gültigkeitsbereich der vierten Ordnung liegen die Ergebnisse der verschiedenen Methoden dicht beieinander, wobei die IPT-Daten tendenziell zu hoch sind.

Für kleine und mittlere Wechselwirkungsstärken bietet die vierte Ordnung somit einen Check für alle weiteren Näherungsverfahren, die sich mit dem Mott-Hubbard-Modell in der metallischen Phase auseinandersetzen. Die Streitfrage, ob der Metall-Isolator-Übergang kontinuierlich ist oder nicht, kann mit dem Beitrag dieser Arbeit nicht endgültig entschieden werden. Dazu müßten noch weitere Ordnungen der U -Störungstheorie berechnet werden. Man findet jedoch eine bemerkenswerte Übereinstimmung zwischen dem Ergebnis der $1/U$ -Störungsentwicklung in dritter Ordnung für $U_{c,1}$, dem Öffnen der Lücke, und U_{cross} , wo die beiden perturbativen Kurven für die mittlere Doppelbesetzung sich kreuzen und die metallischen Phase spätestens zu Ende ist. Es gibt also keine Hinweise, die eine Unstetigkeit in der Doppelbesetzung oder der Grundzustandsenergie vermuten lassen. Die Ergebnisse für die Zustandsdichte und vor allem für die mittlere Doppelbesetzung zeigen, daß ein kontinuierlicher Übergang nicht ausgeschlossen werden sollte.

A Ergänzende Rechnungen zur vierten Ordnung

A.1 Berechnung von $\text{Im} \Sigma^{(4b)}(\omega)$

$X(\omega_1, \omega)$ ergibt nach Ausmultiplizieren der Klammerausdrücke und Anwenden des Residuensatzes

$$\begin{aligned}
 X(\omega_1, \omega) = -i \left[\right. & \frac{(-1)}{\omega_1 - \omega + \epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 - i\eta_1} \frac{1}{\omega - \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4 + i\eta_2} \\
 & - \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_1 + \epsilon_2 - i\eta_1} \frac{1}{\omega + \epsilon_2 + \epsilon_3 + \epsilon_4 - i\eta_3} \\
 & + \frac{1}{+\omega_1 - \epsilon_1 - \epsilon_2 + i\eta_2} \frac{1}{\omega - \omega_1 + \epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 - i\eta_3} \\
 & + \frac{1}{\omega_1 - \omega - \epsilon_1 - \epsilon_3 - \epsilon_4 + i\eta_1} \frac{1}{-\omega - \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4 + i\eta_2} \\
 & - \frac{1}{\omega_1 - \epsilon_1 - \epsilon_2 + i\eta_1} \frac{1}{\omega - \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4 + i\eta_3} \\
 & \left. - \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_1 + \epsilon_2 - i\eta_2} \frac{1}{\omega_1 - \omega + \epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 - i\eta_3} \right]. \quad (\text{A.1})
 \end{aligned}$$

Setzt man $X(\omega_1, \omega)$ in Gleichung (3.51) für $\Sigma^{4b}(\omega)$ ein, multipliziert aus und wendet auch für das ω_1 -Integral den Residuensatz an, erhält man

$$\Sigma^{4b}(\omega) \equiv -U^4 \int_0^\infty d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \cdots \int_0^\infty d\epsilon_7 D^0(\epsilon_7) [S_I + S_{II} + S_{III} + S_{IV} + S_V + S_{VI}] , \quad (\text{A.2})$$

$$\begin{aligned}
S_{\text{I}} = & \frac{(-1)}{\omega - \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4 + i\eta_2} \\
& \times \left[\frac{1}{\epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_5} \frac{1}{\omega - \epsilon_1 - \epsilon_3 - \epsilon_4 - \epsilon_6 - \epsilon_7 + i\eta_5} \right. \\
& - \frac{1}{\omega + \epsilon_5 + \epsilon_6 + \epsilon_7 - i\eta_5} \frac{1}{\epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_5} \\
& \left. + \frac{1}{\omega - \epsilon_5 - \epsilon_6 - \epsilon_7 + i\eta_4} \frac{1}{\omega - \epsilon_1 - \epsilon_3 - \epsilon_4 - \epsilon_6 - \epsilon_7 + i\eta_1} \right], \quad (\text{A.3})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_{\text{II}} = & \frac{1}{\omega + \epsilon_2 + \epsilon_3 + \epsilon_4 - i\eta_3} \\
& \times \left[\frac{1}{\omega + \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_5 - i\eta_4} \frac{1}{\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_6 + \epsilon_7} \right. \\
& + \frac{1}{\omega + \epsilon_5 + \epsilon_6 + \epsilon_7 - i\eta_5} \frac{1}{\omega + \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_5 - i\eta_1} \\
& \left. + \frac{1}{\omega - \epsilon_5 - \epsilon_6 - \epsilon_7 + i\eta_4} \frac{1}{\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_6 + \epsilon_7} \right], \quad (\text{A.4})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_{\text{III}} = & \left[\frac{1}{\omega + \epsilon_5 + \epsilon_6 + \epsilon_7 - i\eta_4} + \frac{1}{\omega - \epsilon_5 + \epsilon_6 + \epsilon_7 - i\eta_4 + i\eta_5} \right] \\
& \times \frac{1}{\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_6 + \epsilon_7} \frac{1}{\omega + \epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_6 + \epsilon_7 - i\eta_3} \\
& + \left[\frac{1}{\omega - \epsilon_5 + \epsilon_6 + \epsilon_7 - i\eta_5 + i\eta_4} - \frac{1}{\omega - \epsilon_5 - \epsilon_6 - \epsilon_7 + i\eta_4} \right] \\
& \times \frac{1}{\omega - \epsilon_1 - \epsilon_2 - \epsilon_5 + i\eta_2} \frac{1}{\epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_5}, \quad (\text{A.5})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_{\text{IV}} = & \frac{1}{\omega + \epsilon_2 + \epsilon_3 + \epsilon_4 - i\eta_2} \\
& \times \left[\frac{(-1)}{\omega + \epsilon_5 + \epsilon_6 + \epsilon_7 - i\eta_4} \frac{1}{\omega + \epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_6 + \epsilon_7 - i\eta_1} \right. \\
& - \frac{1}{\omega - \epsilon_5 - \epsilon_6 - \epsilon_7 + i\eta_5} \frac{1}{\epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_5} \\
& \left. + \frac{1}{\epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_5} \frac{1}{\omega + \epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_6 + \epsilon_7 - i\eta_5} \right], \quad (\text{A.6})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 S_V = & \frac{1}{\omega - \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4 + i\eta_3} \left[\frac{1}{\omega + \epsilon_5 + \epsilon_6 + \epsilon_7 - i\eta_4} \frac{1}{\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_6 + \epsilon_7} \right. \\
 & - \frac{1}{\omega - \epsilon_5 - \epsilon_6 - \epsilon_7 + i\eta_5} \frac{1}{\omega - \epsilon_1 - \epsilon_2 - \epsilon_5 + i\eta_1} \\
 & \left. - \frac{1}{\omega - \epsilon_1 - \epsilon_2 - \epsilon_5 + i\eta_4} \frac{1}{\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_6 + \epsilon_7} \right], \quad (\text{A.7})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 S_{VI} = & \frac{(-1)}{\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_6 + \epsilon_7} \\
 & \times \left[\frac{1}{\omega + \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_5 - i\eta_4} \frac{1}{\omega + \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4 + i\eta_3 - i\eta_2} \right. \\
 & \left. + \frac{1}{\omega - \epsilon_5 - \epsilon_6 - \epsilon_7 + i\eta_4} \frac{1}{\omega - \epsilon_1 - \epsilon_3 - \epsilon_4 - \epsilon_6 - \epsilon_7 + i\eta_3} \right] \\
 & + \frac{1}{\epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_5} \\
 & \times \left[\frac{1}{\omega + \epsilon_5 + \epsilon_6 + \epsilon_7 - i\eta_5} \frac{1}{\omega + \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_5 - i\eta_2} \right. \\
 & \left. - \frac{1}{\omega - \epsilon_1 - \epsilon_3 - \epsilon_4 - \epsilon_6 - \epsilon_7 + i\eta_5} \frac{1}{\omega + \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4 + i\eta_3 - i\eta_2} \right]. \quad (\text{A.8})
 \end{aligned}$$

Multipliziert man die restlichen Klammerausdrücke ebenfalls aus, kommt man auf insgesamt zwanzig Summanden. Um Schreibarbeit zu sparen und einen besseren Überblick zu gewährleisten, werden sie der generischen Reihenfolge nach wie folgt durchnummeriert

$$\Sigma^{4b}(\omega) \equiv -U^4 \int_0^\infty d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \cdots \int_0^\infty d\epsilon_7 D^0(\epsilon_7) [S_1 + \cdots + S_{20}]. \quad (\text{A.9})$$

Diverse Indexvertauschungen ermöglichen das Zusammenfassen der Terme,

$$S_1 = S_{18}, S_2 = S_6, S_4 = S_{19}, S_7 = S_{13}, S_{10} = S_{16}, S_{12} = S_{14}. \quad (\text{A.10})$$

Die Terme S_4, S_5, S_7 und S_{11} steuern für $\omega \geq 0$ nichts zum Imaginärteil von $\Sigma^{4b}(\omega)$ bei, so daß gilt,

$$\begin{aligned}
 \text{Im} \Sigma^{4b}(\omega) = & -U^4 \int_0^\infty d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \cdots \int_0^\infty d\epsilon_7 D^0(\epsilon_7) \\
 & \times \text{Im} (2S_1 + 2S_2 + S_3 + S_8 + S_9 + 2S_{10} + 2S_{12} + S_{15} + S_{17} + S_{20}). \quad (\text{A.11})
 \end{aligned}$$

Um den Imaginärteil der einzelnen Summanden zu bestimmen, wird jeder Partialbruch mit Hilfe der Dirac-Identität (2.74) in Real- und Imaginärteil zerlegt. Im folgenden wird die Kurzform

$$\int_{1\dots 7} \equiv \int_0^\infty d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \cdots \int_0^\infty d\epsilon_7 D^0(\epsilon_7) \quad (\text{A.12})$$

verwendet. Es folgt eine detaillierte Berechnung des Imaginärteils.

