

Eine neue Methode zur Berechnung der Energieskalen von Metallen mit Störstellen

Von der Fakultät Physik der Universität Stuttgart zur
Erlangung der Würde eines Doktors der Naturwissenschaften
(Dr. rer. nat.) genehmigte Abhandlung

vorgelegt von

KURT FISCHER

aus Kleve am Niederrhein

Hauptberichter:	Prof. Dr. P. FULDE
Mitberichter:	Prof. Dr. M. WAGNER
Tag der Einreichung:	20. Mai 1996
Tag der mündlichen Prüfung:	12. Juli 1996

MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR PHYSIK KOMPLEXER SYSTEME DRESDEN
Mai 1996

Inhalt

1	Einleitung	1
2	Das Anderson-Modell	7
3	Methoden zur Ermittlung der Energieskalen	13
4	Diagrammtechnik für das Anderson-Modell	17
4.1	Erzeugendes Funktional	19
4.2	Erzeugendes Funktional: f -Propagator	21
4.3	Erzeugendes Funktional: Näherungen	22
5	Energieskalen	25
5.1	Universalität	25
5.2	Klassifikation der Skelettdiagramme	26
5.3	Diskussion anderer Diagrammklassen	27
5.4	Physikalische Bedeutung der Energieskalen	30
5.4.1	Spezifische Wärme	31
5.4.2	Magnetische Suszeptibilität	32
5.5	Die Abrikosov-Suhl-Resonanz	33
6	Skalierungsgleichungen	37
6.1	Erste Skalierungsgleichung	38
6.2	Zweite Skalierungsgleichung	38
6.2.1	Beitrag der Skelettdiagramme zweiter Ordnung	39
6.2.2	Beitrag der Skelettdiagramme höherer Ordnung	40
6.3	Universalität	41
7	Relevante Skelettdiagramme bei $T=0$	43
7.1	NCA-Differentialgleichungen	43

7.2	NCA-Grundzustandsenergie	45
7.3	Statische magnetische Suszeptibilität: <i>Crossover</i>	48
7.3.1	Universalität	49
7.3.2	Kleine Magnetfelder	50
7.3.3	Große Magnetfelder	51
7.3.4	Wilson-Zahl	52
7.4	Vergleich mit der Post-NCA	53
7.5	Statische magnetische Suszeptibilität: nichtmagnetischer Limes	54
7.6	f -Besetzung	55
7.6.1	Nichtmagnetischer Limes	55
7.6.2	Magnetischer Limes	55
8	Skalierungsgleichungen: Bandstruktur	57
8.1	Skalierungsgleichungen für eine singuläre Zustandsdichte	58
9	Coqblin-Schrieffer-Modell	61
9.1	Erzeugendes Funktional	62
9.2	Analogon der NCA	63
9.3	Energieskala	64
9.3.1	Beitrag der Skelettdiagramme zweiter Ordnung	64
9.3.2	Beitrag der Skelettdiagramme höherer Ordnung	65
9.4	NCA bei $T=0$	66
10	Zwei magnetische Konfigurationen: Das $f^1 - f^2$-Problem	69
10.1	Modell	70
10.2	Erzeugendes Funktional und Skalierungsgleichungen	72
10.3	Statische magnetische Suszeptibilität der NCA für $T=0$	74
10.4	Charakter der niederenergetischen Anregungen	77
11	Zusammenfassung	81
12	Ausblick	85

A	Diskussion der Lösungsmethoden für Störstellensysteme	87
A.1	<i>Poor man's scaling</i>	87
A.2	Numerische Renormierungsgruppe	88
A.3	Diagrammatische Renormierungsgruppe	91
A.4	Bethe-Ansatz	94
A.5	$1/N$ -Entwicklung	95
B	Bedeutung der Spektraldichten $\rho_{0,m}$ und $\hat{\rho}_{0,m}$	97
C	Orthogonalitäts-Katastrophe	99
D	Diagrammtechnik	101
D.1	Diagrammtechnik für die freie Energie	101
D.2	Selbstenergien und Skelettdiagramme	103
D.3	Diagrammtechnik für den f -Propagator	104
E	Beweis der Sattelpunktseigenschaft	107
F	Beweis der Integraldarstellung für den f-Propagator	109
G	Abhängigkeit des erzeugenden Funktionals von V, ϵ_f und T	113
G.1	Abhängigkeit von der Hybridisierung V	113
G.2	Abhängigkeit von der f^0 - f^1 -Energiedifferenz ϵ_f	114
G.3	Abhängigkeit von der Temperatur T	114
H	Beweis der $1/D$-Klassifikation	117
I	Skalierungsgleichungen im Magnetfeld	123
J	Was ist die Grundzustandsenergie der NCA?	125
K	Abhängigkeit des erzeugenden Funktionals von J, T und D	127
K.1	Abhängigkeit von der Stärke J der Wechselwirkung	127

K.2	Abhängigkeit von der Temperatur T	128
K.3	Abhängigkeit von der Bandbreite D	128
Literatur		136
Abbildungen		137
Danksagung		139
Lebenslauf		141

Was gibt es ab?
fragte er ungeduldig.
Na, was also gibt das Bild ab?
Mußt es doch sagen können.
Wenn du überlegst: nicht ohne Rede;
wenn du siehst: nicht ohne Worte.
Was also?

(Siegfried Lenz, *Deutschstunde*)

Kapitel 1

Einleitung

In vielen Metallen, in denen die Leitungselektronen an Störstellen mit stark korrelierten, lokalisierten Elektronen koppeln, beobachtet man folgende Phänomene [1, 2, 3, 4, 5, 6]:

Unterhalb einer charakteristischen Temperatur T_K verläuft der Störstellen-Anteil C der spezifischen Wärme proportional zur Temperatur T :

$$C = \gamma T \quad .$$

Der Störstellen-Anteil χ der statischen magnetischen Suszeptibilität wird temperaturunabhängig:

$$\chi(T) \rightarrow \chi(0) \quad .$$

Das Sommerfeld-Wilson-Verhältnis [7]

$$R = \frac{\pi^2 k_B^2}{3\mu_{\text{eff}}^2} \frac{\chi(0)}{\gamma}$$

ist von der Größenordnung eins. Typische Beispiele sind Legierungen mit seltenen Erden oder Aktiniden sowie Übergangsmetallen.

Die endliche, temperaturunabhängige magnetische Suszeptibilität deutet darauf hin, daß der Grundzustand ein Singulett ist, daß also die magnetischen Momente der Störstellen bei tiefen Temperaturen abgeschirmt werden. Bei hohen Temperaturen $T \gg T_K$ zeigt der Beitrag der Störstellen zur magnetischen Suszeptibilität und zur spezifischen Wärme das gewohnte Verhalten von Systemen mit lokalen Momenten: In der spezifischen Wärme beobachtet man Kristallfeld-Anregungen, und die magnetische Suszeptibilität zeigt Curie-Verhalten.

Messungen des Störstellen-Anteils des elektrischen Widerstands zeigen als Funktion der Temperatur ein Minimum bei T_K , dessen Lage nicht von der Konzentration der Störstellen abhängt [1]. Diese Energie $k_B T_K$ charakterisiert das niederenergetische Anregungsspektrum des Systems.

Während die Fermi-Energie ϵ_F beziehungsweise die Bandbreite eines Metalls größenordnungsmäßig einigen 10^4 Kelvin entspricht, kann die charakteristische Temperatur T_K je nach Material um viele Größenordnungen von einigen Hundert Kelvin bis zu Hunderstel Kelvin schwanken [3]. Dabei ist kT_K stets viel kleiner als ϵ_F .

Für solche magnetische Störstellen in einem Metall findet man für tiefe Temperaturen *universelles Verhalten*. Die Energieskalen des Systems zeigen an, bei welcher Temperatur welche Freiheitsgrade zuerst einfrieren und welche Antwort das System unterhalb der jeweiligen Temperatur auf äußere Störungen gibt. Universelles Verhalten beobachtet man nur, wenn die auftretenden Energieskalen um Größenordnungen voneinander getrennt sind.

Dies bedeutet, daß der Störstellen-Anteil X jeder Observablen nur über *eine* Energieskala $k_B T_K$ von den elektronischen Eigenschaften des Systems wie der Breite $2D$ des Leitungsbandes, der Stärke der Wechselwirkung V zwischen Leitungsband und Störstelle, der Zustandsdichte ρ an der Fermi-Energie et cetera abhängt. Hat X die Dimension einer Energie, so bedeutet dies

$$X(T, D, V, \rho, \dots) = T \cdot g\left(\frac{T}{T_K}\right) \quad . \quad (1.1)$$

Dabei hängt die Form der Funktion g für tiefe Temperaturen nicht vom Material ab. Das bedeutet, daß bei geeigneter Skalierung die experimen-

tellen Daten für viele Systeme auf eine Kurve fallen [2].

Es stellen sich zwei Fragen:

1. Welche Energieskalen besitzt ein System mit Störstellen?
2. Wie kann man die Funktion g für den Störstellen-Anteil einer Observablen berechnen?

Das magnetische Moment der Störstelle wird bei tiefen Temperaturen von den Teilchen-Loch-Anregungen des Fermi-Sees abgeschirmt. Dies bedeutet, daß die Entartung des ionischen Grundzustands der Störstelle durch die Hybridisierung der Störstelle mit dem Leitungsband aufgehoben wird. Es handelt sich bei diesem Phänomen um einen Vielteilchen-Effekt. Der Grundzustand ist ein komplizierter Vielteilchen-Zustand, und die Energieskala $k_B T_K$ selbst hängt auf eine komplizierte Weise von den elektronischen Eigenschaften des Systems ab. Bei Metallen mit Störstellen mit stark korrelierten Elektronen wird dieser Übergang vom perturbativ zugänglichen Hochtemperatur-Bereich zum nichtperturbativ zugänglichen Niedertemperatur-Bereich *crossover* genannt. Das universelle Verhalten des Systems wird unter anderem durch die Wilson-Zahl charakterisiert ([8] und [9], Kapitel 4).

Alle Versuche, dieses Phänomen mit störungstheoretischen Methoden zu beschreiben, sind gescheitert [10]. Eine exakte Lösung des jeweiligen Störstellenmodells gelingt nur in den einfachsten Fällen, und selbst dann lassen sich nur Gleichgewichts-Eigenschaften, aber zum Beispiel keine Transportgrößen berechnen [10]. Daher benötigen wir eine flexible Sprache, die es gestattet, die Observablen des Systems systematisch näherungsweise zu berechnen. Eine solche ist die Diagrammtechnik. Dazu muß man unendlich viele Diagramme aufsummieren. Denn jede Störungstheorie endlicher Ordnung berücksichtigt nur endlich viele Teilchen-Loch-Anregungen des Fermi-Sees und hat daher bei tiefen Temperaturen Infrarot-Divergenzen [11].

Im Mittelpunkt dieser Dissertation steht die fundamentale theoretische Frage, welche Näherungen das universelle Verhalten richtig beschreiben.

Eine notwendige Bedingung hierfür ist, daß die näherungsweise berechneten Observablen mit der exakten Energieskala skalieren. Wie soll man aber diese Energieskala finden, wenn man das Modell noch nicht gelöst hat? In der Tat hat man bis heute von *keiner* Näherungslösung gezeigt, daß sie das universelle Verhalten von Störstellensystemen beschreibt!

Zentrales Ergebnis dieser Dissertation ist eine Methode zur exakten Bestimmung der Energieskalen sowie ein Kriterium dafür, wann eine Näherung das universelle Verhalten richtig beschreibt.

Dazu fassen wir die Diagramme zu bestimmten Diagrammklassen, den sogenannten Skelettdiagrammen, zusammen, und zeigen, daß nur die *Struktur* der Skelettdiagramme über die Energieskalen entscheidet, die so *exakt* berechnet werden können, ohne das Modell vorher diagonalisiert zu haben. Wir teilen die Skelettdiagramme a priori in Klassen ein, von denen jede richtig skaliert. So können wir uns auf wenige, *relevante* Skelettdiagramme beschränken. Die restlichen Skelettdiagramme sind für die Ermittlung der Energieskalen des Systems *irrelevant*.

Haben wir die relevanten Skelettdiagramme identifiziert, können wir die Funktion g in (1.1) näherungsweise erhalten. Dabei bleiben die exakten Energieskalen erhalten. Schließlich können wir abschätzen, welchen Beitrag die restlichen Diagramme ergeben.

Mit Hilfe der relevanten Skelettdiagramme können wir andere Verfahren zur Berechnung von Störstellensystemen auf ihre Konsistenz hin beurteilen. Wir zeigen in dieser Dissertation anhand des Anderson-Modells [9, 12], wie man dies erreicht. Dieses Modell beschreibt korrelierte, lokalisierte Elektronen, die mit itineranten, schwach korrelierten Leitungselektronen wechselwirken. Für dieses Modell leiten wir die bekannte Diagrammtechnik [13, 14] auf eine neue, kompakte Weise her. Wir verwenden einen nicht-perturbativen Zugang, der auf dem mit Skelettdiagrammen formulierten Variationsprinzip für ein Funktional der Einteilchen-Propagatoren beruht [15, 16, 17] (**Kapitel 4**).

In **Kapitel 5** geben wir die exakten Energieskalen für das Anderson-Modell an und diskutieren die physikalische Bedeutung der Energieskalen.

Wir beurteilen andere Näherungsverfahren auf ihre Konsistenz und zeigen, daß schon die relevanten Skelettdiagramme das universelle Verhalten der Störstelle gut beschreiben. Vor allem können wir zeigen, daß die mit Hilfe des Näherungsverfahrens der NCA berechnete Abrikosov-Suhl-Resonanz mit der exakten Kondo-Temperatur skaliert.

In **Kapitel 6** beweisen wir das zentrale Resultat dieser Dissertation. Wir zeigen, wie man die exakten Energieskalen für das Anderson-Modell erhält, und daß sowohl der Störstellen-Anteil der freien Energie als auch der von Korrelationsfunktionen mit diesen exakten Energieskalen skaliert. Wir zeigen, wie man die relevanten Skelettdiagramme für eine Observable ermittelt, und daß *alle* Observablen schon dann mit der exakten Energieskala skalieren, wenn man sich auf die relevanten Skelettdiagramme beschränkt.

Jede Theorie, die das universelle Verhalten von Störstellensystemen richtig beschreibt, muß auf denselben Zahlenwert für die Wilson-Zahl führen. Wir untersuchen für das Anderson-Modell das *crossover*-Phänomen bei $T = 0$ als Funktion des Magnetfelds mit Hilfe der relevanten Skelettdiagramme in **Kapitel 7**.

Mit unserer Methode läßt sich zum ersten Mal die Wilson-Zahl mit einer Diagrammtechnik bestimmen.

In **Kapitel 8** leiten wir ein Kriterium dafür ab, wie stark die Zustandsdichte des Leitungsbandes sich als Funktion der Energie ändern darf, damit die Energieskala der Störstelle über die Zustandsdichte nur von ihrem Wert an der Fermi-Energie abhängt, und welche Klasse von Skelettdiagrammen dann relevant ist.

In **Kapitel 9** zeigen wir, wie man für ein Modell mit Austausch-Wechselwirkung zwischen Leitungsband und Störstelle mittels Diagrammtechnik die Energieskalen zumindest im Grenzfall großer Entartung des energetisch niedrigsten Störstellen-Multipletts erhält, und warum die Ermittlung von Energieskalen für solche Modelle auf Schwierigkeiten stößt.

In **Kapitel 10** untersuchen wir das bisher nicht gelöste Modell für eine Störstelle, bei der die zwei energetisch niedrigsten Konfigurationen der Störstelle magnetisch sind. Wir zeigen, wie man mit Hilfe der rele-

vanten Skelettdiagramme Aussagen über den Grundzustand des Systems treffen kann. Außerdem erlaubt unsere Methode eine Beurteilung früherer Ergebnisse zu diesem Modell.

Wir möchten zunächst in **Kapitel 2** das Standardmodell für ein Metall mit Störstellen mit stark korrelierten Elektronen vorstellen und in **Kapitel 3** diskutieren, warum die schon existierenden Methoden bei der Beschreibung universellen Verhaltens von Störstellensystemen Schwierigkeiten haben.

Kapitel 2

Das Anderson-Modell

Gemeinsam ist den in Kapitel 1 vorgestellten Materialien, daß itinerante Leitungselektronen des Metalls mit lokalisierten, stark korrelierten Elektronen der Störstellen wechselwirken. Wir wollen hier als Störstellen die Lanthanide mit extrem lokalisierten f -Elektronen betrachten. Die Messungen zeigen praktisch keine Abhängigkeit der thermodynamischen Größen von der Konzentration der Störstellen. Man nimmt daher in erster Näherung an, daß die lokalisierten f -Elektronen auf verschiedenen Störstellen nicht miteinander wechselwirken. Dazu studiert man das universelle Verhalten einer einzigen Störstelle mit stark korrelierten Elektronen in einem Leitungsband.

Diese Situation findet sich zum Beispiel bei Cer-Störstellen in einem Metall. Die energetische Entartung der teilgefüllten f -Schalen wird durch die Hundschen Regeln [7] teilweise aufgehoben: Die energetisch am niedrigsten liegende f^1 -Konfiguration des Cer hat den Gesamtdrehimpuls $J = 5/2$ und ist danach $N = 6$ -fach entartet. Das energetisch darüber liegende Multiplett kann vernachlässigt werden [9]. Kristallfeld-Effekte werden hier ebenfalls nicht berücksichtigt. Sie reduzieren die Entartung der Multipletts und damit N .

Zur Beschreibung einer solchen Situation verwendet man als Standardmodell das Anderson-Modell [12]:

$$\begin{aligned}
H &= H_c + H_f + H_1 \\
H_c &= \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{p}} c_{\mathbf{p}\sigma}^+ c_{\mathbf{p}\sigma} \\
H_f &= \epsilon_f \cdot \sum_m f_m^+ f_m + U \sum_{m \neq n} f_m^+ f_m f_n^+ f_n \\
H_1 &= \sum_{\mathbf{p}\sigma m} V_{\mathbf{p}\sigma m} (c_{\mathbf{p}\sigma}^+ f_m + h.k.) \quad .
\end{aligned} \tag{2.1}$$

Die Quantenzahl m kann die Werte $1, \dots, N$ annehmen.

H_c beschreibt das Leitungsband mit der Dispersion $\epsilon_{\mathbf{p}}$. Dabei ist $c_{\mathbf{p}\sigma}^+$ der Erzeugungs-Operator für ein Leitungselektron mit Impuls \mathbf{p} und Spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$. Wir messen alle Energien von der Fermi-Energie aus und legen sie als Energie-Nullpunkt fest:

$$\epsilon_F = 0 \quad .$$

ϵ_f mißt die Energie-Differenz der f^0 - von der f^1 -Konfiguration. Die Coulomb-Abstoßung U der f -Elektronen ist so groß, daß man Konfigurationen mit mehr als einem f -Elektron vernachlässigen kann. Die f^0 - und die f^1 -Konfigurationen sind also energetisch ausgezeichnet. Dies wird durch die Annahme idealisiert, daß die Coulomb-Abstoßung auf der Störstelle unendlich groß sei. Man reduziert deshalb den Hilbertraum der erlaubten Zustände:

Die Störstelle besitze als einzige Konfigurationen eine N -fach entartete f^1 - und eine f^0 -Konfiguration. Man zerlegt die an der Störstelle streuenden Leitungselektron-Zustände nach den Quantenzahlen p, l, m und σ der Radialkomponente des Impulses, des Bahndrehimpulses und des Spins, und nimmt dann an, daß ausschließlich Partialwellen mit $J = 5/2$ an der Störstelle streuen.

Dies läßt sich in ein Modell fassen, in dem ein *effektives* Leitungsband mit einer Störstelle mit impulsunabhängigem Matrixelement V/\sqrt{N} hybridisiert. Sowohl die Leitungselektronen als auch die Elektronen auf der Störstelle haben einen internen Freiheitsgrad, dessen Quantenzahl N Werte

annehmen darf:

$$\begin{aligned}
H &= H_c + H_f + H_1 \\
H_c &= \sum_{|\epsilon_p| \leq D, m} \epsilon_p c_{pm}^+ c_{pm} \\
H_f &= \epsilon_f \cdot \sum_m f_m^+ f_m \\
H_1 &= \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_{p,m} (c_{pm}^+ b^+ f_m + h.k.) \quad .
\end{aligned} \tag{2.2}$$

H_c beschreibt das effektive Leitungsband mit Dispersion ϵ_p . Dabei ist p nun die Radialkomponente des Impulses mit der Störstelle im Ursprung des Koordinatensystems. c_{pm}^+ ist der Erzeugungs-Operator für ein Leitungselektron mit interner Quantenzahl m . Die Zustandsdichte $\rho(\epsilon_p)$ der Leitungselektronen sei konstant. Die Dispersion wird bei $\pm D$ abgeschnitten.