$$\begin{aligned} - \int_{1\dots 7} \frac{\text{Im} S_1}{\pi U^4} &= -2 \int_{1\dots 7} \delta(\omega - \epsilon_2 - a) \frac{1}{\epsilon_1 + a + \epsilon_5} \mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega - \epsilon_1 - a - b} \right) \\ &\quad - 2 \int_{1\dots 7} \mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega - \epsilon_2 - a} \right) \frac{1}{\epsilon_1 + a + \epsilon_5} \delta(\omega - \epsilon_1 - a - b) \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

$$\begin{aligned} &= -2 \int_{1\dots 7} \delta(\omega - \epsilon_2 - a) \frac{1}{\omega - \epsilon_2 - a} \mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega - \epsilon_1 - a - b} \right) \\ &\quad - 2 \int_{1\dots 7} \mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega - \epsilon_2 - a} \right) \frac{1}{\omega + \epsilon_5 - b} \delta(\omega - \epsilon_1 - a - b) \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

$$\begin{aligned} &= 2 \int_0^1 da h(a) \tilde{D}^0(\omega - a) \int_0^{1/2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) f(\epsilon_1 + a) H(\epsilon_1 + a - \omega) \\ &\quad + 2 \int_0^1 da h(a) \int_0^1 db h(b) f(a - \omega) f(\omega - b) \tilde{D}^0(\omega - a - b) \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

$$\equiv S_a + S_b ,$$

wobei die folgende Variablentransformationen eingeführt werden,

$$a \equiv \epsilon_3 + \epsilon_4 , \quad (\text{A.16})$$

$$b \equiv \epsilon_6 + \epsilon_7 . \quad (\text{A.17})$$

Weiterhin werden die Hilfsfunktionen $f(\omega)$, $H(\omega)$ und $h(\omega)$, siehe Appendix C, verwendet. Wie man an der Berechnung von (A.15) sieht, lassen sich einige der ϵ -Integrale durchführen, so dass am Ende ein Zweifach-Integral übrigbleibt, das der Integrationsroutine zugeführt wird. Es gibt immer mehrere Möglichkeiten, die Siebenfach-Integrale auf Zweifach-Integrale zu reduzieren. Die folgenden Lösungen sind im Hinblick darauf gewählt, daß sie ein sinnvolles Zusammenfassen

der Summanden ermöglichen. Bei den folgenden Termen ist jedesmal zuerst eine Bestimmung des Imaginärteils über die Dirac-Identitäten analog zu (A.13) vorausgegangen. Bei manchen Termen ist schon vor der Integration die δ -Funktion angewendet worden wie beim zweiten Summanden von (A.14).

$$\begin{aligned}
- \int_{1\dots 7} \frac{\text{Im} S_2}{\pi U^4} &= 2 \int_0^1 da h(a) \tilde{D}^0(\omega - a) \int_0^{1/2} d\epsilon_5 D^0(\epsilon_5) f(\epsilon_5 + a) H(\epsilon_5 + \omega) \\
&\equiv S_c .
\end{aligned} \tag{A.18}$$

$$\begin{aligned}
- \int_{1\dots 7} \frac{\text{Im} S_3}{\pi U^4} &= - \int_0^1 da h(a) \int_0^1 db h(b) f(a - \omega) f(b - \omega) \tilde{D}^0(\omega - a - b) \\
&\quad - 2 \int_0^1 db h(b) \int_0^{1/2} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_2) f(b - \omega) f(b - \epsilon_2) h(\omega - \epsilon_2) \\
&\quad + \pi^2 \int_0^1 da h(a) \int_0^1 db h(b) \tilde{D}^0(\omega - a) \tilde{D}^0(\omega - b) \tilde{D}^0(\omega - a - b) \\
&\equiv S_d + (S_e + S_f) + S_g .
\end{aligned} \tag{A.19}$$

$$\begin{aligned}
- \int_{1\dots 7} \frac{\text{Im} S_8}{\pi U^4} &= - \int_0^{1/2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \int_0^{1/2} d\epsilon_5 D^0(\epsilon_5) \int_0^1 db h(b) \text{sgn}(b - \epsilon_5) \delta(\omega - \epsilon_5 + b) \\
&\quad \times f(\epsilon_1 + a) H(\omega + \epsilon_1 + a) \\
&\equiv S_h .
\end{aligned} \tag{A.20}$$

$$\begin{aligned}
- \int_{1\dots 7} \frac{\text{Im} S_9}{\pi U^4} &= \int_0^{1/2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \int_0^{1/2} d\epsilon_5 D^0(\epsilon_5) \int_0^1 db h(b) \text{sgn}(b - \epsilon_5) \delta(\omega - \epsilon_5 + b) \\
&\quad \times f(\epsilon_1 + \epsilon_5 - \omega) H(\epsilon_1 + \epsilon_5) \\
&\quad + \int_0^{1/2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \int_0^{1/2} d\epsilon_5 D^0(\epsilon_5) \tilde{D}^0(\omega - \epsilon_1 - \epsilon_5) H(\omega - \epsilon_5) H(\epsilon_1 + \epsilon_5) \\
&= S_i + S_j .
\end{aligned} \tag{A.21}$$

$$\begin{aligned}
- \int_{1\dots 7} \frac{\text{Im } S_{10}}{\pi U^4} &= 2 \int_0^{1/2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \int_0^{1/2} d\epsilon_5 D^0(\epsilon_5) h(\omega - \epsilon_5) f(\epsilon_1 + \epsilon_5 - \omega) H(\epsilon_1 + \epsilon_5) \\
&\quad + 2 \int_0^{1/2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \int_0^{1/2} d\epsilon_5 D^0(\epsilon_5) H(\epsilon_5 - \omega) \tilde{D}^0(\omega - \epsilon_1 - \epsilon_5) H(\epsilon_1 + \epsilon_5) \\
&\equiv S_k + S_l .
\end{aligned} \tag{A.22}$$

$$\begin{aligned}
- \int_{1\dots 7} \frac{\text{Im } S_{12}}{\pi U^4} &= -2 \int_0^1 da h(a) \int_0^{1/2} d\epsilon_5 D^0(\epsilon_5) f(\omega + a) h(\omega - \epsilon_5) f(a + \epsilon_5) \\
&= S_m .
\end{aligned} \tag{A.23}$$

$$\begin{aligned}
- \int_{1\dots 7} \frac{\text{Im } S_{15}}{\pi U^4} &= \int_0^{1/2} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_2) \int_0^{1/2} d\epsilon_5 D^0(\epsilon_5) H(\epsilon_2 - \omega) H(\epsilon_5 - \omega) \tilde{D}^0(\omega - \epsilon_2 - \epsilon_5) \\
&\quad + 2 \int_0^{1/2} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_2) \int_0^{1/2} d\epsilon_5 D^0(\epsilon_5) h(\omega - \epsilon_2) H(\epsilon_5 - \omega) f(\epsilon_2 + \epsilon_5 - \omega) \\
&\quad - \pi^2 \int_0^1 da h(a) \int_0^1 db h(b) \tilde{D}^0(\omega - a) \tilde{D}^0(\omega - b) \tilde{D}^0(a + b - \omega) \\
&\equiv S_n + (S_o + S_p) + S_q .
\end{aligned} \tag{A.24}$$

$$\begin{aligned}
- \int_{1\dots 7} \frac{\text{Im } S_{17}}{\pi U^4} &= - \int_0^{1/2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \int_0^{1/2} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_2) \int_0^1 da h(a) \text{sgn}(a - \epsilon_2) \delta(\omega + \epsilon_2 - a) \\
&\quad \times f(\epsilon_1 + \epsilon_2 + \omega) H(\epsilon_1 + \epsilon_2) \\
&\equiv S_r .
\end{aligned} \tag{A.25}$$

$$\begin{aligned}
- \int_{1\dots 7} \frac{\text{Im } S_{20}}{\pi U^4} &= - \int_0^1 da h(a) \int_0^1 db h(b) \tilde{D}^0(\omega - a - b) f(\omega - b) f(\omega - a) \\
&\quad + \int_0^{1/2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \int_0^{1/2} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_2) \int_0^1 da h(a) \text{sgn}(a - \epsilon_2) \delta(\omega + \epsilon_2 - a) \\
&\quad \times f(\epsilon_1 + a) H(\epsilon_1 + a - \omega) \\
&\equiv S_s + S_t .
\end{aligned} \tag{A.26}$$

Es ist günstig folgende Terme zusammenzufassen. Die Terme S_h , S_i , S_r und S_t heben sich gegenseitig auf.

$$\begin{aligned}
S_h + S_i + S_r + S_t &= - \int_0^{1/2} d\epsilon_1 \int_0^{1/2} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_1) D^0(\epsilon_2) \int_0^1 da h(a) \text{sgn}(a - \epsilon_2) \\
&\quad \times [\delta(\omega - \epsilon_2 + a) \{ -f(\epsilon_1 + \epsilon_2 - \omega) H(\epsilon_1 + \epsilon_2) \\
&\quad \quad \quad + f(\epsilon_1 + a) H(\omega + \epsilon_1 + a) \} \\
&\quad \quad + \delta(\omega + \epsilon_2 - a) \{ f(\epsilon_1 + \epsilon_2 + \omega) H(\epsilon_1 + \epsilon_2) \\
&\quad \quad \quad - f(\epsilon_1 + a) H(\epsilon_1 + a - \omega) \}] \quad (\text{A.27}) \\
&= 0 .
\end{aligned}$$

Faßt man die Terme S_b , S_d und S_s zusammen, ist es möglich die Hilfsfunktion $l(\omega)$, siehe (C.6), einzusetzen.

$$\begin{aligned}
S_b + S_d + S_s &= - \int_0^1 da h(a) \int_0^1 db h(b) \\
&\quad \times \tilde{D}^0(\omega - a - b) [f(\omega - b) - f(b - \omega)] [f(\omega - a) - f(a - \omega)] \\
&= - \int_0^1 da h(a) \int_0^1 db h(b) \tilde{D}^0(\omega - a - b) l(b - \omega) l(a - \omega) \quad (\text{A.28}) \\
&\equiv I_1 .
\end{aligned}$$

Die folgenden Terme sind unter dem Gesichtspunkt zusammengefaßt, daß sie dieselben Integrationsvariablen und dieselben Bedingungen an die Integrationsvariablen besitzen.

$$\begin{aligned}
S_e + S_f + S_m &= -2 \int_0^1 db h(b) \int_0^{1/2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) h(\omega - \epsilon_1) \\
&\quad \times [f(b - \omega) f(b - \epsilon_1) + f(b + \omega) f(b + \epsilon_1)] \quad (\text{A.29}) \\
&\equiv I_2 .
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_a + S_c &= 2 \int_0^1 da h(a) \tilde{D}^0(\omega - a) \int_0^{1/2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) f(\epsilon_1 + a) \\
&\quad \times [H(\epsilon_1 + a - \omega) + H(\omega + \epsilon_1)] \quad (\text{A.30}) \\
&\equiv I_3 .
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_g + S_q &= \pi^2 \int_0^1 da h(a) \int_0^1 db h(b) \tilde{D}^0(\omega - a) \tilde{D}^0(\omega - b) \\
&\quad \times [\tilde{D}^0(\omega - a - b) - \tilde{D}^0(a + b - \omega)] \\
&\equiv I_4 .
\end{aligned} \tag{A.31}$$

$$\begin{aligned}
S_k + S_o + S_p &= 2 \int_0^{1/2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \int_0^{1/2} d\epsilon_5 D^0(\epsilon_5) h(\omega - \epsilon_5) f(\epsilon_1 + \epsilon_5 - \omega) \\
&\quad \times [H(\epsilon_1 + \epsilon_5) + H(\epsilon_1 - \omega)] \\
&\equiv I_5 .
\end{aligned} \tag{A.32}$$

$$\begin{aligned}
S_l + S_j + S_n &= \int_0^{1/2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \int_0^{1/2} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_2) D^0(\omega - \epsilon_1 - \epsilon_2) \\
&\quad \times [2H(\epsilon_2 - \omega)H(\epsilon_1 + \epsilon_2) + H(\omega - \epsilon_2)H(\epsilon_1 + \epsilon_2) \\
&\quad \quad + H(\epsilon_1 - \omega)H(\epsilon_2 - \omega)] \\
&\equiv I_6 .
\end{aligned} \tag{A.33}$$

(A.34)

Numerisch berechnet werden muß also,

$$\text{Im } \Sigma^{(4b)} = \pi U^4 (I_1 + \dots + I_6) . \tag{A.35}$$

Auch hier ist es wichtig, daß man die Integrale an den kritischen Stellen aufspaltet. Im Gegensatz zu $\text{Im } \Sigma^{(4a)}(\omega)$ verschwindet $\text{Im } \Sigma^{(4b)}(\omega)$ erst bei $\omega = 5/2 W$.

I. $0 \leq \omega < 0.5$

Einschränkende Bedingung an I_1 : $0 \leq \omega - a - b \leq 0.5$

$$\Rightarrow I_1 = - \int_0^\omega db \int_0^{\omega-b} da h(a) h(b) \tilde{D}^0(\omega - a - b) l(b - \omega) l(a - \omega) . \tag{A.36}$$

Einschränkende Bedingung an I_2 : $0 \leq \omega - \epsilon_1 \leq 1$

$$\begin{aligned} \Rightarrow I_2 = & -2 \int_0^\omega d\epsilon_1 \left(\int_0^{\epsilon_1} db + \int_{\epsilon_1}^\omega db + \int_\omega^1 db \right) h(b) D^0(\epsilon_1) h(\omega - \epsilon_1) \\ & \times [f(b - \omega) f(b - \epsilon_1) + f(b + \omega) f(b + \epsilon_1)]. \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

Einschränkende Bedingung an I_3 : $0 \leq \omega - a \leq 0.5$

$$\begin{aligned} \Rightarrow I_3 = & 2 \int_0^\omega da h(a) \tilde{D}^0(\omega - a) \int_0^{1/2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) f(\epsilon_1 + a) \\ & \times [H(\epsilon_1 + a - \omega) + H(\omega + \epsilon_1)]. \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

Einschränkende Bedingungen an I_4 :

$$\begin{aligned} & (\omega - 0.5 \leq a, b \leq \omega) \quad \wedge \quad (\omega - b \leq a \leq 0.5 + \omega - b) \\ \text{sowie} \quad & (\omega - 0.5 \leq a, b \leq \omega) \quad \wedge \quad (\omega - b - 0.5 \leq a \leq \omega - b) \end{aligned} \quad (\text{A.39})$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow I_4 = & -\pi^2 \int_0^\omega db \int_{\omega-b}^\omega da h(a) h(b) \tilde{D}^0(\omega - a) \tilde{D}^0(\omega - b) \\ & \times \tilde{D}^0(\omega - a - b) \\ & + \pi^2 \int_0^\omega db \int_0^{\omega-b} da h(a) h(b) \tilde{D}^0(\omega - a) \tilde{D}^0(\omega - b) \\ & \times \tilde{D}^0(\omega - a - b). \end{aligned} \quad (\text{A.40})$$

Einschränkende Bedingung an I_5 : $0 \leq \omega - \epsilon_2 \leq 1.0$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow I_5 &= 2 \int_0^\omega d\epsilon_2 \int_0^{\omega-\epsilon_2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) D^0(\epsilon_2) h(\omega - \epsilon_2) f(\epsilon_1 + \epsilon_2 - \omega) \\
&\quad \times [H(\epsilon_1 + \epsilon_2) + H(\epsilon_1 - \omega)] \\
&\quad + 2 \int_0^\omega d\epsilon_2 \int_{\omega-\epsilon_2}^{1/2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) D^0(\epsilon_2) h(\omega - \epsilon_2) f(\epsilon_1 + \epsilon_2 - \omega) \\
&\quad \times [H(\epsilon_1 + \epsilon_2) + H(\epsilon_1 - \omega)]. \tag{A.41}
\end{aligned}$$

Einschränkende Bedingung an I_6 : $0 \leq \omega - \epsilon_1 - \epsilon_2 \leq 0.5$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow I_6 &= \int_0^\omega d\epsilon_2 \int_0^{\omega-\epsilon_2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) D^0(\epsilon_2) \tilde{D}^0(\omega - \epsilon_1 - \epsilon_2) \\
&\quad \times [2H(\epsilon_2 - \omega)H(\epsilon_1 + \epsilon_2) + H(\omega - \epsilon_2)H(\epsilon_1 + \epsilon_2) \\
&\quad \quad + H(\epsilon_1 - \omega)H(\epsilon_2 - \omega)]. \tag{A.42}
\end{aligned}$$

II. $0.5 \leq \omega < 1.0$

$$\begin{aligned}
I_1 &= - \int_0^{\omega-1/2} db \int_{\omega-b-1/2}^{\omega-b} da h(a)h(b) \tilde{D}^0(\omega - a - b) l(b - \omega) l(a - \omega) \\
&\quad - \int_{\omega-1/2}^\omega db \int_0^{\omega-b} da h(a)h(b) \tilde{D}^0(\omega - a - b) l(b - \omega) l(a - \omega). \tag{A.43}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_2 &= -2 \int_0^{1/2} d\epsilon_1 \left(\int_0^{\epsilon_1} db + \int_{\epsilon_1}^\omega db + \int_\omega^1 db \right) h(b) D^0(\epsilon_1) h(\omega - \epsilon_1) \\
&\quad \times [f(b - \omega) f(b - \epsilon_1) + f(b + \omega) f(b + \epsilon_1)]. \tag{A.44}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_3 &= 2 \int_0^{1/2} d\epsilon_1 \int_{\omega-1/2}^\omega da h(a) \tilde{D}^0(\omega - a) D^0(\epsilon_1) f(\epsilon_1 + a) \\
&\quad \times [H(\epsilon_1 + a - \omega) + H(\omega + \epsilon_1)]. \tag{A.45}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I_4 = & -\pi^2 \int_{\omega-1/2}^{1/2} db \int_{\omega-b}^{\omega} da h(a) h(b) \tilde{D}^0(\omega-a) \tilde{D}^0(\omega-b) \tilde{D}^0(\omega-a-b) \\
 & - \pi^2 \int_{1/2}^{\omega} db \int_{\omega-1/2}^{1/2+\omega-b} da h(a) h(b) \tilde{D}^0(\omega-a) \tilde{D}^0(\omega-b) \tilde{D}^0(\omega-a-b) \\
 & + \pi^2 \int_{\omega-1/2}^{1/2} db \int_{\omega-1/2}^{\omega-b} da h(a) h(b) \tilde{D}^0(\omega-a) \tilde{D}^0(\omega-b) \tilde{D}^0(\omega-a-b) . \quad (\text{A.46})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I_5 = & 2 \int_{\omega-1/2}^{1/2} d\epsilon_2 \int_0^{\omega-\epsilon_2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) D^0(\epsilon_2) h(\omega-\epsilon_2) f(\epsilon_1+\epsilon_2-\omega) \\
 & \quad \times [H(\epsilon_1+\epsilon_2) + H(\epsilon_1-\omega)] \\
 & + 2 \int_{\omega-1/2}^{1/2} d\epsilon_2 \int_{\omega-\epsilon_2}^{1/2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) D^0(\epsilon_2) h(\omega-\epsilon_2) f(\epsilon_1+\epsilon_2-\omega) \\
 & \quad \times [H(\epsilon_1+\epsilon_2) + H(\epsilon_1-\omega)] \\
 & + 2 \int_0^{\omega-1/2} d\epsilon_2 \int_0^{1/2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) D^0(\epsilon_2) h(\omega-\epsilon_2) f(\epsilon_1+\epsilon_2-\omega) \\
 & \quad \times [H(\epsilon_1+\epsilon_2) + H(\epsilon_1-\omega)] . \quad (\text{A.47})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I_6 = & \int_{\omega-1/2}^{1/2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \int_0^{\omega-\epsilon_2} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_2) \tilde{D}^0(\omega-\epsilon_1-\epsilon_2) \\
 & \quad \times [2H(\omega-\epsilon_2)H(\epsilon_1+\epsilon_2) + H(\epsilon_2-\omega)H(\epsilon_1+\epsilon_2) \\
 & \quad \quad + H(\epsilon_1-\omega)H(\epsilon_2-\omega)] \\
 & + \int_0^{\omega-1/2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \int_{\omega-\epsilon_2-1/2}^{1/2} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_2) \tilde{D}^0(\omega-\epsilon_1-\epsilon_2) \\
 & \quad \times [2H(\omega-\epsilon_2)H(\epsilon_1+\epsilon_2) + H(\epsilon_2-\omega)H(\epsilon_1+\epsilon_2) \\
 & \quad \quad + H(\epsilon_1-\omega)H(\epsilon_2-\omega)] . \quad (\text{A.48})
 \end{aligned}$$

III. $1.0 \leq \omega < 1.5$

$$\begin{aligned}
I_1 = & - \int_0^{\omega-1} db \int_{\omega-b-1/2}^1 da h(a)h(b)\tilde{D}^0(\omega-a-b)l(b-\omega)l(a-\omega) \\
& - \int_{\omega-1}^{\omega-1/2} db \int_{\omega-b-1/2}^{\omega-b} da h(a)h(b)\tilde{D}^0(\omega-a-b)l(b-\omega)l(a-\omega) \\
& - \int_{\omega-1/2}^1 db \int_0^{\omega-b} da h(a)h(b)\tilde{D}^0(\omega-a-b)l(b-\omega)l(a-\omega). \quad (\text{A.49})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_2 = & -2 \int_{\omega-1}^{1/2} d\epsilon_1 \left(\int_0^{\epsilon_1} db + \int_{\epsilon_1}^1 db \right) h(b)D^0(\epsilon_1)h(\omega-\epsilon_1) \\
& \times [f(b-\omega)f(b-\epsilon_1) + f(b+\omega)f(b+\epsilon_1)]. \quad (\text{A.50})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_3 = & 2 \int_0^{1/2} d\epsilon_1 \int_{\omega-1/2}^1 da h(a)\tilde{D}^0(\omega-a)D^0(\epsilon_1)f(\epsilon_1+a) \\
& \times [H(\epsilon_1+a-\omega) + H(\omega+\epsilon_1)]. \quad (\text{A.51})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_4 = & -\pi^2 \int_{\omega-1/2}^1 db \int_{\omega-1/2}^{1/2+\omega-b} da h(a)h(b)\tilde{D}^0(\omega-a)\tilde{D}^0(\omega-b)\tilde{D}^0(\omega-a-b). \quad (\text{A.52})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_5 = & 2 \int_{\omega-1}^{1/2} d\epsilon_2 \int_0^{1/2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1)D^0(\epsilon_2)h(\omega-\epsilon_2)f(\epsilon_1+\epsilon_2-\omega) \\
& \times [H(\epsilon_1+\epsilon_2) + H(\epsilon_1-\omega)]. \quad (\text{A.53})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_6 = & \int_{\omega-1}^{1/2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \int_{\omega-\epsilon_2-1/2}^{1/2} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_2)\tilde{D}^0(\omega-\epsilon_1-\epsilon_2) \\
& \times [2H(\omega-\epsilon_2)H(\epsilon_1+\epsilon_2) + H(\epsilon_2-\omega)H(\epsilon_1+\epsilon_2) \\
& \quad + H(\epsilon_1-\omega)H(\epsilon_2-\omega)]. \quad (\text{A.54})
\end{aligned}$$