Wir folgen hier Hewson ([9], Kapitel 1) und fassen den internen Freiheitsgrad als verallgemeinerten Spin auf.

Weil die Elektronen auf der Störstelle stark korreliert sind, sind die Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren für solche Elektronen keine Einteilchen-Operatoren mehr, sondern gehorchen der komplizierten Algebra der Hubbard-Operatoren. Diese Hubbard-Operatoren können durch Fermion- und Boson-Operatoren ausgedrückt werden [18].

Dazu wird die unbesetzte f^0 -Konfiguration $|0\rangle$ durch das Coleman-Boson [18] und die besetzte f^1 -Konfiguration $|m\rangle$ durch ein Fermion dargestellt:

$$|0\rangle = b^+ |\text{vac}\rangle, \quad |m\rangle = f_m^+ |\text{vac}\rangle \quad .$$

Dabei stellt $|\text{vac}\rangle$ den (unphysikalischen) Vakuum-Zustand dar. Der physikalische Unterraum ist durch

$$n_b + n_f = 1 \tag{2.3}$$

gegeben. Die Störstelle ist also entweder null- oder einfach besetzt. Der Erzeugungs-Operator für ein Elektron auf der Störstelle lautet

$$F_m^+ = f_m^+ b \quad .$$

H_1 beschreibt die Hybridisierung des Leitungsbandes mit der Störstelle. Wir wählen als Hybridisierungs-Matrixelement V/\sqrt{N} , im Gegensatz zur Arbeit von Bickers [14], in der V von N abhängt. Wir setzen im folgenden die Boltzmann-Konstante k_B gleich eins, so daß die Temperatur die Dimension einer Energie hat.

Das Modell besitzt drei Hochenergie-Skalen, die von der Größenordnung 1eV sind: D ist die Energieskala der Teilchen-Loch-Anregungen des Leitungsbandes, ϵ_f ist die Differenz der Energien der besetzten von der unbesetzten Konfiguration der Störstelle, und ρV^2 ist proportional zur Breite der Resonanz nahe ϵ_f im Einteilchen-Anregungsspektrum, die von den Ladungsanregungen herrührt [9].

Durch die Hybridisierung wird die N -fache Entartung des Grundzustandes aufgehoben. Damit reagiert das System in einem völlig anderen Energiebereich auf äußere Störungen; es entsteht eine neue Energieskala T_K . Im Falle lokalisierter f -Störstellen liegt ϵ_f weit unterhalb der Fermi-Energie, so daß, wie wir sehen werden, T_K exponentiell klein als Funktion der Hybridisierung V wird. Diese exponentielle Abhängigkeit der Energieskala von der Hybridisierung zeigt, daß wir es hier mit einem Phänomen zu tun haben, das nicht störungstheoretisch behandelbar ist. Dieser Vielteilchen-Effekt soll hier untersucht werden.

Für große, negative ϵ_f ist im Anderson-Modell mit unendlicher Coulomb-Abstoßung die Störstelle stets einfach besetzt. Daher wechselwirkt die Störstelle mit dem Leitungsband nur noch über eine antiferromagnetische Austausch-Wechselwirkung, wie man in Störungstheorie zweiter Ordnung zeigt [19]. Es ergibt sich das Coqblin-Schrieffer-Modell:

$$\begin{aligned} H_c &= \sum_{|\epsilon_p| \leq D, m} \epsilon_p c_{pm}^+ c_{pm} , \\ H_{\text{int}} &= \frac{J}{N} \sum_{p,q,m,n} c_{pm}^+ c_{qn} f_n^+ f_m \end{aligned} \quad (2.4)$$

mit

$$J = \frac{V^2}{|\epsilon_f|} .$$

Unser Ziel ist es, universelles Verhalten dieser Modelle zu beschreiben. Die bei Temperaturen T an Systemen mit magnetischen Störstellen beobachtete Energieskala T_K ist viel kleiner als die halbe Bandbreite D :

$$T, T_K \ll D \quad . \quad (2.5)$$

Das bedeutet, daß die Kopplung $V\rho$ zwischen Leitungsband und Störstelle klein ist. Daher muß für eine feste Temperatur T der Limes

$$D \rightarrow \infty \quad (2.6)$$

betrachtet werden, um universelles Verhalten der Störstelle beschreiben zu können. In diesem Falle wird die Stärke der Kopplung $V\rho$ nur noch vom Wert der Zustandsdichte an der Fermi-Energie $\rho(\epsilon_F)$ abhängen und ansonsten von der Bandstruktur unabhängig sein.

Wir haben dann zu zeigen, daß die vorher eingeführten Idealisierungen das universelle Verhalten nicht beeinflussen.

Kapitel 3

Methoden zur Ermittlung der Energieskalen

Man kann Störstellen in einem Leitungsband solange mit der Streutheorie exakt behandeln, wie man die Näherung nicht wechselwirkender Elektronen machen kann: Die *einzelnen* Einteilchen-Energien werden durch die Störstelle leicht verschoben, der Fermi-See entsprechend aufgefüllt. Eine Einteilchen-Wellenfunktion ändert sich bei der Streuung an einem schwachen Potential nur wenig, aber selbst dann steht der Grundzustand als antisymmetrisiertes *Produkt* aus solchen Einteilchen-Wellenfunktionen im thermodynamischen Limes senkrecht auf dem Grundzustand des ungestörten Systems.

Diese „Orthogonalitäts-Katastrophe“ [11] hat ihren Ursprung darin, daß sich aus dem Fermi-See unendlich viele Teilchen-Loch-Paare mit beliebig kleinem Energie-Aufwand erzeugen lassen. Daher versagt Störungstheorie endlicher Ordnung; sie hat Infrarotdivergenzen. Denn man berücksichtigt in jeder Ordnung nur endlich viele Teilchen-Loch-Anregungen.

Wenn die Elektronen auf der Störstelle eine starke lokale Coulomb-Abstoßung spüren, wie zum Beispiel lokalisierte f -Elektronen, bricht das Einteilchen-Bild und damit die Streutheorie zusammen.

Wir diskutieren für diesen Fall anhand des Coqblin-Schrieffer-Modells (2.4) die bisher existierenden Lösungsverfahren für Metalle mit Störstellen mit stark korrelierten Elektronen. Eine ausführliche Beschreibung dieser Verfahren findet man im Anhang A.

1. Das Verfahren des *poor man's scaling* stützt sich auf die störungstheoretische Elimination der hochenergetischen Zustände im Leitungsband [20]. Diese Elimination kann nicht gerechtfertigt werden, da die zu eliminierenden Zustände vom Rest des Systems nicht durch eine Energielücke getrennt sind. Das Verfahren bricht zusammen, wenn die Bandbreite so klein wird wie die effektive Kopplung, da dann die Störungstheorie nicht mehr gilt.

Der Bereich der niederenergetischen Anregungen bleibt verschlossen.

2. Auch mit Hilfe der diagrammatischen Renormierungsgruppe versucht man, die exakten Skalen des Systems aus seinem Hochenergie-Verhalten zu extrahieren, indem man für große Energien die Propagatoren und Vertexkorrekturen störungstheoretisch berechnet und dann an die exakte Dyson-Gleichung anpaßt [21, 22, 23]. Das Verfahren versagt bei tiefen Temperaturen, weil dann die Störungstheorie divergiert.

Es bleibt unklar, warum gerade die berücksichtigten Diagramme das Verhalten des Systems bei niedrigen Temperaturen gut beschreiben sollten ([8], Seite 791).

Man kann zeigen [9], daß die beiden Verfahren äquivalent sind. Es bleibt bei diesen Verfahren unklar, ob die ermittelten Energieskalen korrekt sind, und ob sie für tiefe Temperaturen noch gelten.

Die beiden folgenden Methoden gelten gemeinhin als „exakt“. Mit ihnen behandelt man aber ein anderes Modellsystem, von dem angenommen wird, es beschreibe das universelle Verhalten des ursprünglichen Systems. Diese Abbildung auf ein Modellsystem funktioniert nur, wenn das ursprüngliche Modell als eindimensional aufgefaßt werden kann. Sie versagt zum Beispiel, wenn mehr als eine Störstelle an das Leitungsband koppelt.

3. Mit der Methode der numerische Renormierungsgruppe diagonalisiert man numerisch statt des ursprünglichen Hamilton-Operators ein endliches, eindimensionales Gitter-Modell. Je länger das eindimensionale

Gitter ist, desto tiefere Temperaturen können mit dem Modell beschrieben werden. Die Methode versagt aus numerischen Gründen, wenn das System viele interne Freiheitsgrade hat, da die zu diagonalisierenden Matrizen schnell zu groß werden. Aus dem gleichen Grunde läßt sich das Tieftemperatur-Verhalten nur dann beschreiben, wenn es durch einen einfachen effektiven Hamilton-Operator beschrieben werden kann, dessen Parameter durch Vergleich seines Spektrums mit dem des verwendeten diskreten Modells bestimmt werden. Um die Energieskalen des Systems zu ermitteln, ist man auf die oben diskutierten störungstheoretischen Verfahren angewiesen. Man kann so die Parameter des diskreten Modells indirekt mit denen des ursprünglichen Modells in Verbindung bringen. Universelles Verhalten läßt sich nur numerisch zeigen.

4. Auch die Methode des Bethe-Ansatzes ist nur auf eindimensionale Modelle anwendbar, in denen das Leitungsband durch ein Modell mit linearer, unbeschränkter Dispersion ersetzt wird. Man erhält ein unbeschränktes Eigenwert-Spektrum und schneidet es a posteriori ab. Der Abschneideparameter kann im allgemeinen nicht mit der Bandbreite des ursprünglichen Leitungsbandes in Verbindung gebracht werden [9]. Daher ergeben sich aus dem Bethe-Ansatz nicht immer die richtigen Energieskalen für das ursprüngliche Modell [24]. Der Bethe-Ansatz versagt, wenn die Wechselwirkung nicht genau die adäquate Form hat, die es erlaubt, das Modell auf eines freier Quasiteilchen abzubilden. Es ist überdies mit dem Verfahren schwierig, dynamische Größen zu berechnen.

Mit diesen beiden Methoden lassen sich also exakte (numerische) Resultate für eine Reihe von Observablen ermitteln, aber statt für die ursprünglichen für andere, effektive Modelle. Mit Hilfe dieser Verfahren läßt sich zudem nicht allgemein von *jeder* Observablen zeigen, daß sie mit der gleichen Energieskala skaliert.

Von den vielen diagrammatischen und variationellen Methoden hat man

bisher nur von einer einzigen zeigen können, daß sie das Tieftemperatur-Verhalten richtig beschreibt, aber nur im Limes großer N , und nur, falls das System Fermi-Flüssigkeit-Verhalten zeigt [9].

5. Die diagrammatische Methode der $1/N$ -Entwicklung beruht auf der Annahme, der Störstellen-Anteil von Observablen ließe sich in eine Potenzreihe in $1/N$ entwickeln, wobei N die Anzahl der inneren Freiheitsgrade der Teilchen ist. Allerdings werden die Energieskalen des Systems nicht exakt ermittelt. Daher läßt sich das Hochtemperatur-Verhalten und das *crossover* nicht ermitteln [25]. Außerdem wird die Einteilchen-Spektralfunktion der Störstelle nichtintegabel. Es läßt sich *nicht* jede Observable in eine Potenzreihe in $1/N$ entwickeln, selbst wenn dies für die freie Energie möglich ist.

Auf Verfahren, die andere Diagrammklassen auswählen, soll hier nicht im Detail eingegangen werden, da sich herausgestellt hat, daß sie das universelle Verhalten von Störstellen mit stark korrelierten Elektronen nicht richtig beschreiben. Zum Beispiel ergeben sich bei tiefen Temperaturen und kleinen Magnetfeldern Infrarotdivergenzen, wenn man endlich viele Diagramme aufsummiert, und diese verschwinden auch nicht, wenn man die am meisten divergenten Diagramme wiederum aufsummiert et cetera; all diese Versuche sind gescheitert. Ein solcher Ansatz ist äquivalent zu dem der diagrammatischen Renormierungsgruppe.

Auch mit der auf der Methode der Bewegungsgleichungen beruhenden Entkopplungs-Technik für Greensche Funktionen berücksichtigt man eine bestimmte Diagrammklasse. Das führt zu völlig falschen Vorhersagen für das Niederenergie-Verhalten. Eine prägnante Darstellung dieser und anderer Versuche von Abrikosov, Suhl, Nagaoka und anderen findet sich in [10], Seite 458-460.

Wenn wir im folgenden mit der Diagrammtechnik ein Näherungsverfahren für Störstellensysteme vorstellen, werden wir ein Kriterium benötigen, das die Diagramme a priori in richtig skalierende Klassen einteilt, damit das universelle Verhalten der Störstelle beschrieben werden kann.

Kapitel 4

Diagrammtechnik für das Anderson-Modell

Die Diagrammtechnik ist in der Festkörperphysik wohlbekannt (siehe zum Beispiel [26]). Sie gestattet es, ausgehend von einem lösbaeren Hamilton-Operator H_0 , die Observablen eines nur wenig abweichenden Hamilton-Operators

$$H = H_0 + H_1$$

zu berechnen. Die Diagrammtechnik konnte man ursprünglich nur anwenden, wenn H_0 unabhängige Teilchen beschreibt und damit ein Einteilchen-Hamilton-Operator ist; sie ist bekanntlich zuerst für die Streuprobleme der Quantenelektrodynamik entwickelt worden [27]. H_1 bewirkt Erzeugungs- und Vernichtungsprozesse von Einteilchen-Eigenzuständen von H_0 , die mit Hilfe des Wickschen Theorems [27] paarweise behandelt werden können.

Im Anderson-Modell (2.2) beschreibt

$$H_0 = H_c + H_f$$

das Leitungsband *und* die Störstelle mit stark korrelierten Elektronen, ist also *kein* Einteilchen-Hamilton-Operator mehr. H_1 beschreibt die dazu relativ kleine Hybridisierung des Leitungsbandes mit der Störstelle.

Normalerweise gibt es für solche Hamilton-Operatoren keine Diagrammtechnik. Da sich hier aber nur *eine* Störstelle in einem Leitungsband von größenordnungsmäßig 10^{23} Teilchen befindet, gelingt eine Diagrammtechnik, in der, anschaulich gesprochen, die Erwartungswerte über die

Leitungsband-Einteilchen-Zustände zuerst ausgeführt werden, und in der die restlichen Freiheitsgrade der Störstelle explizit berechnet werden [13]. Man kann deshalb so schrittweise vorgehen, weil der Einfluß der Störstelle auf das Leitungsband vernachlässigt werden kann; dies ist ein Effekt von der relativen Größenordnung 10^{-23} .

Um Größen wie den Störstellen-Anteil der Zustandssumme

$$Z = \frac{Sp_f Sp_c e^{-\beta H}}{Sp_c e^{-\beta H_c}} \quad (4.1)$$

zu berechnen, benutzen wir die Zerlegung [7]

$$e^{-\beta H} = e^{-\beta \tilde{H}} e^{-\beta H_c} \quad (4.2)$$

mit

$$\tilde{H} = L_c + H_f + H_1 \quad . \quad (4.3)$$

Der zu H_c gehörende Liouville-Operator L_c ist ein Superoperator, der folgendermaßen auf einen Operator X wirkt:

$$L_c X = [H_c, X] \quad . \quad (4.4)$$

Z können wir mit Hilfe des thermodynamischen Erwartungswertes

$$\langle X \rangle_{\text{Band}} = \frac{Sp_c X e^{-\beta H_c}}{Sp_c e^{-\beta H_c}}$$

ausgehend von (4.1) und (4.2) folgendermaßen als Wegintegral darstellen:

$$\begin{aligned} Z &= Sp_f \langle e^{-\beta \tilde{H}} \rangle_{\text{Band}} \\ &= Sp_f \oint_w \frac{e^{-\beta z} dz}{2\pi i} \langle \frac{1}{z - \tilde{H}} \rangle_{\text{Band}} \quad . \end{aligned}$$

Dabei umläuft der Weg w alle Pole des Integranden. Die Resolvente $1/(z - \tilde{H})$ bestimmt über ihren thermodynamischen Mittelwert bezüglich der Leitungselektronen

$$R_f(z) = \langle \frac{1}{z - \tilde{H}} \rangle_{\text{Band}} \quad (4.5)$$

den Störstellen-Anteil der Thermodynamik. Schließlich werden noch ionische Propagatoren für die unbesetzte und besetzte f -Störstelle,

$$\begin{aligned} R_0(z) &= \langle 0 | R_f(z) | 0 \rangle \\ R_m(z) &= \langle m | R_f(z) | m \rangle \end{aligned} \quad (4.6)$$

benötigt. Es gilt damit für den Störstellen-Anteil Z der Zustandssumme:

$$Z = Sp_f \oint_w \frac{e^{-\beta z} dz}{2\pi i} R_f(z) = \oint_w \frac{e^{-\beta z} dz}{2\pi i} \left(R_0(z) + \sum_m R_m(z) \right) \quad . \quad (4.7)$$

Die physikalische Bedeutung der zugehörigen Spektraldichten und die Orthogonalitäts-Katastrophe diskutieren wir in den Anhängen B und C. Die Diagrammtechnik von Bickers [14] für das Anderson-Modell (2.2) wird in Anhang D in kompakter Form hergeleitet, indem wir die Propagatoren R_f benutzen.

4.1 Erzeugendes Funktional

Ausgangspunkt für die Ermittlung des Störstellen-Anteils von Observablen mittels Skelettdiagrammen ist ein erzeugendes Funktional Φ . Das Funktional ist so gewählt, daß sich durch Ankoppeln an äußere Felder der Störstellen-Anteil von Korrelationsfunktionen ergibt. Für den Störstellen-Anteil Z der Zustandssumme lautet es [15, 16, 17]:

$$\begin{aligned} \Phi = \beta Sp_f \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} \left(\right. \\ \left. \sum_n \left(1 - \frac{1}{n} \right) \Sigma_f^{(n)}(R_f(z)) \cdot R_f(z) + \ln \left[z - H_f - \sum_n \Sigma_f^{(n)}(R_f(z)) \right] \right) \quad . \end{aligned} \quad (4.8)$$

Die Wegintegration läuft um alle Pole des Integranden. Es bezeichnet

$$\Sigma_f^{(n)}(R_f(z)) \cdot R_f(z)$$

alle Skelettdiagramme n -ter Ordnung. Skelettdiagramme sind Diagramme, aus denen man alle Selbstenergie-Einschübe entfernt hat. Sie werden so zu Funktionalen der vollen Propagatoren R_f (siehe Anhang D.2). Wir

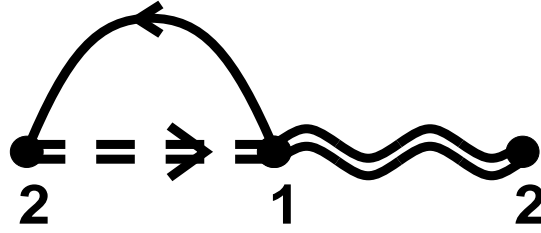


Abbildung 4.1: Diagramm für $\Sigma_0^{(2)}(R_m(z)) \cdot R_0(z)$. Dabei wird wegen der Spurbildung über die f -Zustände der erste mit dem letzten Vertex identifiziert. Dabei steht die doppelte, gestrichelte und doppelte, geschlängelte Linie für den vollen Propagator R_m und R_0 . Die durchgezogene Linie deutet die Wick'schen Kontraktionen bei der Bildung von $\langle \dots \rangle_{\text{Band}}$ an, siehe Anhang D.

nehmen also die Propagatoren und die Selbstenergien als *unabhängig* an. Ein solches Skelettdiagramm zweiter Ordnung zeigt Abbildung 4.1. Φ ist damit ein Funktional der Propagatoren R_f :

$$\Phi = \Phi(R_f).$$

Die Dyson-Gleichung stellt den Zusammenhang zwischen Propagator und Selbstenergie her. Das erzeugende Funktional ist so gewählt, daß sich die Dyson-Gleichung als Sattelpunktsbedingung für Φ ergibt. Außerdem ergibt das Funktional Φ am Sattelpunkt den Störstellen-Anteil der Zustandssumme:

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta R_f} \Phi &= 0 \quad \iff \quad R_f(z) = \frac{1}{z - H_f - \Sigma_f(z)}, \quad (4.9) \\ \Phi(\text{Sattelpunkt}) &= Z \quad . \end{aligned}$$

Der Standardbeweis für diese Sattelpunkteigenschaft findet sich bei Bickers [14] und ist im Anhang E wiedergegeben.