IV. $1.5 \leq \omega < 2.0$

$$\begin{aligned}
 I_1 = & \int_{\omega-1}^1 db \int_{\omega-b-1/2}^{\omega-b} da h(a)h(b)\tilde{D}^0(\omega-a-b)l(b-\omega)l(a-\omega) \\
 & + \int_{\omega-3/2}^{\omega-1} db \int_{\omega-b-1/2}^1 da h(a)h(b)\tilde{D}^0(\omega-a-b)l(b-\omega)l(a-\omega) .
 \end{aligned} \tag{A.55}$$

 V. $2.0 \leq \omega < 2.5$

$$I_1 = \int_{\omega-3/2}^1 db \int_{\omega-b-1/2}^1 da h(a)h(b)\tilde{D}^0(\omega-a-b)l(b-\omega)l(a-\omega) . \tag{A.56}$$

A.2 Berechnung von $\text{Im} \Sigma^{(4c)}(\omega)$

$$\begin{aligned}
 K(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4, \omega_1, \omega_4) = & - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} \\
 & \times \left(\frac{1}{\omega_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4 + i\eta_3} \frac{1}{\omega_2 - \omega_4 - \epsilon_1 + i\eta_1} \frac{1}{\omega_2 + \omega_1 - \omega_4 + \epsilon_2 - i\eta_2} \right. \\
 & + \frac{1}{\omega_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4 + i\eta_3} \frac{1}{\omega_2 - \omega_4 + \epsilon_1 - i\eta_1} \frac{1}{\omega_2 + \omega_1 - \omega_4 - \epsilon_2 + i\eta_2} \\
 & - \frac{1}{\omega_2 + \epsilon_3 + \epsilon_4 - i\eta_3} \frac{1}{\omega_2 - \omega_4 - \epsilon_1 + i\eta_1} \frac{1}{\omega_2 + \omega_1 - \omega_4 - \epsilon_2 + i\eta_2} \\
 & - \frac{1}{\omega_2 + \epsilon_3 + \epsilon_4 - i\eta_3} \frac{1}{\omega_2 - \omega_4 + \epsilon_1 - i\eta_1} \frac{1}{\omega_2 + \omega_1 - \omega_4 - \epsilon_2 + i\eta_2} \\
 & - \frac{1}{\omega_2 + \epsilon_3 + \epsilon_4 - i\eta_3} \frac{1}{\omega_2 - \omega_4 - \epsilon_1 + i\eta_1} \frac{1}{\omega_2 + \omega_1 - \omega_4 + \epsilon_2 - i\eta_2} \\
 & \left. + \frac{1}{\omega_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4 + i\eta_3} \frac{1}{\omega_2 - \omega_4 + \epsilon_1 - i\eta_1} \frac{1}{\omega_2 + \omega_1 - \omega_4 + \epsilon_2 - i\eta_2} \right) .
 \end{aligned} \tag{A.57}$$

Wendet man den Residuensatz an, ergibt sich für $K(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4, \omega_1, \omega_4)$

$$\begin{aligned}
& K(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4, \omega_1, \omega_4) \\
&= i \left(\frac{1}{\omega_4 - \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4 - \omega_1 + i\eta_3} \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_1 + \epsilon_2 - i\eta_1} \right. \\
&\quad - \frac{1}{\omega_4 - \epsilon_1 - \epsilon_3 - \epsilon_4 + i\eta_3} \frac{1}{\omega_1 - \epsilon_1 - \epsilon_2 + i\eta_1} \\
&\quad + \frac{1}{\omega_4 + \epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 - i\eta_3} \frac{1}{\omega_4 + \epsilon_2 + \epsilon_3 + \epsilon_4 - \omega_1 - i\eta_2} \\
&\quad + \frac{1}{\omega_4 + \epsilon_2 + \epsilon_3 + \epsilon_4 - \omega_1 - i\eta_3} \frac{1}{\omega_1 - \epsilon_1 - \epsilon_2 + i\eta_1} \\
&\quad - \frac{1}{\omega_4 + \epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 - i\eta_3} \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_1 + \epsilon_2 - i\eta_2} \\
&\quad \left. - \frac{1}{\omega_4 - \epsilon_1 - \epsilon_3 - \epsilon_4 + i\eta_1} \frac{1}{\omega_4 - \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4 - \omega_1 + i\eta_2} \right). \quad (\text{A.58})
\end{aligned}$$

Damit kann $\Pi_V(\omega_1)$ weiter berechnet werden als,

$$\begin{aligned}
\Pi_V(\omega_1) &= \int_0^\infty d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \cdots \int_0^\infty d\epsilon_6 D^0(\epsilon_6) \int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega_4}{2\pi} K(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \epsilon_4, \omega_1, \omega_4) \\
&\quad \times \left(\frac{1}{\omega_4 - \epsilon_5 + i\eta_5} \frac{1}{\omega_4 - \omega_1 - \epsilon_6 + i\eta_6} \right. \\
&\quad + \frac{1}{\omega_4 + \epsilon_5 - i\eta_5} \frac{1}{\omega_4 - \omega_1 + \epsilon_6 - i\eta_6} \\
&\quad + \frac{1}{\omega_4 + \epsilon_5 - i\eta_5} \frac{1}{\omega_4 - \omega_1 - \epsilon_6 + i\eta_6} \\
&\quad \left. + \frac{1}{\omega_4 - \epsilon_5 + i\eta_5} \frac{1}{\omega_4 - \omega_1 + \epsilon_6 - i\eta_6} \right) \quad (\text{A.59})
\end{aligned}$$

$$\equiv S_I + S_{II} + S_{III} + S_{IV},$$

wobei die ω_4 -Integration der Summanden S_I bis S_{IV} wie üblich mittels Residuensatz durchgeführt wird. Dadurch erhält man

$$S_{\text{I}} = \int_0^\infty d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \cdots \int_0^\infty d\epsilon_6 D^0(\epsilon_6) \times \left(\frac{1}{\omega_1 + \epsilon_1 - \epsilon_2 - i\eta_1 + i\eta_2} \frac{1}{\epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_5} \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_6} \right) \quad (\text{A.60})$$

$$+ \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_1 - \epsilon_2 - i\eta_1 + i\eta_2} \frac{1}{\omega_1 - \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4 - \epsilon_5 + i\eta_5} \frac{1}{\epsilon_2 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_6} \quad (\text{A.61})$$

$$+ \frac{1}{\omega_1 - \epsilon_1 - \epsilon_2 + i\eta_1} \frac{1}{\omega_1 - \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4 - \epsilon_5 + i\eta_5} \frac{1}{\epsilon_2 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_6} \quad (\text{A.62})$$

$$+ \left. \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_1 + \epsilon_2} \frac{1}{\epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_5} \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_6} \right) \quad (\text{A.63})$$

$$= S_{\text{II}}. \quad (\text{A.64})$$

$$S_{\text{III}} = \int_0^\infty d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \cdots \int_0^\infty d\epsilon_6 D^0(\epsilon_6) \times \left(\frac{1}{\omega_1 + \epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_6} \frac{1}{\epsilon_2 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_6} \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_5 + \epsilon_6} \right) \quad (\text{A.65})$$

$$+ \frac{1}{\omega_1 - \epsilon_1 - \epsilon_2 + i\eta_1} \frac{1}{\epsilon_2 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_6} \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_5 + \epsilon_6} \quad (\text{A.66})$$

$$- \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_1 + \epsilon_2} \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_6} \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_5 + \epsilon_6} \quad (\text{A.67})$$

$$+ \frac{1}{\epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_5} \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_5} \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_5 + \epsilon_6} \quad (\text{A.68})$$

$$- \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_5} \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_1 + \epsilon_2} \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_5 + \epsilon_6} \quad (\text{A.69})$$

$$+ \left. \frac{1}{\epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_5} \frac{1}{\omega_1 - \epsilon_1 - \epsilon_2 + i\eta_1} \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_5 + \epsilon_6} \right). \quad (\text{A.70})$$

$$S_{\text{IV}} = 2 \int_0^\infty d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \cdots \int_0^\infty d\epsilon_6 D^0(\epsilon_6) \times \left(\frac{1}{\omega_1 - \epsilon_1 - \epsilon_2 + i\eta_1} \frac{1}{\omega_1 - \epsilon_5 - \epsilon_6 + i\eta_5} \frac{1}{\omega_1 - \epsilon_1 - \epsilon_3 - \epsilon_4 - \epsilon_6 + i\eta_3} \right) \quad (\text{A.71})$$

$$+ \frac{1}{\epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_5} \frac{1}{\omega_1 - \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4 - \epsilon_5 + i\eta_2} \frac{1}{\omega_1 - \epsilon_5 - \epsilon_6 + i\eta_6} \quad (\text{A.72})$$

$$+ \left. \frac{1}{\epsilon_1 + \epsilon_3 + \epsilon_4 + \epsilon_5} \frac{1}{\omega_1 + \epsilon_1 + \epsilon_2} \frac{1}{\omega_1 - \epsilon_5 - \epsilon_6 + i\eta_6} \right). \quad (\text{A.73})$$

Manche dieser Terme haben für positive ω_1 keinen Imaginärteil. Das sind (A.63), (A.65), (A.67) bis (A.69). Andere lassen sich nach einer Umbenennung der Indizes zusammenfassen, so daß man letztendlich Gleichung (3.68) erhält.

Es folgt die Aufspaltung der Integrale an kritischen Stellen aus Gleichung (3.69).