Aus diesem Variationsprinzip folgt: Am Sattelpunkt hängt das erzeugende Funktional Φ von den Parametern λ des Systems wie der Temperatur oder der Bandbreite D nur noch *explizit* ab:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\lambda} \Phi &= \frac{\partial}{\partial \lambda} \Phi + \frac{\delta}{\delta R_f} \Phi \cdot \frac{\partial}{\partial \lambda} R_f \quad (4.10) \\ &= \frac{\partial}{\partial \lambda} \Phi \quad \text{für} \quad \Phi = Z \quad . \end{aligned}$$

Der entscheidende Punkt ist, daß man damit bei der Bildung der Ableitungen die λ -Abhängigkeit der Propagatoren im erzeugenden Funktional *ignorieren* kann. Daher entscheidet nur die *Struktur* der Skelettdiagramme über die Abhängigkeit der freien Energie von den Parametern des Systems.

Um für andere Observablen ein erzeugendes Funktional aufzustellen, hat man das System an geeignete Hilfsfelder anzukoppeln. Wir demonstrieren dies in Abschnitt 4.2 anhand des f -Propagators.

4.2 Erzeugendes Funktional: f -Propagator

Statt wie Kuramoto [17] das System an Graßmann-Felder zu koppeln, erweist es sich als zweckmäßiger, es an *fermionische* Hilfsfelder zu koppeln. So wird in Kapitel 6 der Nachweis gelingen, daß bereits eine kleine Klasse von Skelettdiagrammen ausreicht, um genäherte Korrelationsfunktionen zu ermitteln, die exakt skalieren. Der Operator

$$|m\rangle\langle 0| = F_m^+$$

ist der Erzeugungs-Operator für ein f -Elektron auf der Störstelle; der entsprechende Vernichtungs-Operator lautet

$$|0\rangle\langle m| = F_m \quad .$$

Dies sind keine Einteilchen-Operatoren, da die Elektronen auf der Störstelle stark korreliert sind. Für den f -Propagator

$$G_f(\tau) = (-1) \langle T_\tau F_m(\tau) F_m^+(0) \rangle_H$$

$$\stackrel{\tau \geq 0}{=} \frac{(-1) Sp_f Sp_c e^{-\beta H} \cdot (e^{\tau H} F_m e^{-\tau H} F_m^+)}{Sp_f Sp_c e^{-\beta H}}$$

kann mit Hilfe der Resolvente $1/(z - \widetilde{H})$ im Frequenzraum nach Anhang F die folgende Integraldarstellung hergeleitet werden:

$$ZG_{fm}(\omega) = Sp_f \oint \frac{e^{-\beta z} dz}{2\pi i} \langle \langle 0 | \frac{1}{z - \widetilde{H}} | 0 \rangle \cdot \langle m | \frac{1}{z + \omega - \widetilde{H}} | m \rangle \rangle_{\text{Band}} \quad (4.11)$$

Die Spektralfunktion dieses Propagators beschreibt die Spektralverteilung für die Wegnahme oder Hinzufügung eines f -Elektrons in das System.

Den f -Propagator kann man ebenso wie den Störstellen-Anteil der Zustandssumme in Diagramme entwickeln (Anhang D.3). Um das erzeugende Funktional aufzustellen, koppeln wir die Störstelle an *fermionische* Hilfsfelder Ψ_{qm} mit gleicher Zustandsdichte wie das Leitungsband:

$$H_0 = H_c + H_\Psi = \sum_{|\epsilon_p| \leq D, m} \epsilon_p c_{pm}^+ c_{pm} + \sum_{\epsilon_q \leq \omega, m} \epsilon_q \Psi_{qm}^+ \Psi_{qm} \quad (4.12)$$

$$H_f = \epsilon_f \cdot \sum_m f_m^+ f_m$$

$$H_1 = \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_{p,m} (c_{pm}^+ b^+ f_m + h.k.) + \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_{q,m} (\lambda_m \Psi_{qm}^+ b^+ f_m + h.k.) \quad .$$

Wir führen Skelettdiagramme ein und erhalten das erzeugende Funktional Φ_Ψ wie in Gleichung (4.8). Wenn wir das Analogon der freien Energie als $F_\Psi = -T \ln \Phi_\Psi$ definieren, erhalten wir die Darstellung

$$\left. \frac{\partial}{\partial \lambda_m^2} \right|_{\lambda_1 = \dots = \lambda_N = 0} F_\Psi = \rho V^2 \int_{-\infty}^{\omega} f(u) G_{fm}(u) du \quad . \quad (4.13)$$

4.3 Erzeugendes Funktional: Näherungen

Näherungen für das erzeugende Funktional erhält man, indem man eine Teilklasse von Skelettdiagrammen berücksichtigt. Um das Variationsprinzip (4.9) aufstellen zu können, benötigt man eine *Familie* von Skelettdiagrammen. Dies ist eine Menge von Skelettdiagrammen $\widetilde{\Sigma}_f R_f$ wie in Abbil-

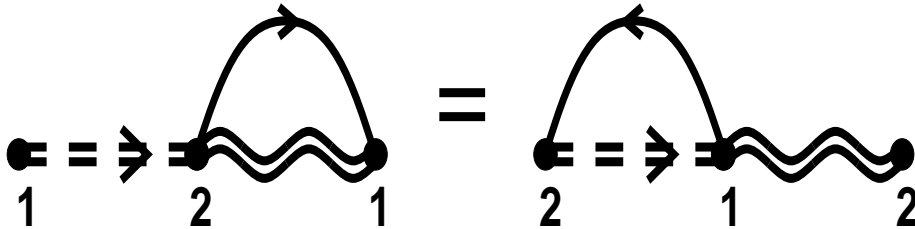


Abbildung 4.2: Zyklische Vertauschung der Vertices. Die beiden Diagramme sind im erzeugenden Funktional gleich wegen (E.1). Wegen der Spurbildung kann man die äußeren Vertices identifizieren.

dung 4.2, die mit einem Diagramm auch die anderen enthält, die sich durch Permutation der Vertices des Diagramms ergeben [28]. Wegen der Spurbildung über die f -Zustände wird der erste mit dem letzten Vertex identifiziert. Die beiden Skelettdiagramme zweiter Ordnung aus Abbildung 4.2 bilden in diesem Sinne eine Familie. Enthält eine Näherung $\widetilde{\Sigma}_f R_f$ Familien von Skelettdiagrammen, so ergibt sich aus der Sattelpunktsbedingung

$$\frac{\delta}{\delta R_f} \widetilde{\Phi} = 0 \quad (4.14)$$

eine Dyson-Gleichung [16, 17]

$$\widetilde{G}_f(z) = \frac{1}{z - H_f - \widetilde{\Sigma}_f(z)} \quad . \quad (4.15)$$

Insbesondere ergibt sich die non-crossing-approximation oder NCA, indem man die beiden Selbstenergie-Diagramme niedrigster, das heißt zweiter Ordnung in V mitnimmt (siehe auch Anhang D.2). Die Gleichung (4.15) ist dann die Selbstkonsistenzgleichung.

Allgemein gilt: Wenn man *alle* Skelettdiagramme n -ter Ordnung mitnimmt, hat man ganze Familien mitgenommen. Es wird im folgenden stets angenommen, die Approximation enthalte Familien von Diagrammen.

Kapitel 5

Energieskalen

Wir stellen in diesem Kapitel am Beispiel des Anderson-Modells das zentrale Resultat dieser Arbeit vor.

5.1 Universalität

Das erste Hauptresultat dieser Arbeit ist:

Der Störstellen-Anteil X *jeder* Observablen des Anderson-Modells skaliert als Funktion der Bandbreite D , der Zustandsdichte ρ , der Energiedifferenz der f^0 - und f^1 -Konfiguration ϵ_f , der Hybridisierung V , der Temperatur T und der Frequenz ω mit den Energieskalen

$$\Gamma = \frac{\pi\rho V^2}{N} \quad (5.1)$$

und

$$T_K = D \left(\frac{\rho V^2}{D} \right)^{\frac{1}{N}} \exp \left[\frac{\epsilon_f}{\rho V^2} \right] \quad . \quad (5.2)$$

Zum Beispiel lassen sich der Störstellen-Anteil F der freien Energie abzüglich des Störstellen-Anteils E_0 der Grundzustandsenergie sowie der f -Propagator G_f als universelle Funktionen schreiben:

$$(F - E_0)(T, V, \epsilon_f, D, \rho) = T \cdot g \left(\frac{T}{\Gamma}, \frac{T}{T_K} \right) \quad (5.3)$$

$$G_f(\omega, T, V, \epsilon_f, D, \rho) = \frac{1}{\rho V^2} h \left(\frac{T}{\Gamma}, \frac{T}{T_K}, \frac{\omega}{\Gamma}, \frac{\omega}{T_K} \right) \quad . \quad (5.4)$$

T_K heißt die Kondo-Temperatur. (Eigentlich ist die Kondo-Temperatur über das Hochtemperatur-Verhalten des Systems definiert [8] und unterscheidet sich von der hier angegebenen durch einen komplizierten numerischen Faktor, der für die Diskussion des universellen Verhaltens unwesentlich ist [9]).

Für negative, große ϵ_f ist die Kondo-Temperatur viel kleiner als Γ , so daß sich diese Skalierungsgesetze auf die Form

$$\begin{aligned} F - E_0 &= Tg\left(\frac{T}{T_K}\right) \\ G_f &= \frac{1}{\rho V^2} h\left(\frac{T}{T_K}, \frac{\omega}{T_K}\right) \end{aligned} \quad (5.5)$$

reduzieren. Für $T=0$ folgt für die f -Spektralfunktion

$$\rho_f(\omega) = \frac{1}{\pi} \lim_{\text{Im}(\omega) \rightarrow 0^-} G_f(\omega)$$

der Störstelle das Skalierungsgesetz

$$\rho_f(\omega, V, \epsilon_f, D, T) = \frac{1}{\rho V^2} g\left(\frac{\omega}{\rho V^2}, \frac{\omega}{T_K}\right) \quad . \quad (5.6)$$

Der Störstellen-Anteil $\rho(T)$ des elektrischen Widerstandes ist durch $\rho(T) \propto \rho_f(\omega=0)$ gegeben [29]. Er skaliert damit wie

$$\rho(T, V, \epsilon_f, D) = \rho\left(\frac{T}{\rho V^2}, \frac{T}{T_K}\right) \quad . \quad (5.7)$$

Dieses universelle Verhalten folgt aus dem Variationsprinzip (4.9). Die Energieskalen des Modells lassen sich mit unserer Methode *exakt* berechnen. Deshalb ist die hier entwickelte Diagrammtechnik die natürliche Sprache, um Skalierungsgesetze zu ermitteln.

5.2 Klassifikation der Skelettdiagramme

Universelles Verhalten in Metallen mit Störstellen bedeutet, daß für tiefe Temperaturen der Störstellen-Anteil von Observablen *nicht* mehr von der Bandstruktur abhängt. Wie in Kapitel 2 erläutert, hat man dazu bei fester

Temperatur den Limes großer Bandbreite D zu betrachten. Alle Größen, die im Limes großer D verschwinden, sind nicht universell.

Das zweite Hauptresultat dieser Arbeit ist:

Die Skelettdiagramme lassen sich *allein aufgrund ihrer Diagrammstruktur* nach Potenzen von $1/D$ klassifizieren.

Damit können wir die Mindestmenge an Skelettdiagrammen angeben, die notwendig ist, um die exakten Energieskalen des Systems zu erhalten. Diese Diagrammklassen beschreiben das universelle Verhalten der Störstelle und garantieren eine systematische Näherung für die Thermodynamik *und* die Dynamik der Störstelle.

Für das Anderson-Modell folgt: Die Skelettdiagramme zweiter Ordnung (also die NCA) bilden für das Anderson-Modell die gesuchte Mindestmenge von Skelettdiagrammen zur Beschreibung des universellen Verhaltens der Störstelle. Wir erhalten zum Beispiel für die universelle Funktion g aus Gleichung (5.5) einen genäherten Ausdruck, indem wir mindestens die relevanten Skelettdiagramme im erzeugenden Funktional berücksichtigen.

Außerdem folgt, daß die für die NCA postulierte unphysikalische Energieskala [9, 14] unterhalb der Kondo-Temperatur *nicht* existiert.

Jede andere Näherung, die universelles Verhalten richtig beschreiben will, muß aus einem erzeugenden Funktional folgen und diese Skelettdiagramme zweiter Ordnung umfassen.

5.3 Diskussion anderer Diagrammklassen

Wir können nun, ausgehend vom Hauptresultat, die Qualität von anderen Verfahren für Systeme mit Störstellen beurteilen.

Die nichtdiagrammatischen Methoden des Bethe-Ansatzes und der numerischen Renormierungsgruppe wurden schon in Kapitel 3 erläutert.

Eine exakte Lösung des Modells gelingt nur in wenigen Fällen; meist ist man auf Näherungen angewiesen. Die Diagrammtechnik ist die einzige existierende Technik, um sowohl die Thermodynamik als auch Korrelationsfunktionen für Systeme mit Störstellen analytisch zu bestimmen. Es stellt

sich die Frage: Welche Diagrammklassen müssen *mindestens* aufsummiert werden, um die Observablen hinreichend genau zu beschreiben?

Das zentrale Kriterium betrifft die Universalität: Der Störstellen-Anteil jeder Observablen skaliert mit der *gleichen* Energieskala, und das Verhalten der skalierten Observablen hängt nicht mehr vom Material ab. Diese generelle Eigenschaft von Systemen mit Störstellen muß bei einer Näherung erhalten bleiben. Denn sonst gelingt keine korrekte Beschreibung des Energie-Bereichs um die universelle Energieskala.

Alle perturbativen Verfahren (siehe Kapitel 3) wie die Störungstheorie endlicher Ordnung, die diagrammatische Renormierungsgruppe oder *poor man's scaling* versagen bei der Beschreibung universellen Verhaltens, weil, wie wir gezeigt haben, die falschen Diagrammklassen berücksichtigt werden.

Wegen des Hauptresultats wird verständlich, weshalb die $1/N$ -Entwicklung zumindest für große N gute Resultate für den Störstellen-Anteil der Thermodynamik liefert:

In jedem Skelettdiagramm der Ordnung $q > 2$ in der Kopplungskonstanten V durchlaufen die Fermionen Schleifen mit mindestens vier Vertices. Denn wenn eine Schleife nur zwei Vertices durchläuft, so muß $q = 2$ sein, da diese Schleife sonst ein Selbstenergie-Einschub wäre. Folglich ergibt die Summation über die inneren Freiheitsgrade für die Fermion-Schleifen höchstens einen Faktor $N^{q/4}$. Daher hat ein Skelettdiagramm q -ter Ordnung mit dem Vorfaktor $V^q N^{-q/2}$ für $q > 2$ höchstens die Ordnung $N^{-q/4}$. Da es keine Skelettdiagramme der Ordnung vier gibt, nehmen die Skelettdiagramme zweiter Ordnung (NCA) alle Diagramme bis zur Ordnung $1/N$ einschließlich mit.

Folglich ist eine Entwicklung in Skelettdiagramme bis zu einer bestimmten Ordnung in V auch eine Entwicklung in $1/N$. Bisher war man der Ansicht, die NCA wäre eine unsystematische $1/N$ -Entwicklung, weil alle Diagramme der ersten, aber nicht alle von höherer Ordnung in $1/N$ mitgenommen werden. Daher war es unerklärlich, warum die NCA sogar für $N = 2$ mit den Resultaten der numerischen Renormierungsgruppe so gut

übereinstimmt [30]. Die Erklärung findet sich in der Skalierungseigenschaft.

Es stellt sich nun die Frage, wie genau eine Näherung ist, die nur die relevanten Skelettdiagramme mitnimmt. Als Beispiel nehmen wir das Anderson-Modell. Hier ist bekannt [14, 31], daß die mit der NCA berechneten Störstellen-Anteile von Observablen gewisse exakte, sogenannte Fermi-Flüssigkeits-Relationen nur angenähert erfüllen. Bisher war man der Ansicht, daß deswegen die NCA eine weitere, unphysikalische Energieskala unterhalb von T_K vorhersagt ([14], Seite 893). Aus unserem Hauptresultat folgt aber, daß eine solche anomale Energieskala *nicht* auftritt. Anders ausgedrückt: Die Beschreibung universellen Verhaltens durch eine Näherung ist notwendig, aber nicht hinreichend für eine genaue Beschreibung aller Observablen.

Allerdings muß jeder Versuch scheitern, die Näherung zu verbessern, indem je nach Observable ad hoc mehr Diagramme aufsummiert werden. Zum Beispiel erweiterte Saso die NCA [32]. Jedoch folgt der so berechnete Störstellen-Anteil der Zustandssumme nicht aus einem erzeugenden Funktional. Vielmehr werden bei Saso die ionischen Propagatoren über die NCA bestimmt und mit Hilfe dieser Propagatoren die Klasse der Diagramme ad hoc erweitert. Dieses Verfahren erhält *nicht* die Energieskalen des Systems. Sasos Ergebnisse werden in Kapitel 10 genauer diskutiert; sie sind allesamt ein Artefakt seiner gewählten Näherung.

Eine systematische Erweiterung der NCA ist nur im Rahmen des Variationsprinzips (4.9) zu suchen. Jedoch bereitet es erhebliche numerische Probleme, Skelettdiagramme von höherer Ordnung mitzunehmen. Das dazu zu lösende selbstkonsistente Integralgleichungssystem enthält bei einem Skelettdiagramm sechster Ordnung (Abbildung G.1) schon eine Dreifachintegration, die in jedem Iterationsschritt auszuführen ist. Diese numerischen Probleme lassen es ratsamer erscheinen, Skelettdiagramme noch höherer Ordnung in eine selbstkonsistent zu bestimmende Vertexkorrektur mitzunehmen. Eine solche Methode ist die für das Anderson-Modell entwickelte, sogenannte Post-NCA. Auch in dieser Methode werden Familien

von Skelettdiagrammen mitgenommen, und zwar alle Skelettdiagramme bis zur Ordnung $1/N^2$ und einige von höherer Ordnung [33].

Aus unserem Hauptresultat folgt dann, daß die mit der Post-NCA berechneten Störstellen-Anteile von Observablen exakt skalieren. Dies wurde numerisch beobachtet [34]. Also sagt die exakte Skalierung von Störstellen-Anteilen von Observablen *allein* nichts über die Genauigkeit der Post-NCA aus. Um die Post-NCA mit der NCA vergleichen zu können, muß man für *jede* Observable dieselben Skelettdiagramme im erzeugenden Funktional verwenden und die Ergebnisse dann anhand der Wilson-Zahl oder anderen, exakt bekannten Kontrollgrößen vergleichen.

Allerdings wurde bei der Berechnung des Störstellen-Anteils der statischen magnetischen Suszeptibilität mit Hilfe der Post-NCA von den Skelettdiagrammen achter Ordnung fälschlicherweise angenommen, ihre Beiträge verschwänden. Tatsächlich sind die von Anders und Grewe veröffentlichten Resultate für die Post-NCA *nicht* besser als die für die NCA (Abschnitt 7.4). Wollte man das in der Post-NCA fehlende Skelettdiagramm achter Ordnung berücksichtigen, so wäre in jedem Iterationsschritt eine Vierfachintegration zu bewältigen.

Es ist zweifelhaft, ob solche Rechnungen mit genügender numerischer Genauigkeit ausgeführt werden können. Daher kann man die Post-NCA nicht endgültig bewerten.

5.4 Physikalische Bedeutung der Energieskalen

Welche physikalische Bedeutung haben die in den Gleichungen (5.1) und (5.2) angegebenen Energieskalen Γ und T_K ?

Die mit dem Leitungsband hybridisierende Störstelle bildet eine Resonanz der Breite Γ bei der Energie ϵ_f aus. Für kleine V , negative ϵ_f und $|\epsilon_f| \gg \rho V^2$ wird die Energieskala T_K gegenüber ρV^2 exponentiell klein. Die Störstelle ist dann asymptotisch einfach besetzt. Daher spielt auf der Energieskala T_K die Energieskala Γ keine Rolle mehr. Diesen Fall nennt man den magnetischen Limes, da die Störstelle mit dem Leitungsband

nur über eine Austausch-Wechselwirkung $\propto V^2/\epsilon_f$ wechselwirkt, wie im Coqblin-Schrieffer-Modell (2.4). Wir erläutern nun anhand der bekannten numerischen NCA-Resultate [29] für $T > 0$ und zeigen in den Kapiteln 7 und 9 analytisch für $T = 0$, daß T_K die Energieskala der *Spinanregungen* ist.