I. $0 \leq \omega < 0.5$

Einschränkende Bedingung an J_1 : $0 \leq \omega_1 - \epsilon - y \leq 0.5$

$$\Rightarrow J_1 = -2\pi \int_0^{\omega_1} d\epsilon \int_0^{\omega_1 - \epsilon} dy h(y) D^0(\epsilon) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon - y) f(\omega_1 - \epsilon) f(\epsilon + y). \quad (\text{A.74})$$

Einschränkende Bedingung an J_2 : $0 \leq \omega_1 - \epsilon \leq 0.5$, sowie eine Unstetigkeit von f an der Stelle $y = \omega_1 - \epsilon$

$$\Rightarrow J_2 = 4\pi \int_0^{\omega_1} d\epsilon \left(\int_0^{\omega_1 - \epsilon} dy + \int_{\omega_1 - \epsilon}^1 dy \right) h(y) D^0(\epsilon) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon) \times f(\epsilon_2 + y - \omega_1) f(\epsilon + y). \quad (\text{A.75})$$

Einschränkende Bedingung an J_3 : $0 \leq \omega_1 - \epsilon - y \leq 0.5$

$$\Rightarrow J_3 = 4\pi \int_0^{\omega_1} d\epsilon \int_0^{\omega_1 - \epsilon} dy h(y) D^0(\epsilon) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon - y) f(\epsilon - \omega_1) f(\epsilon + y). \quad (\text{A.76})$$

Einschränkende Bedingung an J_4 : $0 \leq \omega_1 - \epsilon_1 \leq 0.5$

$$\Rightarrow J_4 = -4\pi \int_0^{\omega_1} d\epsilon_1 \int_0^{1/2} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_1) D^0(\epsilon_2) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon_1) f(\omega_1 + \epsilon_2) H(\epsilon_1 + \epsilon_2). \quad (\text{A.77})$$

Einschränkende Bedingung an J_5 : $0 \leq \omega_1 - \epsilon_1 \leq 0.5$, sowie eine Unstetigkeit von f an der Stelle $\epsilon_1 = \omega_1$

$$\Rightarrow J_5 = -4\pi \int_0^{\omega_1} d\epsilon_1 \left(\int_0^{\omega_1} d\epsilon_2 + \int_{\omega_1}^{1/2} d\epsilon_2 \right) D^0(\epsilon_1) D^0(\epsilon_2) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon_1) \times f(\epsilon_1 - \omega_1) H(\epsilon_1 + \epsilon_2 - \omega_1). \quad (\text{A.78})$$

Einschränkende Bedingung an J_6 : $0 \leq \omega_1 - \epsilon_1 - \epsilon_2 \leq 1.0$

$$\begin{aligned} \Rightarrow J_6 = & -2\pi \int_0^{\omega_1} d\epsilon_1 \int_0^{\omega_1 - \epsilon_1} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_1) D^0(\epsilon_2) f(\epsilon_1 - \omega_1) \\ & \times f(\epsilon_2 - \omega_1) h(\omega_1 - \epsilon_1 - \epsilon_2). \end{aligned} \quad (\text{A.79})$$

Einschränkende Bedingung an J_7 :

$$(0 \leq \omega_1 - \epsilon_1, \omega_1 - \epsilon_2 \leq 0.5) \quad \wedge \quad (0 \leq \omega_1 - \epsilon_1 - \epsilon_2 \leq 1.0).$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow J_7 = & 2\pi^3 \int_0^{\omega_1} d\epsilon_1 \int_0^{\omega_1 - \epsilon_1} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_1) D^0(\epsilon_2) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon_1) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon_2) \\ & \times h(\omega_1 - \epsilon_1 - \epsilon_2). \end{aligned} \quad (\text{A.80})$$

II. $0.5 \leq \omega < 1.0$

$$\begin{aligned} J_1 = & -2\pi \int_0^{\omega_1 - 1/2} d\epsilon \int_{\omega_1 - \epsilon - 1/2}^{\omega_1 - \epsilon} dy h(y) D^0(\epsilon) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon - y) f(\omega_1 - \epsilon) f(\epsilon + y) \\ & - 2\pi \int_{\omega_1 - 1/2}^{1/2} d\epsilon \int_0^{\omega_1 - \epsilon} dy h(y) D^0(\epsilon) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon - y) f(\omega_1 - \epsilon) f(\epsilon + y). \end{aligned} \quad (\text{A.81})$$

$$\begin{aligned} J_2 = & 4\pi \int_{\omega_1 - 1/2}^{1/2} d\epsilon \left(\int_0^{\omega_1 - \epsilon} dy + \int_{\omega_1 - \epsilon}^1 dy \right) h(y) D^0(\epsilon) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon) \\ & \times f(\epsilon_2 + y - \omega_1) f(\epsilon + y). \end{aligned} \quad (\text{A.82})$$

$$\begin{aligned} J_3 = & 4\pi \int_0^{\omega_1 - 1/2} d\epsilon \int_{\omega_1 - \epsilon - 1/2}^{\omega_1 - \epsilon} dy h(y) D^0(\epsilon) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon - y) f(\epsilon - \omega_1) f(\epsilon + y) \\ & + 4\pi \int_{\omega_1 - 1/2}^{1/2} d\epsilon \int_0^{\omega_1 - \epsilon} dy h(y) D^0(\epsilon) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon - y) f(\epsilon - \omega_1) f(\epsilon + y). \end{aligned} \quad (\text{A.83})$$

$$J_4 = -4\pi \int_{\omega_1-1/2}^{1/2} d\epsilon_1 \int_0^{1/2} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_1) D^0(\epsilon_2) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon_1) f(\omega_1 + \epsilon_2) H(\epsilon_1 + \epsilon_2) . \quad (\text{A.84})$$

$$J_5 = -4\pi \int_{\omega_1-1/2}^{1/2} d\epsilon_1 \int_0^{1/2} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_1) D^0(\epsilon_2) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon_1) f(\epsilon_1 - \omega_1) \times H(\epsilon_1 + \epsilon_2 - \omega_1) . \quad (\text{A.85})$$

$$J_6 = -2\pi \int_0^{\omega_1-1/2} d\epsilon_1 \int_0^{1/2} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_1) D^0(\epsilon_2) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon_1) f(\epsilon_1 - \omega_1) \times f(\epsilon_2 - \omega_1) h(\omega_1 - \epsilon_1 - \epsilon_2) - 2\pi \int_{\omega_1-1/2}^{1/2} d\epsilon_1 \int_{\omega_1-\epsilon_1-1/2}^{\omega_1-\epsilon_1} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_1) D^0(\epsilon_2) f(\epsilon_1 - \omega_1) \times f(\epsilon_2 - \omega_1) h(\omega_1 - \epsilon_1 - \epsilon_2) . \quad (\text{A.86})$$

$$J_7 = -2\pi^3 \int_{\omega_1-1/2}^{1/2} d\epsilon_1 \int_{\omega_1-1/2}^{\omega_1-\epsilon_1} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_1) D^0(\epsilon_2) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon_1) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon_2) \times h(\omega_1 - \epsilon_1 - \epsilon_2) . \quad (\text{A.87})$$

III. $1.0 \leq \omega < 1.5$

$$J_1 = -2\pi \int_0^{\omega_1-1} d\epsilon \int_{\omega_1-\epsilon-1/2}^1 dy h(y) D^0(\epsilon) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon - y) f(\omega_1 - \epsilon) f(\epsilon + y) - 2\pi \int_{\omega_1-1}^{1/2} d\epsilon \int_{\omega_1-\epsilon-1/2}^{\omega_1-\epsilon} dy h(y) D^0(\epsilon) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon - y) f(\omega_1 - \epsilon) f(\epsilon + y) . \quad (\text{A.88})$$

$$\begin{aligned}
J_3 &= 4\pi \int_0^{\omega_1-1} d\epsilon \int_{\omega_1-\epsilon-1/2}^1 dy h(y) D^0(\epsilon) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon - y) f(\epsilon - \omega_1) f(\epsilon + y) \\
&+ 4\pi \int_{\omega_1-1}^{1/2} d\epsilon \int_{\omega_1-\epsilon-1/2}^{\omega_1-\epsilon} dy h(y) D^0(\epsilon) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon - y) f(\epsilon - \omega_1) f(\epsilon + y) .
\end{aligned} \tag{A.89}$$

$$\begin{aligned}
J_6 &= -2\pi \int_0^{\omega_1-1} d\epsilon_1 \int_{\omega_1-\epsilon_1-1}^{1/2} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_1) D^0(\epsilon_2) f(\epsilon_1 - \omega_1) \\
&\quad \times f(\epsilon_2 - \omega_1) h(\omega_1 - \epsilon_1 - \epsilon_2) \\
&- 2\pi \int_{\omega_1-1}^{1/2} d\epsilon_1 \int_0^{1/2} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_1) D^0(\epsilon_2) f(\epsilon_1 - \omega_1) \\
&\quad \times f(\epsilon_2 - \omega_1) h(\omega_1 - \epsilon_1 - \epsilon_2) .
\end{aligned} \tag{A.90}$$

IV. $1.5 \leq \omega < 2.0$

$$J_1 = -2\pi \int_{\omega_1-3/2}^{1/2} d\epsilon \int_{\omega_1-\epsilon-1/2}^1 dy h(y) D^0(\epsilon) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon - y) f(\omega_1 - \epsilon) f(\epsilon + y) . \tag{A.91}$$

$$J_3 = 4\pi \int_{\omega_1-3/2}^{1/2} d\epsilon \int_{\omega_1-\epsilon-1/2}^1 dy h(y) D^0(\epsilon) \tilde{D}^0(\omega_1 - \epsilon - y) f(\epsilon - \omega_1) f(\epsilon + y) . \tag{A.92}$$

$$\begin{aligned}
J_6 &= -2\pi \int_{\omega_1-3/2}^{1/2} d\epsilon_1 \int_{\omega_1-\epsilon_1-1}^{1/2} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_1) D^0(\epsilon_2) f(\epsilon_1 - \omega_1) \\
&\quad \times f(\epsilon_2 - \omega_1) h(\omega_1 - \epsilon_1 - \epsilon_2) .
\end{aligned} \tag{A.93}$$

A.3 Berechnung von $\text{Im } \Sigma^{(4d)}(\omega)$

Für das Frequenzintegral ergibt sich

$$\begin{aligned} \Sigma^{(4d)}(\omega) &= -U^4 \int_0^1 da h(a) \int_0^{3/2} db s(b) \int_0^{1/2} dx d(x) \\ &\quad \times \left\{ \frac{1}{(\omega - x - a + i\eta_1)(x + b)} - \frac{1}{(\omega - a - b + i\eta_1)(x + b)} \right. \\ &\quad - \frac{1}{(\omega + a + b)(\omega + a + x)} + \frac{1}{(\omega + a + x)(x + b)} \\ &\quad \left. - \frac{1}{(\omega + a + b)(x + b)} + \frac{1}{(\omega - a - b + i\eta_2)(\omega - a - x + i\eta_3)} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.94})$$

$$\begin{aligned} &= \pi U^4 \int_0^1 da h(a) \int_0^{3/2} db s(b) \int_0^{1/2} dx d(x) \\ &\quad \times \left(\delta(\omega - x - b) - \delta(\omega - a - b) \right) \left(\frac{1}{x + b} + \frac{1}{x - b} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.95})$$

$$\begin{aligned} &= \pi U^4 \int_0^{1/2} dx d(x) h(\omega - x) [S(x) - S(-x)] \\ &\quad - \pi U^4 \int_0^{3/2} db s(b) h(\omega - b) \int_{-1/2}^{1/2} dx \frac{d(x)}{x + b}, \end{aligned} \quad (\text{A.96})$$

wobei

$$\begin{aligned} \int_{-1/2}^{1/2} dx \frac{d(x)}{x + b} &= \frac{D^0(x)}{b + x} \Big|_{-1/2}^{1/2} - \int_{-1/2}^{1/2} dx D^0(x) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{x + b} \right) = -l'(b) \\ &= \begin{cases} 8 & \text{für } 0 \leq b \leq 1/2 \\ 8 - 8b/\sqrt{b^2 - 1/4} & \text{für } b > 1/2 \end{cases}. \end{aligned} \quad (\text{A.97})$$

Für die numerische Berechnung wird folgende Aufteilung vorgenommen,

$0 \leq \omega < 0.5$

$$\begin{aligned} \Sigma^{(4d)}(\omega) &= \pi U^4 \int_0^{\omega} dx d(x) h(\omega - x) [S(x) - S(-x)] \\ &\quad + 8\pi U^4 \int_0^{\omega} db s(b) h(\omega - b). \end{aligned} \quad (\text{A.98})$$

$0.5 \leq \omega < 1.0$

$$\begin{aligned} \Sigma^{(4d)}(\omega) &= \pi U^4 \int_0^{1/2} dx d(x) h(\omega - x) [S(x) - S(-x)] \\ &\quad + 8\pi U^4 \int_0^{1/2} db s(b) h(\omega - b) \\ &\quad + 8\pi U^4 \int_{1/2}^{\omega} db s(b) h(\omega - b) \left(1 - \frac{b}{\sqrt{b^2 - 1/4}}\right). \end{aligned} \quad (\text{A.99})$$

$1.0 \leq \omega < 1.5$

$$\begin{aligned} \Sigma^{(4d)}(\omega) &= \pi U^4 \int_{\omega-1}^{1/2} dx d(x) h(\omega - x) [S(x) - S(-x)] \\ &\quad + 8\pi U^4 \int_{\omega-1}^{1/2} db s(b) h(\omega - b) \\ &\quad + 8\pi U^4 \int_{1/2}^{\omega} db s(b) h(\omega - b) \left(1 - \frac{b}{\sqrt{b^2 - 1/4}}\right). \end{aligned} \quad (\text{A.100})$$

$1.5 \leq \omega < 2.5$

$$\Sigma^{(4d)}(\omega) + 8\pi U^4 \int_{\omega-1}^{3/2} db s(b) h(\omega - b) \left(1 - \frac{b}{\sqrt{b^2 - 1/4}}\right). \quad (\text{A.101})$$

B Kontrollrechnungen in der Zeitdomäne

B.1 Ringdiagramm

Setzt man in (3.40) für jede Greenfunktion

$$G^0(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} G^0(t) \quad (\text{B.1})$$

ein, erhält man folgende Integrale in der Zeitdomäne, die als Probe für die Integration im Frequenzraum dienen,

$$\begin{aligned} \Sigma^{(4a)}(\omega) &= -\frac{U^4}{(2\pi)^4} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 G^0(t_1) \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_7 G^0(t_7) e^{i\omega t_1} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_4 \\ &\quad e^{i\omega_1(t_1+t_3+t_5+t_7)} e^{i\omega_2(t_2+t_3)} e^{i\omega_3(t_4+t_5)} e^{i\omega_4(t_6+t_7)} \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

$$= U^4 \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} G^0(t) \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 [G^0(t_1)]^2 [G^0(t_2)]^2 [G^0(t-t_1-t_2)]^2. \quad (\text{B.3})$$

Im letzten Schritt wird die δ -Funktion

$$\delta(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega t} \quad (\text{B.4})$$

verwendet. Zur Berechnung des Dreifach-Integrals benötigt man einen expliziten analytischen Ausdruck für $G^0(t)$. Über die Rücktransformation kommt man auf

$$G^0(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G^0(\omega) e^{-i\omega t} = -i \left[\theta(t) \int_0^{\infty} d\epsilon D^0(\epsilon) e^{-i\epsilon t} - \theta(-t) \int_{-\infty}^0 d\epsilon D^0(\epsilon) e^{-i\epsilon t} \right], \quad (\text{B.5})$$

wobei im letzten Schritt der Residuensatz angewendet wird. Da auf dem Bethe-Gitter $D^0(\epsilon) = D^0(-\epsilon)$ gilt, muss man wegen $G^0(t) = -G^0(-t)$ die Greenfunktion nur für $t > 0$ berechnen und kommt mit (2.26) auf

$$\operatorname{Re} G^0(t > 0) = -\frac{2}{\pi} \int_0^1 dx \sqrt{1-x^2} \sin\left(-\frac{1}{2}xt\right), \quad (\text{B.6})$$

$$\operatorname{Im} G^0(t > 0) = -\frac{2}{\pi} \int_0^1 dx \sqrt{1-x^2} \cos\left(-\frac{1}{2}xt\right). \quad (\text{B.7})$$

Der Realteil der einfachen Greenfunktion wird für $t \leq 100$ numerisch berechnet und in 10^{-2} Schritten tabelliert. Für $t > 100$ nutzt man die Asymptotische Reihe der Struve-Funktion

$$H_1(z) = \frac{z}{\sqrt{\pi}\Gamma(3/2)} \int_0^1 dt \sqrt{1-t^2} \sin(z t), \quad (\text{B.8})$$

siehe ABRAMOWITZ--STEGUN [49], Gleichung (12.1.6) und (12.1.31). Denn es gilt

$$\operatorname{Re} G^0(t > 0) = -\frac{2}{t} H_1(t/2). \quad (\text{B.9})$$

Nach Gleichung (9.1.20) aus [49] gilt für $\nu = 1$ für den Imaginärteil der folgende Zusammenhang mit der Besselfunktion $J_1(z)$,

$$\operatorname{Im} G^0(t > 0) = -\frac{2}{t} J_1(t/2). \quad (\text{B.10})$$

Damit kann man für den Imaginärteil die Polynom-Näherung der Besselfunktion (9.4.4) und (9.4.6) aus [49] nutzen.

B.2 Zweite-Ordnungsdiagramm mit Vertexkorrektur

Wie bei $\Sigma^{(4a)}$ (ω) wird jede Greenfunktion durch ihre Fourier-Transformierte (B.1) ersetzt und die dazugehörigen Exponentialfunktionen nach Frequenzen sortiert,

$$\Sigma^{(4b)}(\omega) = \frac{U^4}{(2\pi)^4} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_7 G^0(t_1) \dots G^0(t_7) \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_4$$

$$e^{i\omega(t_1+t_2+t_3)} e^{-i\omega_1(t_1+t_2+t_5)} e^{i\omega_2(t_4+t_5)} e^{-i\omega_3(t_2+t_3+t_7)} e^{i\omega_4(t_6+t_7)} \quad (\text{B.11})$$

$$= U^4 \int_{-\infty}^{\infty} dt g_b(t) e^{i\omega t} \quad (\text{B.12})$$

$$= 2iU^4 \int_0^{\infty} dt g_b(t) \sin(\omega t), \quad (\text{B.13})$$

wobei

$$g_b(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 G^0(t_1) G^0(t_2) G^0(t - t_1 - t_2) [G^0(t_1 + t_2)]^2 [G^0(t - t_1)]^2. \quad (\text{B.14})$$

Im vorletzten Schritt werden die Frequenzintegrale ausgeführt sowie die resultierenden δ -Funktionen eingesetzt. Zudem werden die Integrationsvariablen in t , t_1 und t_2 umbenannt. Verfährt man ebenso mit dem Diagramm

$$D^{(4b)}(\omega) =$$

$$(\text{B.15})$$

erhält man nach Gebrauch der Feynman-Regeln den folgenden Ausdruck,

$$\begin{aligned}
 D^{(4b)}(\omega) &= -\frac{U^4}{(2\pi)^4} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_4 G^0(\omega - \omega_1) G^0(\omega - \omega_1 - \omega_2) \\
 &\quad \times G^0(\omega - \omega_1 - \omega_2 - \omega_3) G^0(\omega_4) G^0(\omega_1 + \omega_4) \\
 &\quad \times G^0(\omega_1 + \omega_2 + \omega_4) G^0(\omega_4 - \omega_3) \quad (B.16)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= -\frac{U^4}{(2\pi)^4} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_7 G^0(t_1) \dots G^0(t_7) \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_4 \\
 &\quad \times e^{i\omega(t_1+t_2+t_3)} e^{-i\omega_1(t_1+t_2+t_3-t_5-t_6)} e^{-i\omega_2(t_2+t_3-t_6)} \\
 &\quad \times e^{-i\omega_3(t_3+t_7)} e^{i\omega_4(t_4+t_5+t_6+t_7)} . \quad (B.17)
 \end{aligned}$$

Nach dem Einsetzen der δ -Bedingungen ergibt sich,

$$\begin{aligned}
 D^{(4b)}(\omega) &= -U^4 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_3 e^{i\omega(t_1+t_2+t_3)} G^0(t_1) G^0(t_2) G^0(t_3) \\
 &\quad \times G^0(-t_1 - t_2) G^0(t_1) \dots G^0(t_2 + t_3) G^0(-t_3) . \quad (B.18)
 \end{aligned}$$

Mit den Substitutionen

$$\begin{aligned}
 x_1 &= t - t_3 \\
 x_2 &= t_1 + t_3 - t \quad (B.19)
 \end{aligned}$$

erhält man

$$\begin{aligned}
 D^{(4b)}(\omega) &= U^4 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 e^{i\omega t} \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 G^0(-x_1) G^0(-x_2) G^0(t_2 - x_1 - x_2) \\
 &\quad \times [G^0(x_1 + x_2)]^2 [G^0(t - x_1)]^2 \quad (B.20)
 \end{aligned}$$

$$= U^4 \int_{-\infty}^{\infty} dt g_b(t) e^{i\omega t} . \quad (B.21)$$

Damit hat man die Äquivalenz der Diagramme der zweiten Zeile von (3.34) gezeigt. Um die Äquivalenz der Diagramme in den verbleibenden Zeilen zu zeigen, geht man analog vor.

B.3 Zweite-Ordnungsdiagramm mit Vertexkorrektur im Ring

Bei der Kontrollrechnung für $\Sigma^{(4c)}(\omega)$ geht man analog zu $\Sigma^{(4a)}(\omega)$ und $\Sigma^{(4b)}(\omega)$ vor und kommt auf folgenden Term

$$\Sigma^{(4c)}(\omega) = U^4 \int_{-\infty}^{\infty} dt g_c(t) e^{i\omega t} \quad (\text{B.22})$$

$$= 2iU^4 \int_0^{\infty} dt g_c(t) \sin(\omega t) G^0(t), \quad \text{wobei} \quad (\text{B.23})$$

$$g_c(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 G^0(t_1) G^0(t_2) G^0(t+t_1) G^0(t+t_2) [G^0(t+t_1+t_2)]^2. \quad (\text{B.24})$$

B.4 Zweite-Ordnungsdiagramm mit Selbstenergieeinschub

Das Diagramm (3.77) kann auch interpretiert werden als

$$\Sigma^{(4d)}(\omega) = \frac{U^2}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \left(G^{(2)}(\omega - \omega_1) - G^0(\omega - \omega_1) \right) \cdot \frac{2\pi}{i} \Pi^0(\omega_1). \quad (\text{B.25})$$