5.4.1 Spezifische Wärme

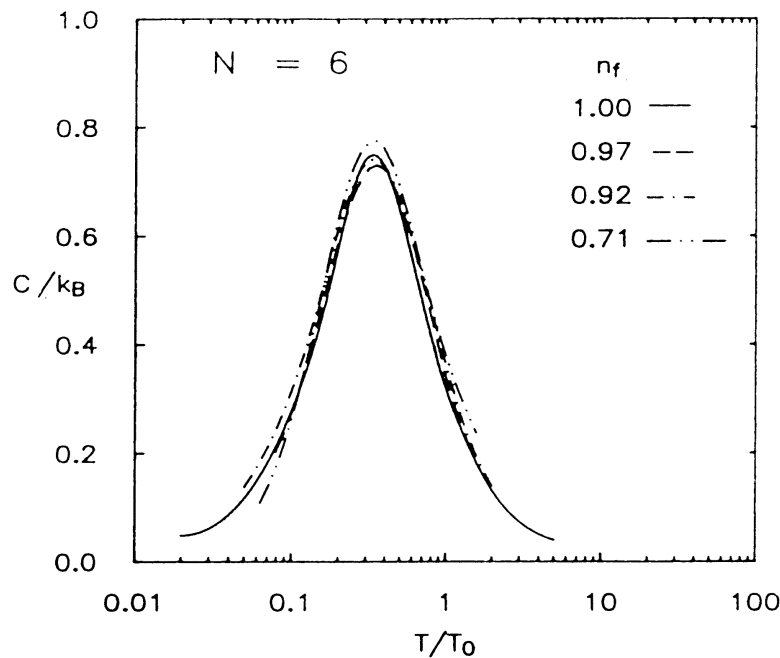


Abbildung 5.1: Skalierung des Störstellen-Anteils der spezifischen Wärme mit der Temperatur nach [29]. Im magnetischen Limes wird n_f asymptotisch eins, und T_0 wird zur einzigen Energieskala. T_0 wurde hier als Maximum der f -Spektraldichte angenommen. Wir zeigen in Kapitel 6, daß T_0 tatsächlich proportional zur Kondo-Temperatur ist.

Wir differenzieren (5.3) nach T und erhalten für die spezifische Wärme im magnetischen Limes für tiefe Temperaturen das Skalierungsgesetz

$$C = C\left(\frac{T}{T_K}\right) .$$

Für $T > 0$ ist eine Lösung der NCA bisher nur numerisch möglich. Wir reproduzieren in Abbildung 5.1, wie der Störstellen-Anteil der spezifischen

Wärme als Funktion der Temperatur skaliert, wenn man ihn mit der NCA berechnet [29]. Die Energieskala T_0 ist hier als Lage des Maximums der f -Spektraldichte bestimmt worden (siehe Abbildung 5.3). Sie wird im magnetischen Limes zur einzigen Energieskala. Wir zeigen in Kapitel 6, daß T_0 tatsächlich proportional zur Kondo-Temperatur ist.

5.4.2 Magnetische Suszeptibilität

Für die Magnetisierung $M(H) = -\frac{\partial}{\partial H}F$ gilt das Skalierungsgesetz

$$M = M\left(\frac{T}{\Gamma}, \frac{T}{T_K}, \frac{g\mu_B H}{T_K}\right), \quad (5.8)$$

das in Anhang I hergeleitet wird. Für die magnetische Suszeptibilität ergibt sich bei verschwindendem Magnetfeld im magnetischen Limes das Skalierungsgesetz:

$$\chi(H=0) = \frac{1}{T_K} \chi\left(\frac{T}{T_K}\right). \quad (5.9)$$

Wir reproduzieren in Abbildung 5.2, wie der Störstellen-Anteil der statischen magnetischen Suszeptibilität bei verschwindendem Magnetfeld als Funktion der Temperatur skaliert, wenn man ihn mit der NCA berechnet [29]. Im magnetischen Limes wird T_K zur einzigen Energieskala. Für $T \gg T_K$ folgt die Magnetisierung M einem Curie-Gesetz:

$$M(H \rightarrow 0) \propto \frac{1}{T}.$$

Bei niedrigen Temperaturen schirmen die niederenergetischen Teilchen-Loch-Anregungen des Fermi-Sees den Spin der Störstelle zunehmend ab, und die magnetische Suszeptibilität saturiert. T_K ist also die Energieskala der Spinanregungen.

Das gleiche Phänomen kann man für $T=0$ und variierende Magnetfelder beobachten: Es gibt einen Übergang von einem Parameterbereich hoher Temperaturen oder Magnetfelder, in dem die Störungstheorie anwendbar ist, zu einem Parameterbereich niedriger Magnetfelder und Temperaturen, in dem das magnetische Moment der Störstelle dynamisch abgeschirmt

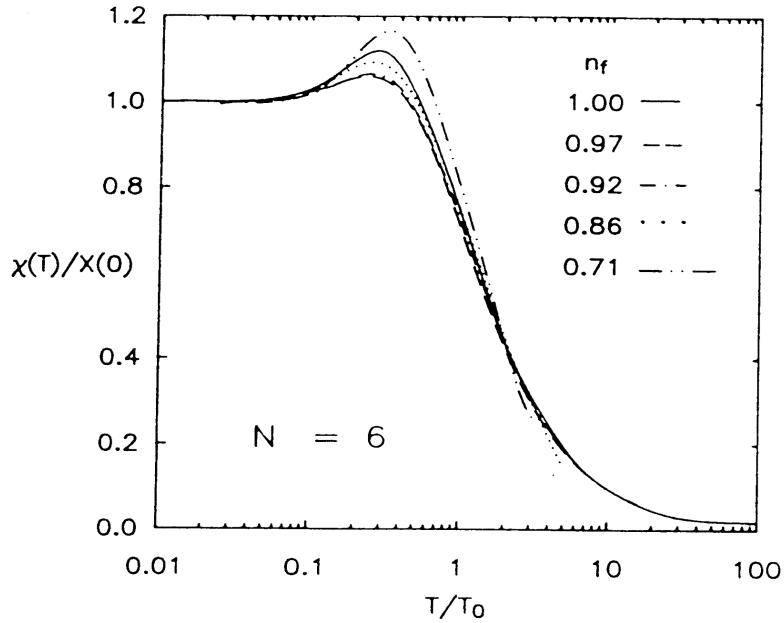


Abbildung 5.2: Skalierung des Störstellen-Anteils der statischen magnetischen Suszeptibilität mit der Temperatur nach [29]. Im magnetischen Limes wird n_f asymptotisch eins, und T_0 wird zur einzigen Energieskala. T_0 wurde hier als Maximum der f -Spektraldichte angenommen. Wir zeigen in Kapitel 6, daß T_0 tatsächlich proportional zur Kondo-Temperatur ist.

wird. Der Übergang findet auf *einer* Energieskala statt, ist also ein universelles Phänomen ([24], Seite 334). Der Übergang ist kontinuierlich und ist damit kein Phasenübergang. Das Phänomen wird *crossover* genannt. Wir werden dieses *crossover*-Phänomen für $T=0$ als Funktion des Magnetfeldes in Kapitel 7 analytisch beschreiben.

5.5 Die Abrikosov-Suhl-Resonanz

Wären die Elektronen auf der Störstelle unkorreliert und läge ϵ_f im Band, so hätte die Einteilchen- f -Spektralfunktion eine Resonanz der Breite ρV^2 bei ϵ_f , die von den Ladungsanregungen herrührt [9]. Durch die starken Korrelationen bildet sich jedoch zusätzlich für

$$\epsilon_f < 0, \quad |\epsilon_f| \gg \rho V^2$$

in der Nähe der Fermi-Energie $\omega = 0$ eine schmale Resonanz aus, die von den Spinanregungen kommt. Diese „Abrikosov-Suhl-“ oder „Kondo-Resonanz“

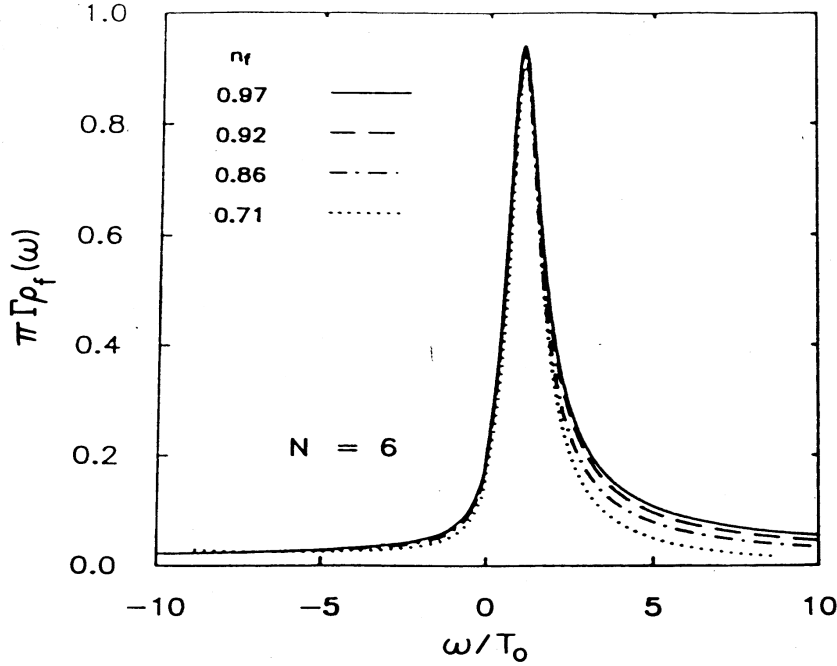


Abbildung 5.3: Skalierung der Kondo-Resonanz im Anderson-Modell, mit der NCA genähert, im magnetischen Limes, nach [29]. Je kleiner V wird, desto mehr nähert sich die f -Besetzung n_f eins, und desto besser skaliert die Form der Resonanz. Als Kondo-Temperatur wurde hier die Position T_0 des Maximums der Resonanz *angenommen*. Dies haben wir für die exakte Lösung und für die NCA gezeigt.

ist ein Vielteilchen-Effekt. Es wird allgemein angenommen [9], daß die Spektraldichte der Störstelle bei $T = 0$ als Funktion der Frequenz skaliert. Man erwartet wegen der Haldane-Skalierung (siehe Kapitel 6) eine Resonanz der Breite $\propto \rho V^2$ um den Wert $\omega \approx \epsilon_f$, der von den Ladungsanregungen herrührt. Außerdem erwartet man eine Resonanz der Breite $\propto T_K$ nahe der Fermi-Energie $\omega = 0$. Für große N sollte im magnetischen Limes die f -Spektralfunktion nahe der Kondo-Resonanz qualitativ die Form einer lorentzförmigen Resonanz mit Breite T_K/N bei $\omega \approx T_K$ haben ([9], Seite 193 und [14], Seite 884):

$$\rho V^2 G_f(\omega) \propto \frac{1}{\frac{\omega}{T_K} - 1 + i\frac{1}{N}} \quad . \quad (5.10)$$

Diese Abrikosov-Suhl-Resonanz beschreibt die Spinanregungen des Systems. Sie konnte bisher noch nicht analytisch exakt bestimmt werden.

Aus dem f -Propagator läßt sich der Störstellen-Anteil der Zustandsumme und damit der Thermodynamik *nicht* ermitteln (und erst recht nicht umgekehrt). Dieses Standardresultat ([35], Kapitel 2.8) der Theorie wechselwirkender Fermionen ist hier nicht anwendbar. Denn das physikalische Teilchen auf der Störstelle ist aus je einem Fermion und Pseudoboson aufgebaut, weil die f -Elektronen auf der Störstelle stark korreliert sind. In Wirklichkeit ist der f -Propagator ein Zweiteilchen-Propagator.

Daher kann man mit Hilfe des Bethe-Ansatzes die f -Spektralfunktion nicht berechnen.

Entwickelt man (5.10) bis zu einer endlichen Ordnung in $1/N$, so erhält die Spektraldichte $\rho_f^{1/N}$ eine nichtintegrierte Singularität bei $\omega = T_K$ [36].

Mit der numerischen Renormierungsgruppe ist es gelungen, für $N = 2$ die f -Spektralfunktion numerisch zu ermitteln. Allerdings folgt daraus alleine nicht, daß sich die f -Spektralfunktion universell verhält.

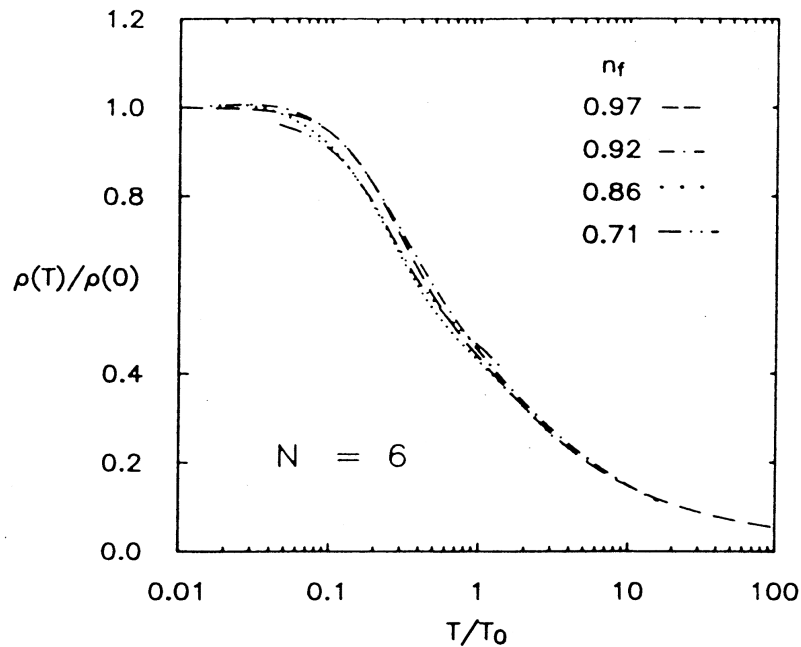


Abbildung 5.4: Störstellen-Anteil des elektrischen Widerstandes im magnetischen Limes, nach [29]. T_0 gibt die Lage des Maximums der Kondo-Resonanz, ist also proportional zur Kondo-Temperatur.

Welche Aussagen kann man mit Hilfe der relevanten Skelettdiagramme treffen? Bickers, Cox und Wilkins haben die f -Spektraldichte und den Störstellen-Anteil des elektrischen Widerstands mit Hilfe der NCA numerisch für tiefe Temperaturen im magnetischen Limes berechnet [29], siehe Abbildung 5.3 und 5.4. In diesem Limes ist die Kondo-Temperatur T_K in den Skalierungsgleichungen (5.6) und (5.7) für kleine Frequenzen und Temperaturen die einzige Energieskala. Damit ist die Energieskala T_0 von Bickers, Cox und Wilkins proportional zu T_K . Sowohl Breite als auch Lage der Resonanz skalieren mit der exakten Kondo-Temperatur. Die NCA beschreibt die Kondo-Resonanz qualitativ richtig und enthält alle Diagramme bis zur Ordnung V^4 und $1/N$ einschließlich. Daher werden Skelettdiagramme höherer Ordnung das Bild qualitativ nicht ändern [34, 37].

Kapitel 6

Skalierungsgleichungen

Wir zeigen hier das universelle Verhalten des Störstellen-Anteils F der freien Energie und des f -Propagators. Die Verallgemeinerung für statische Magnetfelder findet sich in Anhang I.

Die Skalierungsgleichung (5.3) für den Störstellen-Anteil F der freien Energie folgt aus den beiden partiellen Differentialgleichungen

$$F = T \frac{\partial}{\partial T} F + \rho V^2 \frac{\partial}{\partial \rho V^2} F + \epsilon_f \frac{\partial}{\partial \epsilon_f} F + D \frac{\partial}{\partial D} F \quad (6.1)$$

und

$$D \frac{\partial}{\partial D} F = -\rho V^2 + \rho V^2 \left(1 - \frac{1}{N}\right) \frac{\partial}{\partial \epsilon_f} F \quad . \quad (6.2)$$

Setzt man nämlich (6.2) in (6.1) ein, erhält man die Skalierungsgleichung:

$$F = T \frac{\partial}{\partial T} F + \rho V^2 \frac{\partial}{\partial \rho V^2} F + \epsilon_f \frac{\partial}{\partial \epsilon_f} F + \rho V^2 \left(1 - \frac{1}{N}\right) \frac{\partial}{\partial \epsilon_f} F - \rho V^2 \quad . \quad (6.3)$$

Führt man die renormierte Energiedifferenz zwischen f^0 - und f^1 -Konfiguration ein,

$$\epsilon_f^* = \epsilon_f + \rho V^2 \left(1 - \frac{1}{N}\right) \ln \frac{D}{\rho V^2} \quad , \quad (6.4)$$

so folgt aus (6.2) die Skalierungsgleichung

$$F - E_0 = (F - E_0)(D, \epsilon_f, \rho V^2, T) = (F - E_0)(\epsilon_f^*, \rho V^2, T) \quad . \quad (6.5)$$

Diese Gleichung ist als Haldane-Skalierung bekannt [9, 38].

Führt man dagegen die Energieskala (5.1) und die Kondo-Temperatur (5.2) ein, ergibt sich aus (6.3) das Skalierungsgesetz (5.3).

Genauso zeigt man, daß die Skalierungsgleichung (5.4) für den f -Propagator aus den folgenden beiden partiellen Differentialgleichungen folgt:

$$\left(T \frac{\partial}{\partial T} + \omega \frac{\partial}{\partial \omega} + \rho V^2 \frac{\partial}{\partial \rho V^2} + \epsilon_f \frac{\partial}{\partial \epsilon_f} + D \frac{\partial}{\partial D} \right) G_f(\omega) = -G_f(\omega) \quad (6.6)$$

und

$$D \frac{\partial}{\partial D} (\rho V^2 G_f) = \left(1 - \frac{1}{N} \right) \rho V^2 \frac{\partial}{\partial \epsilon_f} (\rho V^2 G_f) \quad . \quad (6.7)$$

Wir erkennen folgende Struktur: Die jeweils erste der Differentialgleichungen beschreibt, wie die skalierende Größe von den *Hochenergie-Skalen* ρV^2 , ϵ_f und D abhängt. Die jeweils zweite Differentialgleichung ergibt die Haldane-Skalierung, und diese beiden Gleichungen *zusammen* ergeben die Tieftemperatur-Skala T_K .

Die hier gefundenen Skalierungsgleichungen und die Energieskalen gelten entsprechend für *jede* Observable, wie wir in Abschnitt 6.3 anhand der Diagrammstruktur zeigen.

6.1 Erste Skalierungsgleichung

Weil diese Skalierungsgleichung nur das Hochenergie-Verhalten beschreibt, folgt sie sofort aus dem erzeugenden Funktional Φ , das am Sattelpunkt wegen (4.10) nur explizit von V , ϵ_f und T abhängt.

Die Rechnung ist in Anhang G wiedergegeben. An keiner Stelle geht dabei die Diagrammstruktur ein, *außer* daß Skelettdiagramm-Familien mitgenommen werden. Denn genau dann gilt das Variationsprinzip.

6.2 Zweite Skalierungsgleichung

Wenn sich für Metalle mit Störstellen der Störstellen-Anteil von Observablen universell verhält, hängt er bei tiefen Temperaturen *nicht* mehr von

der Bandstruktur ab. Die elektronischen Eigenschaften des Metalls gehen nur noch über die Zustandsdichte an der Fermi-Energie ein. Wie in Kapitel 2 erläutert, hat man dazu bei fester Temperatur den Limes großer Bandbreite D zu betrachten. Alle Größen, die im Limes großer D verschwinden, sind nicht universell.

6.2.1 Beitrag der Skelettdiagramme zweiter Ordnung

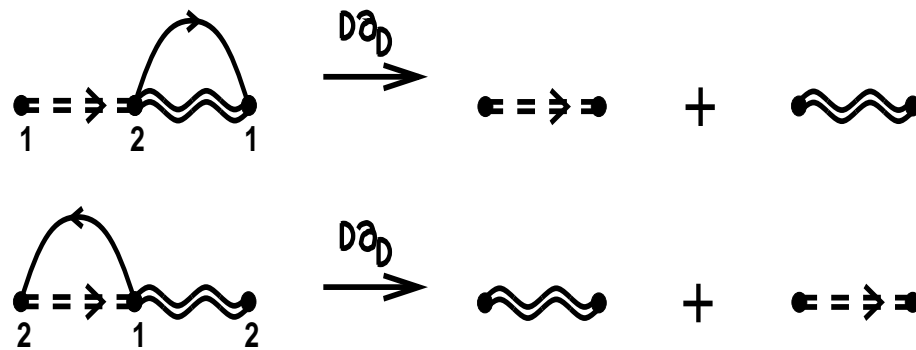


Abbildung 6.1: NCA-Diagramme = Skelettdiagramme zweiter Ordnung, nach D logarithmisch abgeleitet

Man differenziert ein Skelettdiagramm nach D , indem man je eines der Integrale über Leitungselektron-Linien an den Grenzen $\pm D$ auswertet. Man nimmt dazu eine Linie der Leitungselektronen aus dem Diagramm weg. Alle ionischen Propagatoren, die sich *innerhalb* dieser Linie befinden, werden an der unteren Bandkante ($-D$) ausgewertet. Die Fermi-Funktion der Integration gibt im universellen Bereich $T \ll D$ einen Beitrag $f(-D) \approx 1$.