Analog zu $\Sigma^{(2)}(\omega)$ gilt für $\omega > 0$, siehe (3.15) und (3.16),

$$\text{Im} \Sigma_{\text{ret}}^{(4d)}(\omega) = -\pi U^4 \int_0^{\omega} d\epsilon_1 \left(D^{(2)}(\epsilon_1) - D^0(\epsilon_1) \right) \int_0^{\omega - \epsilon_1} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_1) D^0(\omega - \epsilon_1 - \epsilon_2) \quad (\text{B.26})$$

$$= -U^2 \int_0^{\omega} d\epsilon \text{Im} \Pi^0(\omega - \epsilon) \Delta D(\epsilon), \quad \text{wobei} \quad (\text{B.27})$$

$$\Delta D(\epsilon) \equiv D^{(2)}(\epsilon) - D^0(\epsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ G^{(2)}(\epsilon) - G^0(\epsilon) \right\} \quad (\text{B.28})$$

$$\Delta D(\epsilon) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left\{ \Sigma^{(2)}(\epsilon) \int_{-\infty}^{\infty} dE D^0(E) \left(\frac{\theta(E)}{\epsilon - E + i\eta_1} + \frac{\theta(-E)}{\epsilon - E - i\eta_1} \right) \right. \\ \left. \times \left(\frac{\theta(E)}{\epsilon - E + i\eta_2} + \frac{\theta(-E)}{\epsilon - E - i\eta_2} \right) \right\} \quad (\text{B.29})$$

$$\equiv -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left\{ \Sigma^{(2)}(\epsilon) \mathcal{D}(\epsilon) \right\}. \quad (\text{B.30})$$

Für $\mathcal{D}(\epsilon)$ kann man herleiten

$$\mathcal{D}(\epsilon) = \int_0^{\infty} dE D^0(E) \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{1}{\epsilon - E + i\eta} + \frac{1}{\epsilon + E - i\eta} \right). \quad (\text{B.31})$$

Integriert (B.31) man partiell und setzt die Dirac-Identitäten (2.74) sowie (C.2) ein erhält man

$$\mathcal{D}(\epsilon) = a(\epsilon) + i\pi \left(2\delta(\epsilon) D^0(0) + d(\epsilon) \right), \quad \text{wobei} \quad (\text{B.32})$$

$$a(\epsilon) = -\mathcal{P} \int_0^{\infty} dE d(E) \left(\frac{1}{\epsilon - E} + \frac{1}{\epsilon + E} \right). \quad (\text{B.33})$$

Damit erhält man für $\operatorname{Im} \Sigma_{\text{ret}}^{(4d)}(\omega)$

$$\operatorname{Im} \Sigma_{\text{ret}}^{(4d)}(\omega) = U^2 \int_0^{\omega} d\epsilon \operatorname{Im} \Pi^0(\omega - \epsilon) \left(\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \Sigma^{(2)}(\epsilon) \cdot a(\epsilon) + \operatorname{Re} \Sigma^{(2)}(\epsilon) d(\epsilon) \right). \quad (\text{B.34})$$

Die Berechnung von $a(\epsilon)$ ergibt

$$a(\epsilon) = -\frac{32}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{1/2} dy \frac{y^2}{y^2 - \epsilon^2} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 - 4y^2}} = -\frac{32}{\pi} \left(\frac{\pi}{4} + 2\epsilon^2 \mathcal{P} \int_0^{\pi/2} \frac{d\varphi}{\cos^2(\varphi) - 4\epsilon^2} \right) \\ = \begin{cases} -8 & \text{für } \epsilon \leq 1/2 \\ 8 \left(2\epsilon / \sqrt{4\epsilon^2 - 1} - 1 \right) & \text{für } \epsilon > 1/2 \end{cases}. \quad (\text{B.35})$$

C Hilfsfunktionen

In diesem Anhang werden die Hilfsfunktionen definiert, die man für die Berechnung der Selbstenergiendiagramme in vierter Ordnung benötigt. Für die Berechnung der Frequenz-Integrale braucht man oft die abgeschnittene Zustandsdichte

$$\tilde{D}^0(x) \equiv \theta(x) D^0(x), \quad (\text{C.1})$$

sowie die Ableitung der Zustandsdichte.

$$d(x) \equiv \frac{\partial D^0(x)}{\partial x} = -\frac{16}{\pi} \frac{x}{\sqrt{1-4x^2}} \quad \text{für } |x| < 1/2. \quad (\text{C.2})$$

Es folgen zwei Funktionen, die die nichtwechselwirkende Greenfunktion beschreiben.

$$f(\omega) \equiv \mathcal{P} \int_0^{1/2} d\epsilon \frac{D^0(\epsilon)}{\omega + \epsilon} = \frac{4}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{1/2} d\epsilon \frac{\sqrt{1-(2\epsilon)^2}}{\omega + \epsilon} \quad (\text{C.3})$$

erfüllt

$$\frac{\pi}{4} f(|\omega| \leq 1/2) = \pi\omega - 1 - \sqrt{1-4\omega^2} \ln \left| \frac{2\omega}{1 + \sqrt{1-4\omega^2}} \right|, \quad (\text{C.4})$$

$$\frac{\pi}{4} f(|\omega| > 1/2) = \pi\omega - 1 - \text{sgn}(\omega) \sqrt{4\omega^2 - 1} \arccos \left(\frac{1}{2\omega} \right). \quad (\text{C.5})$$

Weiterhin gilt

$$\begin{aligned} I(\omega) &\equiv f(\omega) - f(-\omega) = \text{Re } G_\sigma^0(\omega) \\ &= 8\omega \left(1 - \text{sgn}(\omega) \theta(|\omega| - 1/2) \sqrt{1 - \frac{1}{(4\omega^2)}} \right). \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

Als Nächstes wird der Imaginärteil der einfachen Polarisationsblase ausgedrückt durch $\text{Im}\Pi^0(\omega) = \pi h(\omega)$ für $|\omega| \leq 1$ mit

$$h(x) \equiv \int_0^{1/2} d\epsilon_1 \int_0^{1/2} d\epsilon_2 \delta(x - \epsilon_1 - \epsilon_2) D^0(\epsilon_1) D^0(\epsilon_2) \quad (\text{C.7})$$

$$\begin{aligned} &= \theta\left(\frac{1}{2} - x\right) \theta(x) \int_0^x dy D^0\left(\frac{x+y}{2}\right) D^0\left(\frac{x-y}{2}\right) \\ &+ \theta\left(x - \frac{1}{2}\right) \theta(1-x) \int_0^{1-x} dy D^0\left(\frac{x+y}{2}\right) D^0\left(\frac{x-y}{2}\right). \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

Dies resultiert aus der Überlegung, daß für eine beliebige Funktion $F(x)$ gilt

$$\int_0^{1/2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \int_0^{1/2} d\epsilon_2 D^0(\epsilon_2) F(\epsilon_1 + \epsilon_2) = \int_0^1 dx F(x) h(x). \quad (\text{C.9})$$

Die Funktion h ist numerisch für $0 \leq x \leq 1$ in einer Schrittweite von 10^{-4} berechnet worden und liegt tabelliert vor. Ebenso läßt sich auf die Hilfsfunktion $H(\omega)$ zurückgreifen, die die Hilberttransformierte von $h(x)$ ist,

$$H(x) \equiv \int_0^1 da \frac{h(a)}{x+a}. \quad (\text{C.10})$$

Für Berechnungen zu $\Sigma^{(4d)}(\omega)$ benötigt man folgende alternative Darstellungen des freien Polarisationspropagators und der Selbstenergie in der zweiten Ordnung,

$$\Pi^0(\omega_1) = - \int_0^1 da h(a) \left(\frac{1}{\omega_1 - a + i\eta} - \frac{1}{\omega_1 + a - i\eta} \right), \quad (\text{C.11})$$

Mit der weiteren Hilfsfunktion, die dem Imaginärteil der Selbstenergie in zweiter Ordnung entspricht,

$$s(b) \equiv \int_0^{1/2} d\epsilon_1 D^0(\epsilon_1) \cdots \int_0^{1/2} d\epsilon_3 D^0(\epsilon_3) \delta(b - \epsilon_1 - \epsilon_2 - \epsilon_3) \quad (\text{C.12})$$

erhält man für die Selbstenergie in der zweiten Ordnung

$$\Sigma^{(2)}(\omega) = U^2 \int_0^{3/2} db s(b) \left(\frac{1}{\omega + b - i\eta} + \frac{1}{\omega - b + i\eta} \right). \quad (\text{C.13})$$

Die Funktion $s(b)$ aus (C.12) muß numerisch berechnet werden. Dazu nimmt man die Koordinatentransformation $x = \epsilon_1 + \epsilon_2$ vor und erhält

$$s(b) = \int_0^1 dx h(x) \tilde{D}^0(b - x). \quad (\text{C.14})$$

Um eine möglichst hohe numerische Genauigkeit zu erreichen, wird diese Funktion wie folgt berechnet,

$$0 \leq b < 0.5$$

$$s(b) = \int_0^b dx h(x) \tilde{D}^0(b - x), \quad (\text{C.15})$$

$$0.5 \leq b < 1.0$$

$$s(b) = \int_{b-1/2}^b dx h(x) \tilde{D}^0(b - x), \quad (\text{C.16})$$

$$1.0 \leq b \leq 1.5$$

$$s(b) = \int_{b-1/2}^1 dx h(x) \tilde{D}^0(b - x). \quad (\text{C.17})$$

Zuletzt wird noch die Hilbert-Transformierte der Funktion $s(b)$ eingeführt,

$$S(x) \equiv \int_0^{3/2} db \frac{s(b)}{\omega + x}. \quad (\text{C.18})$$

Literaturverzeichnis

- [1] N. F. MOTT: *Metal-Insulator Transitions*, 2nd edition (Taylor und Francis, London, 1990).
- [2] E. H. LIEB und F. Y. WU: Phys. Rev. Lett. 20, (1968) 1445.
- [3] W. METZNER und D. VOLLHARDT: Phys. Rev. Lett. 62, (1989) 324.
- [4] W. F. BRINKMAN und T. M. RICE: Phys. Rev. B 2, (1970) 4302.
- [5] F. GEBHARD: *The Mott Metal-Insulator Transition* (Springer, Berlin, 1997).
- [6] F. GEBHARD und A. E. RUCKENSTEIN: Phys. Rev. Lett. 68, (1992) 244; P. A. BARES und F. GEBHARD: Europhys. Lett. 29, (1995) 573.
- [7] A. GEORGES, G. KOTLIAR, W. KRAUTH and M. J. ROZENBERG: Rev. Mod. Phys. 68, (1996) 13.
- [8] R. M. NOACK und F. GEBHARD: Phys. Rev. Lett. 82, (1999) 1915.
- [9] J. SCHLIPE, M. JARRELL, P. G. J. VAN DONGEN, N. BLÜMER, S. KEHREIN, T. PRUSCHKE und D. VOLLHARDT: Phys. Rev. Lett. 82, (1999) 4890.
- [10] M. J. ROZENBERG, R. CHITRA und G. KOTLIAR: Phys. Rev. Lett. 83, (1999) 3498.
- [11] W. KRAUTH: Phys. Rev. B 62, (2000) 6860.
- [12] R. BULLA: Phys. Rev. Lett. 83, (1999) 163.
- [13] R. BULLA und M. POTTHOFF: Eur. Phys. J. B 13, (2000) 257; Y. Ōno, R. BULLA, A. C. HEWSON und M. POTTHOFF: Eur. Phys. J. B 22, (2001) 283.
- [14] R. BULLA, T. A. COSTI und D. VOLLHARDT: Phys. Rev. B 64, (2001) 045103.
- [15] M. J. ROZENBERG, G. KOTLIAR und X. Y. ZHANG: Phys. Rev. B 49, (1994) 10181.