Man braucht die inneren Propagatoren an der oberen Bandkante D nicht auszuwerten. Denn dies ist gleichbedeutend damit, die *äußeren* Propagatoren an der unteren Bandkante ($-D$) auszuwerten, und diese Propagatoren liegen in dem Diagramm mit entsprechend zyklisch vertauschten Vertices wieder innen. Da ein Propagator sich für große z asymptotisch wie $1/z$ verhält, erhalten wir für jeden an der unteren Bandkante ausgewerteten Propagator einen Faktor $-1/D$. Einen Beweis findet man in Anhang H.

Wir nehmen zunächst im erzeugenden Funktional Φ aus Gleichung (4.8) nur die Skelettdiagramme zweiter Ordnung mit. Führt man die logarith-

mische Ableitung $D \frac{\partial}{\partial D}$ bei diesen Diagrammen wie in Abbildung 6.1 durch, bleiben noch die Propagatoren übrig, die rechts dargestellt sind. Der Beitrag der NCA-Skelettdiagramme ist also

$$D \frac{\partial}{\partial D} Z^{\text{NCA}} = 2 \cdot \beta \rho V^2 \oint \frac{dz}{2\pi i} \left(-\frac{1}{2}\right) (R_0(z) + R_m(z)) \frac{D}{(-D)} \quad .$$

Demnach erfüllt die freie Energie der NCA die Skalierungsgleichung (6.2)

$$D \frac{\partial}{\partial D} F^{\text{NCA}} = -\rho V^2 + \rho V^2 \left(1 - \frac{1}{N}\right) \frac{\partial}{\partial \epsilon_f} F^{\text{NCA}} \quad .$$

6.2.2 Beitrag der Skelettdiagramme höherer Ordnung

Das Verfahren gibt uns die Möglichkeit, *alle* Skelettdiagramme nach $1/D$ zu ordnen. Die Skelettdiagramme $\Sigma_f R_f$, die bei nach der logarithmischen Ableitung nach D

$$F \rightarrow D \frac{\partial}{\partial D} F$$

wie $1/D$ oder schneller verschwinden, sind *irrelevant* im erzeugenden Funktional. Nur die Skelettdiagramme $\propto \ln D$ sind *relevant* für die Skalierung und ergeben die Energieskalen des Systems.

Im Anderson-Modell sind *alle* Skelettdiagramme irrelevant *außer* denen zweiter Ordnung. Denn wenn unter einer Leitungselektron-Linie mehr als ein Propagator steht, ergibt sich durch logarithmisches Ableiten nach D an der unteren Bandkante ein Beitrag, der für große D mindestens wie $1/D$ abfällt. Also sind im erzeugenden Funktional nur die Diagramme relevant, in denen unter mindestens einer Leitungselektron-Linie nur *ein* ionischer Propagator steht.

An dieser Stelle geht ein, daß es sich um *Skelettdiagramme* handelt: Wenn in einem Diagramm von vierter oder höherer Ordnung nur *ein* Propagator entweder innerhalb oder außerhalb einer Leitungselektron-Linie verläuft, handelt es sich um einen Selbstenergie-Einschub wie in Abbildung D.3. Einen Beweis findet man in Anhang H.

Zum Beispiel ist das Diagramm sechster Ordnung für $\Sigma_0 R_0$ in Abbildung G.1 irrelevant: Man hat drei Möglichkeiten, logarithmisch nach D

zu differenzieren. Da innerhalb und außerhalb jeder Linie drei Propagatoren stehen, hat das verbleibende Diagramm das Gewicht $1/D^2$; es ist irrelevant.

Wir haben damit *alle* Diagramme summiert! Die Skalierungsgleichung (6.2) gilt damit *exakt*.

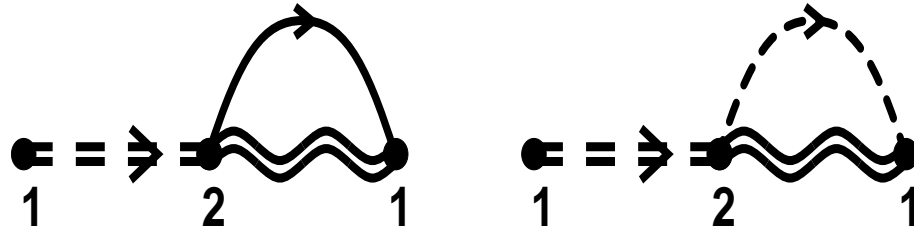


Abbildung 6.2: Die beiden Skelettdiagramme zweiter Ordnung für das erzeugende Funktional F_Ψ des f -Propagators

Die Abhängigkeit (6.7) des f -Propagators von D folgt analog. Relevant sind höchstens die Skelettdiagramme, bei denen es eine Leitungselektron-Linie gibt, unter der nur *ein* ionischer Propagator liegt. Dies sortiert die Skelettdiagramme in Abbildung 6.2 aus.

Aber nur das linke der Skelettdiagramme hängt explizit von D ab, die Integrationsgrenzen im rechten Diagramm sind $-\infty$ und ω . Also erfüllt auch F_Ψ die Skalierungsgleichung (6.2). Differenzieren nach λ_m^2 für $\lambda_1 = \dots = \lambda_N = 0$ und nach ω liefert nach Division durch $f(\omega)$ das Skalierungsgesetz (6.7).

Mit anderen Worten: Die NCA erfüllt die exakten Skalierungsgleichungen des Anderson-Modells. Es ist bisher mit keiner anderen Methode gelungen (siehe Kapitel 3), diese Skalierungsgesetze für das Anderson-Modell zu zeigen.

6.3 Universalität

Die hier gefundene Skalierungsgleichung (6.2) gilt entsprechend für jede Observable. Die Observable ergibt sich stets als Antwort des Systems auf ein geeignetes, ankoppelndes Hilfsfeld. Die relevanten Skelettdiagramme

ergeben automatisch die benötigte Näherung, die richtig skaliert. Sie umfaßt je nach der Observablen andere nackte Diagramme.

Aber die Energieskalen selbst ändern sich nicht, da immer nur das *gleiche* Skelettdiagramm aus Abbildung 6.2 relevant ist. Der Störstellen-Anteil *jeder* Observablen skaliert mit den gleichen Energieskalen. Dies ist *eine* Eigenschaft universellen Verhaltens. Die andere (Unabhängigkeit von der Bandstruktur) diskutieren wir in Kapitel 8.

Die Unterteilung in Skelettdiagramme erlaubt es, die kleinste Anzahl Diagramme zu bestimmen, die noch die richtigen Energieskalen liefert: Für das Anderson-Modell sind dies die Skelettdiagramme zweiter Ordnung (NCA).

Wir möchten hier einem möglichen Mißverständnis begegnen: Wir haben gezeigt, daß zum Beispiel das Skelettdiagramm sechster Ordnung aus Abbildung G.1 irrelevant ist. Aber die entsprechende Selbstenergie trägt zur Zustandssumme sechster Ordnung bei:

$$Z^{(6)} = Sp_f \oint e^{-\beta z} \frac{dz}{2\pi i} \frac{1}{z - H_f - \Sigma_f^{(2)}(z) - \Sigma_f^{(6)}(z)} .$$

Die Selbstenergie $\Sigma_f^{(6)}(z)$ ist nicht irrelevant; sie ist *nicht* von der Ordnung $1/D^2$. Nur *innerhalb des erzeugenden Funktionals* sorgt das Variationsprinzip dafür, daß man nur noch explizite Abhängigkeiten von den Parametern des Systems betrachten muß. Das bedeutet: Die Skelettdiagramme sechster und höherer Ordnung ändern in Gleichung (1.1)

$$X(T, D, V, \rho, \dots) = T \cdot g\left(\frac{T}{T_K}\right)$$

nicht mehr die Energieskala, sondern nur noch die Funktion g .

Wenn man also universelles Verhalten von Störstellensystemen beschreiben möchte, muß man mindestens die NCA-Diagramme mitnehmen. Möchte man diese Näherung verbessern, hat man im erzeugenden Funktional Skelettdiagramme von höherer Ordnung mitzunehmen, wie das die Post-NCA [34] versucht.

Jede Näherung, die nicht in dieses Schema paßt, wird notwendig bei der Beschreibung universellen Verhaltens versagen.

Kapitel 7

Relevante Skelettdiagramme bei $T=0$

Wir parametrisieren in diesem Kapitel den bekannten impliziten Ausdruck für die Grundzustandsenergie der NCA [31, 39, 40, 41] so, daß die Besetzungszahl und die statische magnetische Suszeptibilität in allen wichtigen Grenzfällen *analytisch* berechnet werden kann. Mit Hilfe unserer Parametrisierung sind wir in der Lage, das in den Kapiteln 1 und 5 diskutierte *crossover*-Phänomen zum ersten Mal mit einer Diagrammtechnik zu diskutieren. Dazu bestimmen wir mit Hilfe der NCA für große und kleine Magnetfelder die Magnetisierung, um daraus die Wilson-Zahl zu bestimmen. Sie gibt das Verhältnis der Hochfeld- zur Niederfeld-Energieskala an. Außerdem lassen sich mit unserer Parametrisierung das Analogon der Skalierungsgleichungen (5.3) für die Grundzustandsenergie überprüfen.

7.1 NCA-Differentialgleichungen

In der NCA werden die Skelettdiagramme zweiter Ordnung berücksichtigt (Abbildung 4.2). Wir setzen daher in die Selbstenergie zweiter Ordnung $\Sigma_{0,m}^{(2)}$ die vollen Propagatoren ein und fordern, daß die Dyson-Gleichungen gelten. Mit den Regeln aus Anhang D erhalten wir das Integralgleichungssystem

$$\begin{aligned}\Sigma_m^{(2)}(z) &= \frac{\rho V^2}{N} \int_{-D}^D f(\epsilon) R_0(z + \epsilon) d\epsilon, \\ \Sigma_0^{(2)}(z) &= \frac{\rho V^2}{N} \sum_m \int_{-D}^D f(\epsilon) R_m(z + \epsilon) d\epsilon.\end{aligned}\quad (7.1)$$

Zusammen mit den Dyson-Gleichungen

$$\begin{aligned}R_0(z) &= \frac{1}{z - \Sigma_0^{(2)}(z)} \\ R_m(z) &= \frac{1}{z - \epsilon_f - \Sigma_m^{(2)}(z)}\end{aligned}$$

bilden sie ein selbstkonsistent zu lösendes Gleichungssystem. Diese Gleichungen sind numerisch gelöst worden. Typische Resultate zeigen die Abbildungen 5.1, 5.2, 5.3 und 5.4. Eine analytische Lösung dieser Gleichungen ist für $T > 0$ bisher nicht gelungen. Jedoch lassen sich für $T = 0$ die NCA-Integralgleichungen in Differentialgleichungen verwandeln [31, 39].

Man führt dazu die negativen inversen Propagatoren der $R_{0,m}$ ein:

$$\begin{aligned}Y_0(z) &= \Sigma_0^{(2)}(z) - z \\ Y_m(z) &= \Sigma_m^{(2)}(z) + \epsilon_f - z.\end{aligned}\quad (7.2)$$

Die NCA-Differentialgleichungen für das Anderson-Modell (2.2) folgen für $T = 0$ aus (7.1) durch Differenzieren. Wenn man noch ein statisches Magnetfeld anlegt, lauten die NCA-Differentialgleichungen [14]

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \omega} Y_0 &= -1 - \frac{\rho V^2}{N} \sum_m \frac{1}{\bar{Y}_m + m \cdot g\mu_B H} \\ \frac{\partial}{\partial \omega} \bar{Y}_m &= -1 - \frac{\rho V^2}{N} Y_0^{-1}\end{aligned}\quad (7.3)$$

mit

$$\begin{aligned}Y_m &= \bar{Y}_m + m \cdot g\mu_B H \\ m &= -j, -j + 1, \dots, j.\end{aligned}$$

Dabei ist g ist der g -Faktor des f -Elektrons, μ_B das Bohrsche Magneton und $N=2j+1$.

Da die Selbstenergien für große $\omega \approx -D$ vernachlässigbar klein sind, haben die inversen Propagatoren die asymptotische Gestalt

$$\begin{aligned}\bar{Y}_m(\omega) &\approx -\omega + \epsilon_f \\ Y_0(\omega) &\approx -\omega ,\end{aligned}\tag{7.4}$$

da dann die entsprechenden Propagatoren asymptotisch nackt sind. Die NCA-Differentialgleichungen haben bis auf Terme der Ordnung $O(1/D)$ das Integral

$$\begin{aligned}\frac{Y_0}{\rho V^2} + \frac{1}{N} \ln \left| \frac{Y_0}{\rho V^2} \right| &= \frac{\bar{Y}_m}{\rho V^2} + \frac{1}{N} \sum_m \ln \left| \frac{\bar{Y}_m + mg\mu_B H}{\rho V^2} \right| - \frac{\epsilon_f^*}{\rho V^2} , \\ \epsilon_f^* &= \epsilon_f + \left(1 - \frac{1}{N}\right) \rho V^2 \ln \frac{D}{\rho V^2} .\end{aligned}\tag{7.5}$$

Der Wert für ϵ_f^* ergibt sich, indem man (7.4) einsetzt. Die Vernachlässigung der Terme der Ordnung $O(1/D)$ heißt, daß wir nur am *universellen* Verhalten des Systems interessiert sind. Das Integral der NCA-Differentialgleichungen enthält die beiden Energieskalen ρV^2 und T_K über [31]

$$\ln \frac{T_K}{\rho V^2} = \frac{\epsilon_f^*}{\rho V^2} .$$

7.2 NCA-Grundzustandsenergie

Die *exakten* inversen Propagatoren haben bei $T=0$ bei der Grundzustandsenergie E_0 eine gemeinsame Nullstelle. Wegen der in Anhang C diskutierten Orthogonalitäts-Katastrophe divergieren die zugehörigen Spektraldichten $\rho_{0,m}$ bei E_0 und verschwinden unterhalb von E_0 . Eine Näherung erhält nicht automatisch diese Eigenschaft. Zum Beispiel wird sie in einer $1/N$ -Entwicklung *nicht* [14] reproduziert.

Wir zeigen in Anhang J, daß bei $T=0$ die NCA-Grundzustandsenergie tatsächlich die niedrigste Nullstelle der mit der NCA berechneten inversen

Propagatoren $Y_{0,m}$ ist. Für ein Magnetfeld folgt analog, daß $\bar{Y}_m - jg\mu_B H$ und Y_0 in $\omega = E_0$ als gemeinsame Nullstelle die NCA-Grundzustandsenergie haben.

Das Integral (7.5) kann mit Hilfe der W -Funktion nach Y_0 aufgelöst werden, weil Y_0 und Y_m positiv sind:

$$NV^{-2} \cdot Y_0 = W \left(N \exp \left[(\bar{Y}_m - \epsilon_f^*) \frac{N}{\rho V^2} + \sum_m \ln \left(\frac{\bar{Y}_m + mg\mu_B H}{\rho V^2} \right) \right] \right) . \quad (7.6)$$

Dabei ist die W -Funktion definiert durch die Gleichung

$$W(x) \exp[W(x)] = x \quad \text{für} \quad x \geq 0 . \quad (7.7)$$

Daraus ergibt sich das asymptotische Verhalten

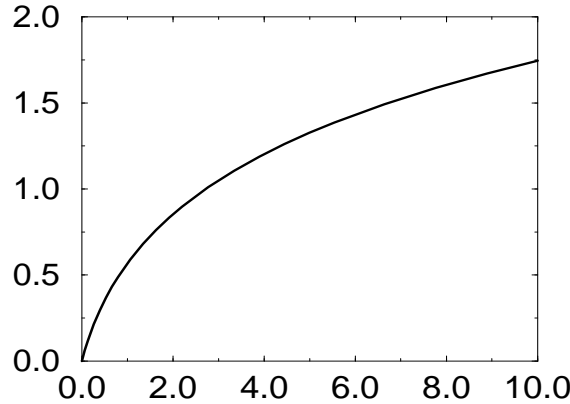


Abbildung 7.1: W -Funktion

$$\begin{aligned} W(x) &= x + o(x^2) \quad \text{für} \quad x \rightarrow 0^+ , \\ W(\exp(x)) &= x - \ln(x) + o(1) \quad \text{für} \quad x \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (7.8)$$

und die Funktionalgleichung

$$\frac{d}{dx} W(f(x)) = \frac{W(f(x))}{1 + W(f(x))} \frac{d}{dx} \ln f(x) .$$

Die W -Funktion ist in Abbildung 7.1 dargestellt.

Die NCA-Grundzustandsenergie E_0 läßt sich nun mit Hilfe von

$$E_0 = D + \int_{-D}^{E_0} d\omega = D + \int_{\bar{Y}_m(-D)}^{jg\mu_B H} \frac{d\omega}{d\bar{Y}_m} d\bar{Y}_m ,$$

den NCA-Differentialgleichungen (7.3) und Gleichung (7.6) folgendermaßen darstellen:

$$E_0 = \epsilon_f - jg\mu_B H \quad (7.9)$$

$$- \int_{jg\mu_B H}^{D+\epsilon_f} \frac{d\omega}{1 + W \left(N \exp \left[(\omega - \epsilon_f^*) \frac{N}{\rho V^2} + \sum_m \ln \left(\frac{\omega + mg\mu_B H}{\rho V^2} \right) \right] \right)} .$$

Bei $H = 0$ läßt sich auch Y_m als Funktion von Y_0 mit der W -Funktion ausdrücken. Es ergibt sich eine zweite Darstellung von E_0 :

$$E_0 = - \int_0^D \frac{d\omega}{1 + W \left(\exp \left[(\omega + \epsilon_f^*) \frac{1}{\rho V^2} + \frac{1}{N} \ln \frac{\omega}{\rho V^2} \right] \right)} . \quad (7.10)$$

Wegen (6.3) und (6.2) erfüllt die Grundzustandsenergie E_0 des Anderson-Modells die Differentialgleichungen

$$E_0 = \rho V^2 \frac{\partial}{\partial \rho V^2} E_0 + \epsilon_f \frac{\partial}{\partial \epsilon_f} E_0 + \rho V^2 \left(1 - \frac{1}{N} \right) \frac{\partial}{\partial \epsilon_f} E_0 - \rho V^2$$

$$D \frac{\partial}{\partial D} E_0 = \rho V^2 \left(1 - \frac{1}{N} \right) \frac{\partial}{\partial \epsilon_f} E_0 - \rho V^2 . \quad (7.11)$$

Die Grundzustandsenergie ist wegen des konstanten Terms $-\rho V^2$ in (7.11) *keine* universelle Funktion. Man rechnet mit Hilfe der Darstellung (7.10) leicht nach, daß die Grundzustandsenergie der NCA diese Differentialgleichungen (7.11) erfüllt. Entwickelt man diesen Ausdruck nach $1/N$, so folgt

$$E_0 = \epsilon_f + \rho V^2 W \left[\frac{D}{\rho V^2} \exp \left(\frac{\epsilon_f}{\rho V^2} \right) \right] \quad (7.12)$$

$$+ \frac{1}{N} \cdot \int_0^D \frac{W}{(1+W)^3} \ln \frac{x}{D} dx + O(1/D) + O(1/N^2) ,$$

$$W = W \left[\frac{D}{\rho V^2} \exp \left(\frac{x + \epsilon_f}{\rho V^2} \right) \right] .$$

Der $1/N^0$ -Term ist das bekannte Ergebnis ([14], Seite 858)

$$E_0 = \rho V^2 \ln \frac{\epsilon_f - E_0}{D} \quad .$$

Damit haben wir auf einfache Weise einen Ausdruck für die Grundzustandsenergie des Anderson-Modells gefunden, der bis zur Ordnung $1/N$ und V^4 einschließlich exakt ist. Vergleiche die komplizierteren Ausdrücke bei Hewson [9].

7.3 Statische magnetische Suszeptibilität: *Crossover*

Das magnetischen Moment der Störstelle verhält sich bei hohen Temperaturen oder Magnetfeldern asymptotisch frei. Bei niedrigen Temperaturen und Magnetfeldern schirmen die Teilchen-Loch-Anregungen das magnetische Moment der Störstelle ab. Dieser Übergang wird *crossover* genannt und durch die Wilson-Zahl charakterisiert ([9], Kapitel 4).

Innerhalb des Energiebereichs, in dem universelles Verhalten auftritt, lassen sich asymptotische Ausdrücke für den Störstellen-Anteil der Magnetisierung bei angelegtem Magnetfeld H sowohl für

$$g\mu_B H \ll T_K \quad (7.13)$$

als auch für

$$g\mu_B H \gg T_K \quad (7.14)$$

ermitteln. Damit kann man eine Niederfeld-Energieskala T_L und eine Hochfeld-Energieskala T_H ermitteln ([9], Kapitel 4). Der Quotient

$$W = \frac{T_H}{T_L}$$

ist im wesentlichen die Wilson-Zahl.

(Eigentlich ist die Wilson-Zahl als Quotient der Hochtemperatur-Energieskala und T_L definiert. Dieses Verhältnis enthält die gleiche Information wie W , da das universelle Verhältnis von Hochtemperatur-

zu Hochfeld-Energieskala allein durch die Störungstheorie festgelegt ist [24, 42].

Jede Theorie, die das universelle Verhalten von Störstellensystemen richtig beschreibt, muß auf denselben Zahlenwert für die universelle Wilson-Zahl W führen. Die Qualität der entwickelten Näherung läßt sich überprüfen, indem W berechnet und mit dem bekannten, exakten Wert verglichen wird.

In diesem Abschnitt beschreiben wir mit der NCA das *crossover* im magnetischen Limes des Anderson-Modells. Wir zeigen zunächst, daß im magnetischen Limes des Anderson-Modells die Magnetisierung als einzige Energieskala die Kondo-Temperatur T_K hat. Damit haben wir explizit gezeigt, daß T_K die Energieskala der Spinfreiheitsgrade ist.

Danach berechnen wir mit Hilfe des NCA die Wilson-Zahl zum ersten Mal mit einer Diagrammtechnik.

7.3.1 Universalität

Wir setzen in Gleichung (7.9) die Kondo-Temperatur

$$T_K = \rho V^2 \exp\left(\frac{\epsilon_f^*}{\rho V^2}\right)$$

ein und erhalten im magnetischen Limes $T_K/\rho V^2 \rightarrow 0$ mit der Substitution $\omega/T_K = x$ den Ausdruck

$$E_0 = \epsilon_f - jg\mu_B H - T_K \cdot \int_{jg\mu_B H/T_K}^{(D+\epsilon_f)/T_K} \frac{dx}{1 + W \left(N \exp \left[\sum_m \ln \left(x + \frac{mg\mu_B H}{T_K} \right) \right] \right)} \quad . \quad (7.15)$$

Nach Ableiten nach H fällt der Integrand hinreichend schnell ab, so daß man dann die obere Integrationsgrenze durch ∞ ersetzen kann. Daher skaliert die Magnetisierung als Funktion von H wie

$$M(H, D, \epsilon_f, V, N) = M\left(\frac{g\mu_B H}{T_K}\right) \quad . \quad (7.16)$$

Damit haben wir explizit gezeigt, daß schon die relevanten Skelettdiagramme ausreichen, um die richtige Energieskala der Spinanregungen zu erhalten.

7.3.2 Kleine Magnetfelder

Wir verwenden für die Grundzustandsenergie die Parametrisierung (7.9). Die Magnetisierung

$$M(H) = -\frac{\partial}{\partial H} E_0$$

verschwindet wegen $\sum_m m = 0$, wenn $H = 0$. Die zweite Ableitung ergibt die statische magnetische Suszeptibilität bei $H = 0$. Mit der Größe ([14], Seite 859)

$$\frac{1}{3}\mu_j^2 N = (g\mu_B)^2 \sum_m m^2$$

läßt sie sich schreiben als

$$\chi(0) = \frac{1}{3}\mu_j^2 N \int_0^{D+\epsilon_f} dY_m \frac{W}{(1+W)^3} \frac{1}{Y_m^2} .$$

Transformiert man nun auf die Integrationsvariable $NY_0/\rho V^2 = W$ und setzt die NCA-Differentialgleichungen ein, so folgt mit Hilfe des Integrals der NCA und partieller Integration die Darstellung

$$\chi(0) = \frac{1}{3}\mu_j^2 \frac{1}{\rho^2 V^4} \int_0^D \frac{2W+1}{W(1+W)^3} dx , \quad (7.17)$$

wobei das Argument der W -Funktion wie folgt lautet:

$$\exp\left(\frac{x+\epsilon_f}{\rho V^2}\right) \left(\frac{x}{\rho V^2}\right)^{\frac{1}{N}} \left(\frac{D}{\rho V^2}\right)^{1-\frac{1}{N}} = \exp\left(\frac{x}{\rho V^2}\right) \left(\frac{x}{\rho V^2}\right)^{\frac{1}{N}} \frac{T_K}{\rho V^2} .$$

Im magnetischen Limes ist dieses Argument von W wegen

$$|\epsilon_f^*| \gg \rho V^2 , \quad \epsilon_f^* < 0$$

sehr klein für $x < |\epsilon_f^*|$, darüber wird $W > 1$ und damit das Integral klein. Also kann man den Integranden durch $1/W$ und die W -Funktion durch ihr

Argument ersetzen und die Integration bis ∞ ausdehnen. Man erhält also im Rahmen der NCA

$$\chi^{\text{NCA}}(0) = \frac{1}{3} \mu_j^2 \frac{1}{T_K} \int_0^\infty e^{-t} t^{-1/N} dt = \frac{1}{3} \mu_j^2 \frac{1}{T_K} \Gamma(1 - 1/N) \quad . \quad (7.18)$$

Das exakte Resultat [9]

$$\chi(0) = \frac{1}{3} \mu_j^2 \frac{1}{T_K} \frac{1}{\Gamma(1 + 1/N)} \quad (7.19)$$

wurde durch Anpassung der Resultate des Bethe-Ansatzes an eine $1/N$ -Entwicklung erhalten (siehe Anhang A.4). Beide Resultate stimmen bis $o(1/N)$ überein. Dies muß so sein, da die NCA alle Diagramme der Ordnung $1/N^0$ und $1/N$ enthält *und* richtig skaliert (siehe Abschnitt 5.3). Dies widerspricht der Behauptung von Kuramoto und Kojima [41], es ergäbe sich mit der NCA im magnetischen Limes der exakte Wert für $\chi(0)$.

7.3.3 Große Magnetfelder

Für große Magnetfelder $\mu_B H \gg T_K$ ist die Störungstheorie anwendbar. Wir zeigen nun explizit, daß die NCA bis zur vierten Ordnung in V einschließlich gilt. Dazu schreiben wir mit Hilfe von

$$J = \frac{V^2}{|\epsilon_f|}$$

die parametrisierte Grundzustandsenergie (7.9) um: Wir erhalten mit

$$T_K = \tilde{D} e^{-1/(\rho J)} \sqrt[N]{\rho J}, \quad \tilde{D} = D \left(\frac{|\epsilon_f|}{D} \right)^{\frac{1}{N}}$$

durch explizites Entwickeln von (7.15) bis in zweiter Ordnung in J (denn bis zu dieser Ordnung nimmt die NCA alle Diagramme mit) für die Magnetisierung

$$\frac{M(H)}{j g \mu_B} = 1 - \frac{\rho J}{N} + \frac{(\rho J)^2}{N} \ln \left(\frac{g \mu_B H \cdot \sqrt[N]{e} \cdot \exp \left[\frac{2}{N(N-1)} \sum_{m=1}^{N-1} m \cdot \ln(m) \right]}{\tilde{D}} \right) \quad .$$

Andererseits wissen wir wegen (7.16), wie die Magnetisierung skaliert. Wie in Anhang A.3 folgt *allein* aus der Störungstheorie und der exakten Skalierung die Asymptotik

$$\frac{M(H)}{jg\mu_B} = 1 - \frac{1}{N} \cdot \frac{1}{\ln \frac{g\mu_B H}{T_H}} - \frac{1}{N^2} \cdot \frac{\ln \ln \frac{g\mu_B H}{T_H}}{\ln^2 \frac{g\mu_B H}{T_H}} + O\left(\frac{\ln \ln \frac{g\mu_B H}{T_H}}{\ln^3 \frac{g\mu_B H}{T_H}}\right)$$

mit

$$T_H = \frac{T_K}{\sqrt[N]{e} \exp\left[\frac{2}{N(N-1)} \sum_{m=1}^{N-1} m \cdot \ln(m)\right]} \quad . \quad (7.20)$$

Dabei ist T_H eindeutig durch die Forderung festgelegt, daß die asymptotische Entwicklung keine Terme

$$\propto \frac{1}{\ln^2 \frac{g\mu_B H}{T_H}}$$

enthalten soll ([9], Seite 157).

7.3.4 Wilson-Zahl

Die Energieskala T_L ist durch die inverse $T=0, H=0$ -Suszeptibilität festgelegt:

$$\chi(T=0, H=0) = \frac{1}{3} \mu_j^2 \frac{1}{T_L} \quad (7.21)$$

Sie wurde so festgelegt, da sich für hohe Temperaturen das Curie-Gesetz als

$$\chi(H=0) = \frac{1}{3} \mu_j^2 \frac{1}{T}$$

ergibt. T_L ist wegen (7.19) proportional zur Kondo-Temperatur:

$$T_L = T_K \Gamma(1 + 1/N) \quad . \quad (7.22)$$

Der NCA-Wert lautet wegen (7.18)

$$T_L^{\text{NCA}} = \frac{T_K}{\Gamma(1 - 1/N)} \quad . \quad (7.23)$$

Die Wilson-Zahl ist definiert als Quotient aus der Energieskala bei hohen Magnetfeldern, T_H , und der bei kleinen Magnetfeldern, T_L . Sie lautet damit

$$W = \frac{T_H}{T_L} = \frac{1}{\Gamma(1 + 1/N) \sqrt[N]{e} \exp \left[\frac{2}{N(N-1)} \sum_{m=1}^{N-1} m \cdot \ln(m) \right]}, \quad (7.24)$$

während sich aus den relevanten Skelettdiagrammen, der NCA, ergibt:

$$W^{\text{NCA}} = \frac{T_H}{T_L^{\text{NCA}}} = \frac{\Gamma(1 - 1/N)}{\sqrt[N]{e} \exp \left[\frac{2}{N(N-1)} \sum_{m=1}^{N-1} m \cdot \ln(m) \right]}. \quad (7.25)$$

Damit stimmt diese Wilson-Zahl mit dem exakten Ergebnis bis einschließlich der Ordnung $1/N$ überein.

Es gibt zur Zeit kein anderes Verfahren, mit dem man für das Anderson-Modell die Wilson-Zahl direkt berechnen könnte, wie in Kapitel 3 diskutiert. Der „exakte“ Wert für die Wilson-Zahl des Anderson-Modells ergab sich [9] aus einer Anpassung der Bethe-Ansatz-Resultate an die der $1/N$ -Entwicklung.

7.4 Vergleich mit der Post-NCA

Wie in Abschnitt 5.3 diskutiert, sollte sich die Wilson-Zahl verbessern, wenn wie bei der Post-NCA im erzeugenden Funktional Familien von Skelettdiagrammen von höherer Ordnung in $1/N$ mitgenommen werden. Wir vergleichen hier die numerischen Daten von Anders [34] für die statische magnetische Suszeptibilität bei $T = 0, H = 0$ der Post-NCA mit unseren analytischen Daten für die NCA für $N = 2, 4, 6$, relativ zum exakten Wert:

N	2	4	6
NCA	1.57	1.11	1.05
Post-NCA	0.8	0.9	0.94

Die Daten zeigen, daß die Post-NCA für große N nicht schneller als die NCA gegen eins strebt. Das fehlende Skelettdiagramm achter Ordnung in V ist von der Ordnung $1/N^2$ und sollte diese Werte nach oben

hin korrigieren (siehe Abschnitt 5.3) . Jedoch scheint es zweifelhaft, ob die dafür benötigte Vierfach-Integration in der Iteration zur Lösung der Selbstkonsistenz-Gleichung numerisch bewältigt werden kann.

Es sei noch einmal darauf hingewiesen, daß man solange die Post-NCA nicht endgültig bewerten kann, wie dieses Diagramm fehlt. Damit die Post-NCA als eine Verbesserung der NCA angesehen werden kann, muß ihre Wilson-Zahl näher am exakten Resultat liegen als die der NCA.

7.5 Statische magnetische Suszeptibilität: nichtmagnetischer Limes

Wir verwenden die Parametrisierung (7.17) für die magnetische Suszeptibilität. Im nichtmagnetischen Limes $\epsilon_f^* \gg \rho V^2$ ist W in (7.17) bis auf einen Bereich

$$\omega \lesssim T_K$$

groß. Daher kann man die Integrationsgrenzen bis unendlich ausdehnen, und mit $x = \epsilon_f^* u$ und $J^* = \rho V^2 / \epsilon_f^*$ erhält man

$$\chi(0) \approx \frac{1}{3} \mu_j^2 \frac{1}{\rho V^2 J^*} \int_0^\infty \frac{2du}{(1+W)^3}$$

mit

$$W = W \left[\exp \left(\frac{1+u}{\rho J^*} + \frac{1}{N} \ln \frac{u}{\rho J^*} \right) \right] .$$

Es ergibt sich, nach J^* entwickelt

$$\chi(0) = \frac{1}{3\rho V^2} \mu_j^2 \left((J^*)^2 + 2\left(1 - \frac{1}{N}\right) (J^*)^3 \ln(J^*) \right) + O((J^*)^3) \quad (7.26)$$

für die statische magnetische Suszeptibilität. Dies stimmt mit dem störungstheoretischen Resultat [9] bis zur vierten Ordnung in V und bis zur Ordnung $1/N$ überein.

Die NCA nimmt alle diese Diagramme mit. Denn da es kein Skelettdiagramm vierter Ordnung gibt, ist die NCA bis V^4 einschließlich exakt.

7.6 f -Besetzung

7.6.1 Nichtmagnetischer Limes

Wir benutzen die Darstellung (7.10) und erhalten analog zur Suszeptibilität eine Reihe in $J^* = V^2/\epsilon_f^*$:

$$\begin{aligned} n_f &= \frac{\partial}{\partial \epsilon_f} E_0 = \frac{1}{J^*} \int_0^\infty \frac{W du}{(1+W)^3} \\ &\approx J^* - (J^*)^2 \left(1 - \frac{1}{N}\right) (1 + \ln J^*) + \dots \quad . \end{aligned} \quad (7.27)$$

Auch dies stimmt mit dem störungstheoretischen Resultat [9] überein.

7.6.2 Magnetischer Limes

In der Darstellung (7.9) ist W groß. Also kann man die Integration bis unendlich ausdehnen. Differenzieren nach ϵ_f liefert mit $J^* = V^2/|\epsilon_f^*|$

$$n_f = 1 - \frac{N}{J^*} \int_0^\infty \frac{W du}{(1+W)^3}$$

mit

$$W = W \left[N \exp \left(N \frac{1+u}{J^*} + N \ln \frac{u}{J^*} \right) \right] \quad .$$

Die Entwicklung nach J^* gibt

$$n_f = 1 - \frac{J^*}{N} - \frac{(J^*)^2}{N} \left(1 - \frac{1}{N}\right) (1 + \ln J^*) + \dots \quad . \quad (7.28)$$

Dies stimmt bis zu dieser Ordnung mit dem exakten Resultat [9] überein.

Kapitel 8

Skalierungsgleichungen: Bandstruktur

Wir haben bisher für das Band der Leitungselektronen eine konstante Zustandsdichte angenommen, was nicht sehr realistisch ist. Unter welchen Umständen lassen sich Skalierungsgleichungen wie (6.1) und (6.2) finden, wenn man nur fordert, daß die Zustandsdichte $\tilde{\rho}(\omega)$ des Leitungsbandes mit D skaliert?

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}(\omega) &= \rho\left(\frac{\omega}{D}\right), \\ \int \tilde{\rho}(\omega) d\omega &= 2D = D \int \rho(u) du \quad .\end{aligned}\tag{8.1}$$

Die bisher verwendete Zustandsdichte ist ein Spezialfall. Die erste Skalierungsgleichung kann man wegen

$$T \frac{\partial}{\partial T} \rho(\omega T/D) = -D \frac{\partial}{\partial D} \rho(\omega T/D)$$

übernehmen. Für die zweite untersuchen wir wie in Anhang H den Ausdruck

$$Q = V^2 \int \rho(\omega/D) \Lambda_1(z + \omega) f(\omega) d\omega \cdot e^{-\beta z} \Lambda_2(z),$$

der eine Integration über eine Leitungselektron-Linie darstellt. Λ_1 steht für die m Propagatoren, die sich innerhalb der Linie befinden. $e^{-\beta z} \Lambda_2(z)$ hat nur für $z \lesssim E_0 < 0$ spektrales Gewicht. Logarithmisches Differenzieren nach D ergibt nach der Umbenennung $\omega = uD$

$$D \frac{\partial}{\partial D} Q = D \int u \rho'(u) f(uD) (-D) \Lambda_1(z + uD) du \cdot e^{-\beta z} \Lambda_2(z) \quad .$$

Für Zustandsdichten, die nahe der Fermi-Energie nicht viel variieren, können wir annehmen, daß $u\rho'(u)$ nur dann ein scharfes Maximum hat, wenn $|u|$ von der Größenordnung eins ist. Dann können wir $\Lambda_1(z + uD)$ durch seinen asymptotischen Wert $1/(-uD)^m$ und die Fermi-Funktion bis auf Terme $\propto 1/D$ durch ihren Wert bei $T=0$ ersetzen. Q skaliert wie

$$D \frac{\partial}{\partial D} Q \propto D^{1-m} \quad .$$

Nur die NCA-Diagramme ($m=1$) sind relevant; es folgt

$$\begin{aligned} D \frac{\partial}{\partial D} Q &= -V^2 \int_{-D}^0 \rho'(u) du \cdot e^{-\beta z} \Lambda_2(z) \\ &= -V^2 \rho(0) e^{-\beta z} \Lambda_2(z) \quad . \end{aligned}$$

Nur die Zustandsdichte an der Fermi-Energie geht ein. Für alle Zustandsdichten, die lokal bei der Fermi-Energie konstant sind, gelten also die gleichen Skalierungsgesetze.

Wir haben damit ein Kriterium abgeleitet, unter welchen Umständen die NCA die richtigen Energieskalen bei nicht konstanter Zustandsdichte liefert. Wie ändern sich die Energieskalen des Systems, wenn die Zustandsdichte nahe der Fermi-Energie stark variiert? Wir untersuchen diese Frage im nächsten Abschnitt.

8.1 Skalierungsgleichungen für eine singuläre Zustandsdichte

Wir zeigen anhand einer Singularität an der Fermi-Energie explizit, wann Skelettdiagramme höherer Ordnung relevant werden. Die Zustandsdichte habe die Form

$$\begin{aligned} \rho(\omega/D) &\propto \left(\frac{D}{|\omega|} \right)^\alpha & (8.2) \\ D \frac{\partial}{\partial D} \rho(\omega/D) &= \alpha \rho(\omega/D) \quad . \end{aligned}$$

Für $1 > \alpha > 0$ haben wir eine integrable Singularität an der Fermi-Energie. Die logarithmische Ableitung eines Skelettdiagramms n -ter Ordnung $\Sigma_f^{(n)} R_f$ nach D ergibt pro Leitungselektron-Linie $\alpha \Sigma_f^{(n)} R_f$. Da ein Skelettdiagramm n -ter Ordnung $n/2$ Leitungselektron-Linien hat, reproduziert es sich $n/2$ mal. Mit anderen Worten: Skelettdiagramme *jeder* Ordnung sind relevant. Trotzdem reichen die Skelettdiagramme zweiter Ordnung aus, um eine richtig skalierende Näherung zu erhalten.

Die erste Skalierungsgleichung bleibt unverändert, da in sie nur eingeht, daß die Zustandsdichte mit D skaliert. Die zweite Skalierungsgleichung ist

$$D \frac{\partial}{\partial D} F = \alpha \rho V^2 \frac{\partial}{\partial \rho V^2} F \quad .$$

Insgesamt:

$$F = T \frac{\partial}{\partial T} F + (1 + \alpha) \rho V^2 \frac{\partial}{\partial \rho V^2} F + \epsilon_f \frac{\partial}{\partial \epsilon_f} F \quad .$$

Neben der Energieskala ρV^2 gilt für die Energieskala der Spinanregungen

$$T_K \propto J^{1/\alpha} \quad .$$

Zusammengefaßt: Wenn die Zustandsdichte an der Fermi-Energie stark variiert, werden Skelettdiagramme höherer Ordnung relevant.