- [16] T. PRUSCHKE, D. L. COX und M. JARRELL: *Europhys. Lett.* 21, (1993) 593; *Phys. Rev. B* 47, (1993) 3553; M. JARRELL, J. K. FREERICKS und T. PRUSCHKE: *Phys. Rev. B* 51, (1995) 11704.
- [17] D. E. LOGAN, M. P. EASTWOOD und M. A. TUSCH: *J. Phys. Cond. Matt.* 9 (1997) 4211.
- [18] M. CAFFAREL und W. KRAUTH: *Phys. Rev. Lett.* 72, (1994) 1545.
- [19] Y. ŌNO, R. BULLA, A. C. HEWSON und M. POTTHOFF: *Eur. Phys. J. B* 22, (2001) 283.
- [20] M. J. ROZENBERG, G. MÖLLER und G. KOTLIAR: *Mod. Phys. Lett. B* 8 (1994), 535.
- [21] See also Q. Si, M. J. ROZENBERG, G. KOTLIAR und A. E. RUCKENSTEIN: *Phys. Rev. Lett.* 72, (1994) 2761; M. J. ROZENBERG, G. KOTLIAR, H. KAJÜTER, G. A. THOMAS, D. H. RAPKINE, J. M. HONIG und P. METCALF: *Phys. Rev. Lett.* 75, (1995) 105.
- [22] E. KALINOWSKI und F. GEBHARD: *J. Low Temp. Phys.* 126, (2002) 979.
- [23] M. EASTWOOD, F. GEBHARD, E. KALINOWSKI, S. NISHIMOTO und R. NOACK: *cond-mat/0303085* (2003).
- [24] N. W. ASHCROFT und N. D. MERMIN: *Solid State Physics* (Holt-Saunders, Philadelphia, 1976).
- [25] H. OVERHOF und P. THOMAS: *Electronic Transport in Hydrogenated Amorphous Semiconductors* (Springer, Berlin, 1989).
- [26] J. HUBBARD: *Proc. Roy. Soc. London Ser. A* 276, (1963) 238; *ibid.* 277, (1963) 237.
- [27] P. W. ANDERSON: *Phys. Rev.* 115, (1959) 2.
- [28] N. F. MOTT: *Proc. Phys. Soc. A* 62, (1949) 416.
- [29] R. BROUT: *Phys. Rev.* 118, (1960) 2169.
- [30] C. J. THOMPSON: *Comm. Math. Phys.* 36, (1974) 255.
- [31] E. N. ECONOMOU: *Green's Functions in Quantum Physics* (Springer, Berlin, Heidelberg, 1979) (1974) 255.
- [32] A. L. FETTER und J. D. WALECKA: *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, New York, 1971).

- [33] A. B. MIGDAL: Sov. Phys. JETP 5, (1957) 333; J. M. LUTTINGER und J. C. WARD: Phys. Rev. 118, (1960) 1417; J. M. LUTTINGER: Phys. Rev. 119, (1960) 1153; *ibid.* 121, (1961) 942.
- [34] U. BRANDT und C. MIELSCH: Z. Phys. B 75, (1989) 365, *ibid.* 79, (1990) 295.
- [35] M. JARRELL: Phys. Rev. Lett. 69, (1962) 168.
- [36] S. SCHÄFER und D. E. LOGAN: Phys. Rev. B 63, (2001) 45122.
- [37] E. MÜLLER-HARTMANN: Z. Phys. B 74, (1989) 507; *ibid.* 76, (1989) 211.
- [38] F. GEBHARD: private Mitteilung (2002).
- [39] K. YOSIDA und K. YAMADA: Prog. Theor. Phys. Suppl. 46, (1970) 244; K. YAMADA: Prog. of Theor. Phys. 53, (1975) 970.
- [40] J. K. FREERICKS: Phys. Rev. B 50, (1994) 403; J. K. FREERICKS und M. JARRELL: Phys. Rev. B 50, (1994) 6939.
- [41] S. KUCKENBURG: private Mitteilung (2001).
- [42] W. H. PRESS, B. P. FLANNERY, S. A. TEUKOLSKY und W. T. VETTERLING: *Numerical Recipes* (Cambridge University Press, Cambridge, 1986).
- [43] I. PESCHEL, X. WANG, M. KAULKE und K. HALLBERG (eds.): *Density-Matrix Renormalization*, (Springer, Berlin, 1999).
- [44] E. JECKELMANN: Phys. Rev. B 66, (2002) 045114.
- [45] E. JECKELMANN und S. NISHIMOTO: in Vorbereitung (2003).
- [46] M. P. EASTWOOD: Ph.D. thesis, Oxford University (1998), unpublished.
- [47] S. NISHIMOTO: private Mitteilung (2003).
- [48] R. NOACK: private Mitteilung (2003).
- [49] M. ABRAMOWITZ und I. A. STEGUN: *Handbook of Mathematical Functions* (Dover Publications, New York, 1972).

Danke

An erster Stelle möchte ich meinem Doktorvater Herrn Prof. Dr. Florian Gebhard ein großes und herzliches Dankeschön aussprechen. Trotz der Wissenslücken im Bereich Festkörperphysik und Vielteilchentheorie am Ende meines Lehramtsstudiums, hat er mich in sein Team aufgenommen und mir ein anspruchsvolles Dissertationsthema gestellt. Seine Begeisterung für die Physik im allgemeinen und das Hubbard-Modell im besonderen hat mir über so manche Durststrecke hinweggeholfen. Seine konstruktive Anleitung sowie kompetente, unterstützende und stets wohlwollende Betreuung waren mir eine sehr große Hilfe. Nicht zuletzt danke ich ihm auch für die kritische Durchsicht dieser Arbeit. Besonders bedanken möchte ich mich bei ihm dafür, daß er so viel Geduld und Verständnis für mich aufgebracht hat, vor allem in der Zeit meiner Schwangerschaft und nach der Geburt meiner Tochter.

Herrn Prof. Dr. Peter Thomas danke ich ganz herzlich, daß er die Rolle des Zweitgutachters bereitwillig übernommen und immer wieder Zeit gefunden hat, sich bei mir nach dem Stand der Dinge zu erkundigen.

Ich bedanke mich beim Graduiertenkolleg „Optoelektronik mesoskopischer Halbleiter“ für die Finanzierung meiner Promotion und die zahlreichen Veranstaltungen, bei denen ich nicht nur die Gelegenheit hatte, interessante Physik kennenzulernen sondern auch viele neue Bekanntschaften zu knüpfen. An die intensive fachliche Kommunikation und die gesellige Zeit in Rækkeve und Riezlern werde ich mich immer gerne zurückerinnern.

Ferner möchte ich den Herrn Dr. Satoshi Nishimoto, Dr. Ralf Bulla, Dr. Reinhard Noack und Dr. Michael Eastwood danken, daß sie mir ihre Daten und einige Abbildungen zur Verfügung gestellt haben.

Freundlicherweise hat mir Herr Dr. Steffen Kuckenburg bei der numerischen Integration beratend zur Seite gestanden und immer ein offenes Ohr für Fragen aus der Welt des Programmierens gehabt. Dafür bin ich ihm zu großem Dank verpflichtet.

Mein Dank gilt auch Herrn Prof. Dr. Wolfgang Bestgen, der die Entwicklung dieser Arbeit immer mit großem Interesse verfolgt und mir in schwierigen Zeiten oft Mut zugesprochen hat. Mit geschultem Blick hat er diese Arbeit Korrektur gelesen.

Bei der gesamten Arbeitsgruppe „Vielteilchentheorie“ möchte ich mich für das freundliche und offene Arbeitsklima und die netten Kaffeerunden bedanken.

Mit seinen wertvollen Tips, vor allem \LaTeX und typographische Fragen betreffend, hat Martin Paech einen nicht unerheblichen Beitrag zur optischen Erscheinung dieser Arbeit geleistet. Ich danke ihm herzlichst für die Zeit und Mühe, die er in dieses Projekt gesteckt hat, und die vielen anregenden Gespräche über Physik, Musik und einiges mehr.

Meiner Freundin und langjährigen Weggefährtin Dr. Catrin Ellenberger gebührt ein dickes Dankeschön. War die Frustration manchmal groß und hat nichts geklappt, hat sie tröstende und aufmunternde Worte gefunden. In fachlichen und persönlichen Nöten war sie eine der wichtigsten Anlaufstellen für mich. Bedanken möchte ich mich auch für die zahlreichen schönen (Büro-) Stunden, die wir miteinander verbracht haben.

Daß ich mich immer gerne an meine Doktorandenzeit erinnern werde, liegt auch an den Dingen des Lebens, die kein Verständnis der Festkörperphysik voraussetzen. Die zahlreichen Spieleabende, Kochrunden, Kinobesuche, Kneipenabende und Bastelaktionen mit meinen guten Freunden haben diese Phase meines Lebens in Marburg bereichert und unvergesslich gemacht. Kerstin, Catrin, Thorsten, Markus L., Martin B., Florian H., Marc, Jörg, Karin, Rüdiger, Martin P., Anja, Holger, Horst, Ecki, Nils, Isa, Markus K., Tina, Mirko, Silke, Niklas und Lasse dafür sage ich Euch Danke.

Meiner lieben Familie möchte ich auch ein ganz großes Dankeschön aussprechen, denn in ihr habe ich meinen Halt. Meinen Eltern danke ich ganz besonders dafür, daß sie mich in jeglicher Art und Weise während des Studiums und der Promotion unterstützt und gefördert haben. Hätten sie und auch meine Schwiegereltern sich nicht bereitwillig das Babysitten übernommen, wäre diese Arbeit vielleicht nie fertig geworden.

Zum Schluß gilt mein besonderer Dank meinem Mann Felix, einfach für alles.

Wissenschaftlicher Werdegang

Persönliche Angaben

Sandra Ju-Sil Mahler, geb. Bierau

geboren am 15. Juli 1974 in Darmstadt
Staatsangehörigkeit: deutsch

Schulbildung

1980 - 1993 Grundschule und Gymnasium
Abschluß: Abitur

Studium

10.1993 - 07.1999 Studium der Physik und Mathematik für das Lehramt
an Gymnasien an der Philipps-Universität Marburg

27.10.1995 Zwischenprüfung

09.1998 - 01.1999 Staatsexamensarbeit: „Die Entstehung der Materie im
Rahmen des inflationären Szenariums“
Betreuer: Prof. Dr. W. Bestgen

07.06.1999 Letzter Tag der mündlichen Prüfungen für das erste
Staatsexamen

Promotion

Seit 15.09.1999 Anfertigung einer Dissertation in der Arbeitsgruppe
Vielteilchentheorie
Betreuer: Prof. Dr. F. Gebhard

09.1999 - 12.2002 Stipendiatin im Graduiertenkolleg „Optoelektronik
mesoskopischer Halbleiter“

05.2002 - 10.2002 Mutterschutz und Elternzeit

Lehrtätigkeit in Marburg

- 10.1995 - 07.1998 Betreuung verschiedener Tutorien zu Vorlesungen des Fachbereichs Mathematik
- 10.1999 - 02.2002 Mehrfache Betreuung physikalischer Praktika für Studenten der Physik, Biologie und Chemie