Kapitel 9

Coqblin-Schrieffer-Modell

Das Coqblin-Schrieffer-Modell folgt aus dem Anderson-Modell (2.2) mittels einer kanonischen Transformation [19]

$$H_{\text{eff}} = e^S H e^{-S}$$

für den Fall $\epsilon_f \rightarrow -\infty$, wenn das Elektron auf der Störstelle völlig lokalisiert ist. Man projiziert dazu die Ladungsanregungen in niedrigster Ordnung in V heraus und macht für S den Ansatz

$$S = \frac{-V}{\sqrt{N} \epsilon_f} \sum_{qn} (c_{qn}^+ f_n b^+ - h.k.) \quad . \quad (9.1)$$

Es folgt für $|\epsilon_f| \gg D$

$$[S, H_c + H_f] = -H_1 \quad .$$

In zweiter Ordnung in V gilt

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= H_0 + H_f + \frac{1}{2} [S, H_1] + O(V^3) \\ &\longrightarrow H_0 + H_f - \frac{V^2}{|\epsilon_f| N} \sum_{pq,mn} [b f_n^+ c_{pn}, c_{pm}^+ f_m b^+] \quad . \end{aligned}$$

Für $\epsilon_f \rightarrow -\infty$ ist die Störstelle stets einfach besetzt, so daß nur der Teil $\propto b b^+$ beiträgt. Verschiebt man noch H um $(-H_f) \equiv (-\epsilon_f)$, so erhält man bis auf eine Konstante das Coqblin-Schrieffer-Modell (2.4):

$$H = \sum_{|\epsilon_p| < D, m} \epsilon_p c_{pm}^+ c_{pm} + \frac{J}{N} \sum_{pq,mn} c_{pm}^+ c_{qn} f_n^+ f_m - 2 \frac{\rho J D}{N} \quad , \quad (9.2)$$

wobei

$$J = \frac{V^2}{|\epsilon_f|}$$

die Stärke der Wechselwirkung angibt. Dies Modell beschreibt eine Austausch-Wechselwirkung zwischen Störstelle und Fermi-See.

Was sind die Energieskalen dieses Modells? Das Anderson-Modell enthält auch im Limes $\epsilon_f^* \ll -\rho V^2$ Ladungsanregungen, siehe (7.28). Diese haben wir mit Hilfe der Schrieffer-Wolff-Transformation herausprojiziert, weil Ladungs- und Spinanregungen für $T \rightarrow 0$ in diesem Limes entkoppeln [10]. Die verbleibenden Spinanregungen werden durch das Coqblin-Schrieffer-Modell beschrieben. Für niedrige Temperaturen und $\epsilon_f^* \ll -\rho V^2$ sollte das universelle Verhalten der beiden Modelle übereinstimmen.

Jedoch lassen sich die Skalierungsgesetze des Anderson-Modells *nicht* auf das Coqblin-Schrieffer-Modell übertragen. Drückt man nämlich die Skala der Spinanregungen (5.2) des Anderson-Modells mit Hilfe von J aus, erhält man

$$T_K = \sqrt[N]{\rho J D} e^{-1/(\rho J)} \cdot \left(\frac{|\epsilon_f|}{D} \right)^{\frac{1}{N}}, \quad D \gg |\epsilon_f|.$$

Dagegen erhält man für die Energieskala des Coqblin-Schrieffer-Modells [9]

$$T_K^{\text{CS}} = \sqrt[N]{\rho J D} e^{-1/(\rho J)}. \quad (9.3)$$

Man darf also die Grenzübergänge

$$\epsilon_f \rightarrow -\infty, \quad D \rightarrow \infty$$

nicht vertauschen. Denn weil die Ladungsanregungen im Coqblin-Schrieffer-Modell herausprojiziert sind, ändern die Propagatoren $R_f(z)$ für $z \rightarrow -\infty$ ihr asymptotisches Verhalten.

9.1 Erzeugendes Funktional

Wir vollziehen die Schrieffer-Wolff-Transformation für die ionischen Propagatoren $R_f(z)$ nach. Dazu verschieben wir wie im vorherigen Abschnitt das

Spektrum von H um $(-\epsilon_f)$, indem wir das Argument z um ϵ_f verschieben, und nennen

$$\begin{aligned}
-\frac{V^2}{\epsilon_f} &= \frac{V^2}{|\epsilon_f|} &\rightarrow J \\
\frac{1}{\epsilon_f} \Sigma_0(z + \epsilon_f) &&\rightarrow \Pi(z) \\
\epsilon_f R_0(z + \epsilon_f) &= \frac{1}{1 + \frac{z}{\epsilon_f} - \frac{1}{\epsilon_f} \Sigma_0(z + \epsilon_f)} &\rightarrow R_0(z) = \frac{1}{1 - \Pi(z)} \\
\Sigma_m(z + \epsilon_f) &&\rightarrow \Sigma_m(z) \\
R_m(z + \epsilon_f) &&\rightarrow R_m(z) = \frac{1}{z - \Sigma_m(z)} .
\end{aligned}$$

Hier ist J positiv im Gegensatz zu Bickers ([14], Seite 893). Wir gewichten jeden Vertex mit $i\sqrt{\rho J/N}$, da ein Diagramm $2n$ -ter Ordnung in V statt $\rho^n V^{2n}$ nun den Vorfaktor $(-1)^n (\rho J)^n$ trägt.

Wegen $|\epsilon_f| \gg D, |z|$ haben wir den Term z/ϵ_f in $\epsilon_f R_0(z + \epsilon_f)$ vernachlässigt und damit die Ladungsanregungen herausprojiziert.

Wir übertragen so das erzeugende Funktional (hier für den Störstellen-Anteil der Zustandssumme) vom Anderson-Modell:

$$\begin{aligned}
\Phi &= \beta \sum_m \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} \left(\sum_n \left(1 - \frac{1}{n}\right) \Sigma_m^{(n)}(z) \cdot R_m(z) + \ln \left[z - \sum_n \Sigma_m^{(n)}(z) \right] \right) \\
&+ \beta \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} \left(\sum_n \left(1 - \frac{1}{n}\right) \Pi^{(n)}(z) \cdot R_0(z) + \ln \left[1 - \sum_n \Pi^{(n)}(z) \right] \right). \quad (9.4)
\end{aligned}$$

Durch partielle Integration folgt wie in Anhang E die Sattelpunkteigenschaft und

$$\Phi(\text{Sattelpunkt}) = Z = \sum_m \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} R_m(z) .$$

9.2 Analogon der NCA

Das Analogon der NCA für das Coqblin-Schrieffer-Modell heißt „self-consistent ladder approximation“ [14]. Wir zeigen in diesem Abschnitt, daß diese Näherung, die wir NCA für das Coqblin-Schrieffer-Modell nennen wollen, die richtige Energieskala ergibt.

Die NCA-Gleichungen lassen sich aus den NCA-Gleichungen (7.1) des Anderson-Modells wie folgt gewinnen: Wir verschieben z um ϵ_f , projizieren die Ladungsanregungen wie in Abschnitt 9.1 heraus und erhalten damit [14]:

$$\begin{aligned}\Sigma_m(z) &= -\frac{\rho J}{N} \int_{-D}^D f(\epsilon) \frac{1}{1 - \Pi(z + \epsilon)} d\epsilon, \\ \Pi(z) &= -\frac{\rho J}{N} \sum_m \int_{-D}^D f(\epsilon) R_m(z + \epsilon) d\epsilon.\end{aligned}\quad (9.5)$$

Dies ist die NCA für das Coqblin-Schrieffer-Modell. Die Größe $\frac{J}{N} \frac{1}{1 - \Pi(z)}$

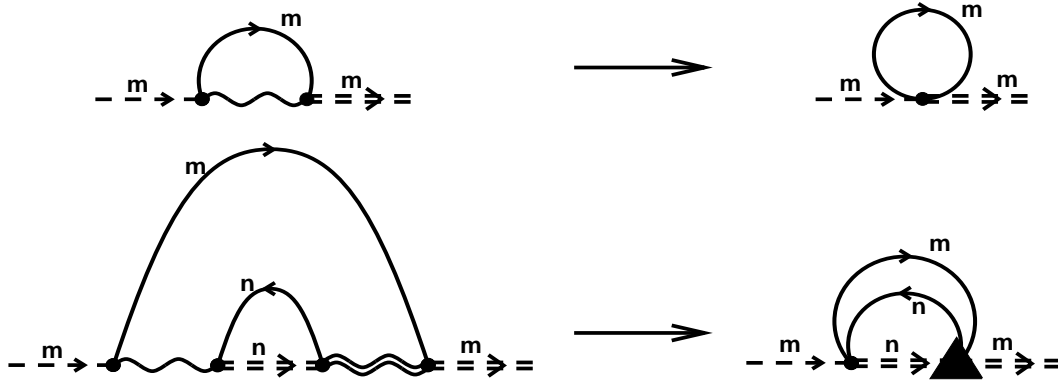


Abbildung 9.1: Übergang von Pseudopropagatoren zu Vertices

ist der volle Pseudopropagator, der den vollen Vertex der Austausch-Wechselwirkung darstellt. Dies ist in Abbildung 9.1 für ein Diagramm erster und zweiter Ordnung in J dargestellt.

9.3 Energieskala

9.3.1 Beitrag der Skelettdiagramme zweiter Ordnung

Der Störstellen-Anteil F^{NCA} der freien Energie des Coqblin-Schrieffer-Modells erfüllt die Skalierungsgleichung:

$$(F - E_0)^{\text{NCA}}(T, D, J) = (F - E_0)^{\text{NCA}}\left(\frac{T}{T_K^{\text{CS}}}\right) . \quad (9.6)$$

Die freie Energie der NCA skaliert also mit der als exakt angenommenen Kondo-Temperatur.

Dieses Skalierungsgesetz folgt wie in Kapitel 6 aus zwei partiellen Differentialgleichungen (K.3) und (K.6), die in Anhang K hergeleitet werden.

Entsprechende Skalierungsgesetze lassen sich analog wie für das Anderson-Modell für andere Observablen aufstellen. Vor allem wird die Kondo-Resonanz von der NCA für das Coqblin-Schrieffer-Modell für große N reproduziert.

9.3.2 Beitrag der Skelettdiagramme höherer Ordnung

Wir zeigen hier, daß die Diagrammtechnik des Anderson-Modells für das Coqblin-Schrieffer-Modell nicht adäquat ist, wenn wir Skelettdiagramme höherer Ordnung mitnehmen wollen. Die im Anhang K aufgestellte Skalierungsgleichungen lauten

$$\begin{aligned} F &= T \frac{\partial}{\partial T} F + D \frac{\partial}{\partial D} F, \\ D \frac{\partial}{\partial D} F &= \frac{(\rho J)^2}{1 + \frac{\rho J}{N}} \frac{\partial}{\partial \rho J} F - \frac{\rho J}{N} D \\ &\quad - D \frac{\partial}{\partial D} (F^{(6)} + \dots) , \end{aligned}$$

wenn man in $F^{(6)} + \dots$ die Beiträge der Skelettdiagramme höherer Ordnung zur D -Abhängigkeit mitnimmt. Im Limes großer N sind sie von der Ordnung $1/N^2$ und können daher vernachlässigt werden. Jedoch sind sie im allgemeinen *nicht* irrelevant. Man sieht dies am einfachsten daran, daß für $N=1$ (reine Potentialstreuung) im Coqblin-Schrieffer-Modell keine Kondo-Temperatur auftaucht, die NCA aber trotzdem eine solche Energieskala vorhersagt.

Man kann an den Skelettdiagramme höherer Ordnung direkt ablesen, daß sie relevant sind: Der Pseudopropagator für die unbesetzte f -Konfiguration $R_0(\omega)$ geht für $\omega \rightarrow -D$ gegen *eins*. Daher geben bei logarithmischer D -Differentiation mindestens alle die Skelettdiagramme einen Beitrag, in denen über maximal einen Propagator R_m integriert wird.

Zum Beispiel ist das Skelettdiagramm sechster Ordnung aus Abbildung G.1 relevant, wenn bei der logarithmischen Differentiation nach D die mittlere Leitungselektron-Linie weggelassen wird. Es werden außer den NCA-Diagrammen auch Diagramme mit sich kreuzenden Leitungselektron-Linien relevant. Wir können mit der modifizierten Diagrammtechnik für das Anderson-Modell *allein* nicht feststellen, ob das Analogon der NCA für das Coqblin-Schrieffer-Modell immer noch die richtigen Energieskalen liefert.

Man kann die NCA jedoch für große N anwenden, da die Korrekturen von der Ordnung $O(1/N^2)$ sind.

9.4 NCA bei $T=0$

Die Herleitungen sind analog denen von Kapitel 7. Wir müssen nur auf die Asymptotik des Propagators und Pseudopropagators achten. Wir definieren das Inverse zum Pseudopropagator

$$Y_0(z) = 1 - \Pi(z)$$

und erhalten für $T=0$ aus (9.5) die Differentialgleichungen im Magnetfeld

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \omega} Y_0 &= -\frac{\rho J}{N} \sum_m Y_m^{-1}(\omega) + \frac{\rho J}{N} \sum_m Y_m^{-1}(\omega - D) \\ \frac{\partial}{\partial \omega} Y_m &= -1 - \frac{\rho J}{N} Y_0^{-1}(\omega) + \frac{\rho J}{N} Y_0^{-1}(\omega - D) \quad . \end{aligned}$$

Wenn $|\omega| \ll D$, kann man die inversen Propagatoren für das Argument $\omega - D$ durch ihre nackten Werte ersetzen:

$$\begin{aligned} Y_m(\omega - D) &\propto D \quad , \\ Y_0(\omega - D) &= 1 \quad . \end{aligned}$$

Also ist bis auf Terme der Ordnung $O(1/D)$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \omega} Y_0 &= -\frac{\rho J}{N} \sum_m Y_m^{-1}(\omega) \\ \frac{\partial}{\partial \omega} Y_m &= -(1 - \rho J/N) - \frac{\rho J}{N} Y_0^{-1}(\omega) \quad . \end{aligned} \tag{9.7}$$

Setzt man

$$Y_m = \bar{Y}_m + m \cdot g\mu_B H ,$$

so haben die NCA-Differentialgleichungen im Bereich $|\omega| \ll D$ bis auf Terme der Ordnung $O(1/D)$ das Integral

$$Y_0 \left(\frac{1}{\rho J} - \frac{1}{N} \right) + \frac{1}{N} \ln Y_0 = \frac{1}{N} \sum_m \ln \left| \frac{\bar{Y}_m + mg\mu_B H}{\tilde{D}} \right| + \left(\frac{1}{\rho J} - \frac{1}{N} \right) ,$$

$$\tilde{D} = D(1 - \rho J D / N) . \quad (9.8)$$

Für $H = 0$ läßt sich Y_m durch Y_0 aus dem Integral geschlossen darstellen als

$$Y_m = \sqrt[N]{e} \left(1 - \frac{\rho J}{N} \right)^{-1/N} \cdot T_K^{\text{CS}} \cdot \left(\frac{Y_0}{\rho J} \left(1 - \frac{\rho J}{N} \right) \right)^{1/N} \exp \left[\frac{Y_0}{\rho J} \left(1 - \frac{\rho J}{N} \right) \right] .$$

Die Grundzustandsenergie berechnet sich zu

$$E_0 = -A + \int_{-A}^{E_0} d\omega .$$

Im Bereich

$$J \ll A \ll D , \quad \lim_{D \rightarrow \infty} A = \infty$$

bleibt $|\omega| \ll D$, und das Integral (9.8) existiert. Wie in Kapitel 7 erhalten wir durch Einsetzen der NCA-Differentialgleichungen (9.7)

$$\chi^{\text{NCA}}(0) = \frac{1}{3} \mu_j^2 \frac{1}{T_K^{\text{CS}}} \cdot \frac{\Gamma(1 - 1/N)}{\sqrt[N]{e}} \cdot \left(1 - \frac{\rho J}{N} \right)^{(1/N-2)} .$$

Im universellen Bereich (siehe (2.5) und (2.6)) kleiner ρJ haben wir

$$\chi^{\text{NCA}}(0) = \frac{1}{3} \mu_j^2 \frac{1}{T_K^{\text{CS}}} \cdot \frac{\Gamma(1 - 1/N)}{\sqrt[N]{e}} . \quad (9.9)$$

Dies stimmt bis $o(1/N)$ mit dem von Rasul und Hewson postulierten exakten Resultat

$$\chi(0) = \frac{1}{3} \mu_j^2 \frac{1}{T_K^{\text{CS}}} \cdot \frac{1}{\Gamma(1 + 1/N)} \cdot \frac{1}{\sqrt[N]{e}}$$

überein [9].

Kapitel 10

Zwei magnetische Konfigurationen: Das $f^1 - f^2$ -Problem

Für die in Kapitel 1 und 2 vorgestellten Substanzen ist eine der energetisch niedrigsten Konfigurationen der Störstelle magnetisch („besetzt“), während die andere Konfiguration nichtmagnetisch („unbesetzt“) ist. Das Anderson-Modell beschreibt also das $f^0 - f^1$ -Problem.

In Substanzen wie $\text{Tm}_x\text{Y}_{1-x}\text{Se}$ befinden sich Thulium-Störstellen in einem Metall. Hier sind *beide* energetisch niedrigsten Konfigurationen der Störstelle magnetisch [43], nämlich (im Lochbild) die f^1 - und die f^2 -Konfiguration.

Während in Materialien wie $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Cu}_6$ bei niedrigen Temperaturen die magnetischen Momente der Störstellen abgeschirmt werden (zumindest, wenn die Störstellenkonzentration x klein ist), reagieren die Thulium-Störstellen empfindlicher auf ein äußeres Magnetfeld [44]. Es stellt sich die Frage, ob man dies mit einem Störstellenmodell verstehen kann, oder ob die Wechselwirkung der Störstellen entscheidend ist.

Wir führen zunächst das Standardmodell für Thulium-Störstellen in einem Metall ein. Wir zeigen dann mit Hilfe unserer Methode, daß die statische magnetische Suszeptibilität bei tiefen Temperaturen und verschwindendem äußeren Magnetfeld *divergiert*, wenn man die relevanten Skelettdiagramme mitnimmt, obwohl das magnetische Moment *verschwindet*. Dies deutet darauf hin, daß sich das System für niedrige Energien nicht wie eine Fermi-Flüssigkeit verhält.

10.1 Modell

Das Anderson-Modell (2.1) beschreibt im Grenzfall großer U über das effektive Modell (2.2) eine Störstelle mit stark korrelierten Elektronen, die an ein Leitungsband ankoppelt und deren eine Konfiguration nichtmagnetisch („unbesetzt“), die andere magnetisch („besetzt“) ist. Dieses Modell kann so verallgemeinert werden, daß es Störstellen mit zwei magnetischen Konfigurationen beschreibt. Wir betrachten Thulium als Beispiel und folgen [9, 43]. Dazu betrachten wir nur die beiden energetisch niedrigsten $f^{12,13}$ -Konfigurationen. Diese haben im Lochbild die Quantenzahlen

$$\begin{aligned} 4f^1 & : \quad L = 3, \quad S = 1/2, \quad j = 7/2, \quad j_z = \nu & (10.1) \\ 4f^2 & : \quad L = 5, \quad S = 1, \quad j = 6, \quad j_z = \mu \quad . \end{aligned}$$

Wir vernachlässigen alle Kristallfeld-Effekte. Sie reduzieren die Entartung der ionischen Konfigurationen. Die Zustandsdichte der Leitungselektronen sei konstant.

Wenn die Umgebung der Störstelle als kugelsymmetrisch angenommen wird und die Streuung spinunabhängig ist, so ist der Bahndrehimpuls und der Spin eine bei der Streuung erhaltene Quantenzahl. Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten gewichten die erlaubten Streukanäle für die Quantenzahl $L=3$ der f -Partialwellen der Leitungselektronenzustände, die an die Störstelle koppeln:

$$L = 3, \quad S = \pm \frac{1}{2}, \quad j = \frac{5}{2} \quad \text{oder} \quad j = \frac{7}{2}, \quad j_z = s \quad .$$

Die beiden berücksichtigten ionischen Konfigurationen lassen sich wie beim Anderson-Modell durch Pseudoteilchen darstellen. Es spielt keine Rolle, welche der beiden Konfigurationen man als „fermionisch“ oder „bosonisch“ annimmt. Die z -Komponente des Gesamtdrehimpulses bildet die effektive interne Quantenzahl, die wieder als Spin aufgefaßt wird [9]:

Konfiguration	Entartung	Pseudoteilchen
f^{13}	$N_f = 2 \cdot 7/2 + 1 = 8$	$f_\nu^+ = \text{Fermion}$
f^{12}	$N_b = 2 \cdot 6 + 1 = 13$	$b_\mu^+ = \text{Boson}$

Der Hamilton-Operator für Tm-Störstellen in einem Metall lautet damit:

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{\substack{|\epsilon_p| < D \\ |s| \leq j}} \epsilon_p c_{pjs}^+ c_{pjs} + \frac{V}{\sqrt{2N_f}} \sum_{\substack{pj\mu\nu \\ s=\nu-\mu}} \langle js \ 6\mu | \frac{7}{2}\nu \rangle (c_{pjs}^+ b_\mu^+ f_\nu + h.k.) \\
 &+ \epsilon_f \sum_\nu f_\nu^+ f_\nu + \epsilon_b \sum_\mu b_\mu^+ b_\mu \\
 j &\in \left\{ \frac{5}{2}, \frac{7}{2} \right\} .
 \end{aligned} \tag{10.2}$$

H ist effektiv ein Anderson-Hamilton-Operator mit mehreren Hilfsbosonen und berücksichtigt analog zu Kapitel 2 von den Leitungselektronen nur die direkt ankoppelnden Partialwellen mit Hilfe effektiver Leitungsbänder.

Über solche Hamilton-Operatoren ist wenig bekannt. Das Modell ist nicht mit dem Bethe-Ansatz diagonalisierbar. Es wurde vermutet [9], daß sich durch die beiden magnetischen ionischen Konfigurationen zusätzliche Energieskalen ergeben, die sich zum Beispiel als zusätzliche Maxima in der spezifischen Wärme bemerkbar machten. Außerdem wird postuliert, daß obiges Modell sich auf ein Vielkanal-Kondoproblem reduzieren läßt [45].

Neben dem Standardmodell (10.2) haben Read *et alii* [46] ein Ersatzmodell aufgestellt, das die Wechselwirkung der beiden Löcher der ionischen f^2 -Konfiguration vernachlässigt. Die f^1 -Konfiguration wird wie im Modell (10.2) durch ein Pseudo-Fermion f_μ^+ mit $\mu = 1, \dots, N_f$ dargestellt. Die beiden unabhängigen Löcher der f^2 -Konfiguration werden durch „Tensorbosonen“ $b_{\mu_1\mu_2}^+$ beschrieben [47], wobei $1 \leq \mu_1 < \mu_2 \leq N_f$ die internen Freiheitsgrade der beiden Löcher unter Vermeidung der Doppelzählung angibt. Dieses Modell kann man mit einer $1/N$ -Entwicklung (vergleiche Anhang A.5) behandeln, wobei

$$N = \frac{N_f - 1}{2}$$

der Quotient der beiden Entartungsgrade $N_f(N_f - 1)/2$ und N_f ist. Jedoch ist das Modell unrealistisch, wie die Autoren selbst zugeben ([46], Seite 1599), und wird *nur* aus dem Grunde eingeführt, weil es eine $1/N$ -Entwicklung zuläßt ([46], Seite 1598).

10.2 Erzeugendes Funktional und Skalierungsgleichungen

Man kann für (10.2) die Diagrammtechnik für das Anderson-Modell übernehmen. Die z -Komponente des Gesamtdrehimpulses ist an jedem Vertex erhalten. Daher ergeben sich für die beiden äußeren Propagatoren, die sich links und rechts an ein Selbstenergie-Diagramm anschließen, die gleichen Quantenzahlen (siehe Abbildung 10.1). Die Summe aus f - und

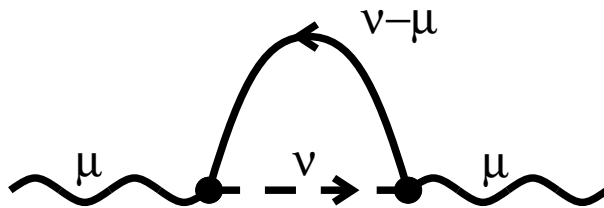


Abbildung 10.1: Diagramm zweiter Ordnung für T_m

b -Besetzung ist stets eins, da das Modell-System nur die f^{12} - und f^{13} -Konfiguration besitzt. Das Gewicht eines Vertex ändert sich gemäß den Clebsch-Gordan-Koeffizienten.

Das erzeugende Funktional für die freie Energie kann man analog zu Abschnitt 4.1 definieren. Die erste Skalierungsgleichung (6.1) bleibt unverändert, da sie nicht von der Struktur der Skelettdiagramme abhängt.

Für die zweite Skalierungsgleichung (6.2) sind nur die NCA-Diagramme relevant; die Gewichtung der einzelnen Propagatoren ändert sich wegen der Auswahlregeln an den Vertices. Aus Abbildung 10.2 und den Orthogona-

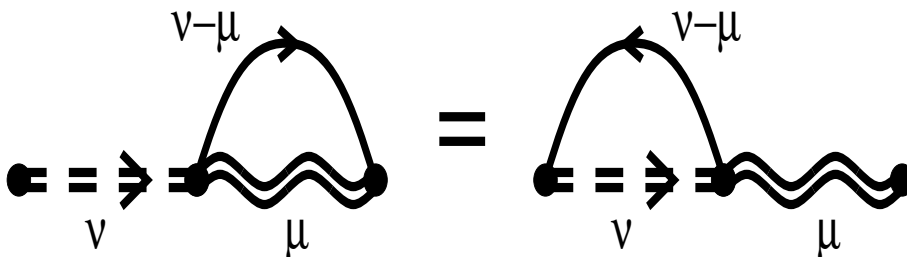


Abbildung 10.2: relevante Skelettdiagramme für T_m -Störstellen in einem Metall

litäts-Relationen für die Clebsch-Gordan-Koeffizienten [48]

$$\begin{aligned} \sum_{\mu} \langle j(\nu - \mu) \ 6\mu \mid \frac{7}{2}\nu \rangle^2 &= 1 \\ \sum_{\nu} \langle j(\nu - \mu) \ 6\mu \mid \frac{7}{2}\nu \rangle^2 &= \frac{N_f}{N_b} = \frac{8}{13} \end{aligned} \quad (10.3)$$

folgt

$$ZD \frac{\partial}{\partial D} F = -\frac{\rho V^2}{N_f} \sum_{\nu} \oint \frac{e^{-\beta z} dz}{2\pi i} R_{\nu}(z) - \frac{\rho V^2}{N_b} \sum_{\mu} \oint \frac{e^{-\beta z} dz}{2\pi i} R_{\mu}(z) \quad .$$

Wenn die ionischen Konfigurationen nicht durch ein Magnetfeld aufgespalten sind, sind alle R_{ν} und R_{μ} je gleich. Damit gilt das Skalierungsgesetz

$$D \frac{\partial}{\partial D} F = \rho V^2 \left(\frac{1}{N_b} - \frac{1}{N_f} \right) \frac{\partial}{\partial \epsilon_f} F - \frac{\rho V^2}{N_b} \quad . \quad (10.4)$$

Genau wie dies in den Kapiteln 6 und 7 gezeigt wurde, erhalten wir für $\epsilon_f < \epsilon_b$ die Energieskalen

$$\rho V^2 \quad \text{und} \quad T_K = D \left(\frac{\rho V^2}{D} \right)^{1 - \frac{1}{N_b} + \frac{1}{N_f}} \exp \left[\frac{\epsilon_f - \epsilon_b}{\rho V^2} \right] = \rho V^2 \exp \left[-\frac{|\epsilon_f^*|}{\rho V^2} \right]$$

mit

$$\epsilon_f^* = \epsilon_f - \epsilon_b + \rho V^2 \left(\frac{1}{N_b} - \frac{1}{N_f} \right) \ln \frac{D}{\rho V^2} \quad .$$

Für $\epsilon_f > \epsilon_b$ lauten die Energieskalen entsprechend

$$\rho V^2 \quad \text{und} \quad T_K = D \left(\frac{\rho V^2}{D} \right)^{1 - \frac{1}{N_f} + \frac{1}{N_b}} \exp \left[\frac{\epsilon_b - \epsilon_f}{\rho V^2} \right] = \rho V^2 \exp \left[-\frac{|\epsilon_f^*|}{\rho V^2} \right] \quad .$$

Dies widerspricht Behauptungen [9], es gäbe mehr Energieskalen in diesem Modell als im Anderson-Modell wegen der zwei magnetischen ionischen Konfigurationen.

Wertet man die relevanten, also die NCA-Diagramme nach Abbildung (10.2) aus, ergeben sich analog zu Gleichung (7.1) die folgenden Integralgleichungen im Magnetfeld:

$$\begin{aligned}\Sigma_\mu(z) &= \frac{\rho V^2}{2N_f} \sum_{j\nu} \langle j(\nu - \mu) \ 6\mu | \frac{7}{2}\nu \rangle^2 \int_{-D}^D d\epsilon R_\nu(z + \epsilon) f(\epsilon - g_f \cdot H) \\ \Sigma_\nu(z) &= \frac{\rho V^2}{2N_f} \sum_{j\mu} \langle j(\nu - \mu) \ 6\mu | \frac{7}{2}\nu \rangle^2 \int_{-D}^D d\epsilon R_\mu(z + \epsilon) f(\epsilon - g_b \cdot H)\end{aligned}$$

mit den g-Faktoren $g_{f,b}$ für die Ankopplung der Elektronen an das Magnetfeld H . Falls $H = 0$, folgen wegen der Orthogonalitäts-Relationen (10.3) die NCA-Gleichungen

$$\begin{aligned}\Sigma_\mu(z) &= \frac{\rho V^2}{N_b} \int_{-D}^D d\epsilon R_\nu(z + \epsilon) f(\epsilon) \\ \Sigma_\nu(z) &= \frac{\rho V^2}{N_f} \int_{-D}^D d\epsilon R_\mu(z + \epsilon) f(\epsilon) \quad .\end{aligned}\tag{10.5}$$

Diese NCA-Gleichungen gehen in die des Anderson-Modells, (7.1), über, wenn man ersetzt:

$$V \rightarrow \frac{V}{\sqrt{N_b}}, \quad \frac{N_f}{N_b} \rightarrow N \quad .$$

Wir haben demnach ein NCA-Gleichungssystem mit $1 < N < 2$. Alle Ergebnisse von Kapitel 7, auch die Darstellung der Grundzustandsenergie, sind übertragbar.

10.3 Statische magnetische Suszeptibilität der NCA für $T=0$

Wir diskutieren hier kurz die wichtigsten anderen Verfahren, die angewendet wurden, um den Grundzustand des Modells (10.2) zu charakterisieren:

1. Da die Entartungen $N_{b,f}$ zumindest dann groß sind, wenn keine Kristallfelder berücksichtigt werden, stellt sich die Frage, ob man für (10.2) eine $1/N$ -Entwicklung herleiten kann. Yafet, Varma und Jones [49] versuchten so, variationell einen Grundzustand zu konstruieren.

Aber dies geht aus folgendem Grunde nicht: Eine $1/N_f$ -Entwicklung vernachlässigt Übergänge zwischen Zuständen der b -Konfiguration, denn diese sind von höherer Ordnung in $1/N_f$, oder vice versa. Eine doppelte $1/N_f, 1/N_b$ -Entwicklung enthält in jeder Ordnung nur endlich viele Diagramme und ist nichts anderes als eine unsystematische Störungstheorie endlicher Ordnung.

Die NCA-Diagramme stellen auch unter diesem Gesichtspunkt gewissermaßen die kleinste Menge von Diagrammen dar, die man mitnehmen muß. Dabei werden Diagramme von beliebig hoher Ordnung in $1/N_f, 1/N_b$ summiert.

2. Saso [32] erweiterte für das Modell (10.2) die NCA um Diagramme mit sich kreuzenden Leitungselektron-Linien. Jedoch folgt der so berechnete Störstellen-Anteil der Zustandssumme nicht aus einem erzeugenden Funktional. Vielmehr werden bei Saso die ionischen Propagatoren über die NCA bestimmt und diese Propagatoren dann in die erweiterte Klasse der Diagramme ad hoc eingesetzt. Dieses Verfahren erhält *nicht* die Energieskalen des Systems. Saso erhält für Tm-Störstellen in einem Metall einen Singulett-Grundzustand sowie eine *endliche* statische magnetische Suszeptibilität bei $T=0, H \rightarrow 0$. Dieses Ergebnis ist daher ein Artefakt der Näherung.
3. Lustfeld [50] benutzt die zur Bestimmung des Niederenergie-Verhaltens inadäquaten Entkopplungs-Techniken für Greensche Funktionen [10] sowie die diagrammatische Renormierungsgruppe (Anhang A.3) und erhält eine *endliche* statische $T=0, H \rightarrow 0$ -Suszeptibilität.
4. Kuramoto [43] wertete die NCA für endliche Temperaturen aus. Er vermutete, konnte aber nicht zeigen, daß die statische magnetische Suszeptibilität für $T=0, H \rightarrow 0$ *divergiert*, wenn man Vertexkorrekturen zur NCA hinzunimmt. Jedoch sollte nach Kuramoto die statische magnetische Suszeptibilität für $T=0, H \rightarrow 0$ in der NCA *konvergieren*.

Wir zeigen dagegen: Die statische magnetische Suszeptibilität *divergiert* in der NCA für $T=0, H \rightarrow 0$. Statt einen Ausdruck für die Grundzustandsenergie abzuleiten, gehen wir wie bei der Herleitung der Kubo-Formel vor ([14], Seite 924). Die Magnetisierung $M(H) = -\frac{\partial}{\partial H}F$ folgt aus dem erzeugenden Funktional:

$$ZM(H) = g_f \sum_{\nu} \nu \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} R_{\nu}(z) + g_b \sum_{\mu} \mu \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} R_{\mu}(z)$$

und damit für kleine Magnetfelder die Suszeptibilität $\chi(H) = -\frac{\partial}{\partial H}M(H)$

$$Z\chi(H) = g_f \sum_{\nu} \nu \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} \frac{\partial}{\partial H} R_{\nu}(z) + g_b \sum_{\mu} \mu \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} \frac{\partial}{\partial H} R_{\mu}(z) \quad .$$

Betrachten wir zuerst R_{ν} . Man muß in jedem Diagramm für R_{ν} je einen nackten Propagator

$$\frac{1}{z - \epsilon_f - g_f \nu H}$$

durch

$$\frac{g_f \nu}{(z - \epsilon_f - g_f \nu H)^2}$$

ersetzen, also den Propagator im Diagramm verdoppeln. Alle Diagramme, in denen ein Leitungselektron-Operator links vom verdoppelten Propagator mit einem rechts davon gepaart werden, haben eine doppelte Spinsumme $\sum_{\nu_1 \nu_2} \nu_1 \nu_2$, die für $H \rightarrow 0$ verschwindet, weil sich Leitungselektron-Linien nicht kreuzen ([9], Seite 211). Analoges gilt für R_{μ} . Folglich ist

$$Z\chi(H=0) = g_f^2 \sum_{\nu} \nu^2 \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} R_{\nu}(z)^2 + g_b^2 \sum_{\mu} \mu^2 \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} R_{\mu}(z)^2 \quad .$$

Die Spektralzerlegung gibt für $T=0$

$$\begin{aligned} \chi(H \rightarrow 0, T=0) &= 2g_f^2 \sum_{\nu} \nu^2 \int_{\omega < E_0} d\omega \hat{\rho}_{\nu}(\omega) Y_{\nu}^{-1}(\omega) \\ &+ 2g_b^2 \sum_{\mu} \mu^2 \int_{\omega < E_0} d\omega \hat{\rho}_{\mu}(\omega) Y_{\mu}^{-1}(\omega) \quad . \end{aligned} \quad (10.6)$$

Die Bezeichnungen sind wie in Kapitel 7 und Anhang B. Es ist wohlbekannt [14] und folgt direkt aus den NCA-Differentialgleichungen für $T=0$,

daß wegen der Orthogonalitäts-Katastrophe die Spektraldichten nahe der Grundzustandsenergie je wie

$$\hat{\rho}_{\mu,\nu}(\omega) \propto Y_{\mu,\nu}^{-1}(\omega) \propto (E_0 - \omega)\delta_{\mu,\nu}$$

divergieren. Folglich divergieren die Integranden in (10.6) je wie

$$(E_0 - \omega)^{-2}\delta_{\mu,\nu} \quad .$$

Aus den NCA-Differentialgleichungen folgt auch

$$\delta_\mu + \delta_\nu = 1 \quad .$$

Also muß eines der beiden Integrale und mithin die statische magnetische Suszeptibilität bei $T = 0, H \rightarrow 0$ divergieren. Dies, sowie das verschwindende magnetische Moment bei $T = 0, H \rightarrow 0$ wirft die Frage auf, ob sich das System noch wie eine Fermiflüssigkeit verhält. Dazu diskutieren wir im nächsten Abschnitt das Standard-Störstellenmodell, das Nicht-Fermiflüssigkeits-Verhalten liefert, und vergleichen es mit dem Modell für Tm-Störstellen in einem Metall.

10.4 Charakter der niederenergetischen Anregungen

Wir diskutieren in diesem Abschnitt, was man über den Grundzustand und die elementaren Anregungen des Systems aussagen kann. Dazu vergleichen wir das Modell (10.2) für eine Tm-Störstelle in einem Metall mit einem Vielkanal-Anderson-Modell, dessen Hamilton-Operator [51] die folgende Form hat:

$$H = \sum_{|\epsilon_p| \leq D, \mu\nu} \epsilon_p c_{p\nu,\mu}^+ c_{p\nu,\mu} + \frac{1}{\sqrt{N_f}} \sum_{p\nu,\mu} V_\mu (c_{p\nu,\mu}^+ b_\mu^+ f_\nu + h.k.) \quad (10.7)$$

$$+ \epsilon_f \cdot \sum_\nu f_\nu^+ f_\nu + \epsilon_b \sum_\mu b_\mu^+ b_\mu \quad .$$

μ zählt die N_b Kanäle, in denen gestreut wird. Wenn in diesem Modell eine der beiden ionischen Konfigurationen energetisch viel tiefer als

die andere liegt, kann man wie in Kapitel 9 vorgehen. Man erhält mittels einer Schrieffer-Wolff-Transformation ein Vielkanal-Coqblin-Schrieffer-Modell. Für $N_f = 2$ und $N_b \geq 2$ unterscheidet sich dieses Modell von dem N_b -Kanal-Kondo-Modell nur durch einen Potentialstreuterm, und man kann mit Hilfe des Bethe-Ansatzes für dieses Modell die statische magnetische Suszeptibilität und andere thermodynamische Größen berechnen [52, 53]. Die statische magnetische Suszeptibilität bei $T = 0, H \rightarrow 0$ dieses Systems divergiert, während der Grundzustand ein Singulett ist. Dieses Verhalten des Systems ist ein Beispiel für „Nicht-Fermi-Flüssigkeits-Verhalten“.

Mit Hilfe des *poor man's scaling* läßt sich dies heuristisch verstehen [9, 54]: Wie in Anhang A.1 diskutiert, verhält sich das Coqblin-Schrieffer-Modell für niedrige Energien so, *als ob* die Störstelle sehr stark antiferromagnetisch an ein Leitungselektron zu einem Singulett koppelt. Dieses entkoppelt dann vom Rest des Systems und bildet eine *nichtmagnetische* Störstelle. Das Coqblin-Schrieffer-Modell zeigt also für niedrige Energien Fermi-Flüssigkeits-Verhalten.

Das Argument kann man für das Vielkanal-Coqblin-Schrieffer-Modell für jeden der N_b Streukanäle wiederholen. Man erhält für niedrige Energien N_b Leitungselektronen, die jeweils sehr stark antiferromagnetisch an die Störstelle koppeln, also insgesamt eine *effektive magnetische* Störstelle mit interner Quantenzahl $(N_b - 1)j$. Die restlichen Leitungselektronen wechselwirken wieder *antiferromagnetisch* mit dieser effektiven Störstelle. Denn zusätzliche Leitungselektronen können nur dann an die Störstelle (lokal!) koppeln, wenn sie sich mit ihrem Spin antiparallel zu den schon bei der Störstelle vorhandenen N_b Leitungselektronen einstellen, insgesamt also antiparallel zum effektiven Spin der Störstelle [54]. Die Spinpolarisationswolke der Störstelle wird, anschaulich gesprochen, kaskadenförmig immer größer, weil auf einer immer kleineren Energieskala eine effektive Wechselwirkung stattfindet. Dieser Effekt wird „overscreening“ genannt, weil „zuviel“ Leitungselektronen den Spin der Störstelle abschirmen. Dies zerstört das Fermi-Flüssigkeits-Verhalten.

Man darf allerdings den Vergleich mit einem Vielkanal-Coqblin-Schrieffer-Modell nicht zu weit treiben: Denn in Materialien wie $\text{Tm}_x\text{Y}_{1-x}\text{Se}$ ist nach [44] Tm eher gemischtvalent (Valenz 2,8).

Jedoch werden die Resultate für das Vielkanal-Coqblin-Schrieffer-Modell von der entsprechenden Diagrammtechnik für das Vielkanal-Anderson-Modell (das Valenzfluktuationen zuläßt) bestätigt [55]. Außerdem wurde gezeigt [51], daß die NCA für $N_f, N_b \geq 2$ das Niederenergieverhalten des Modells richtig wiedergibt. Die Diagrammtechnik für das Modell (10.7) kann man wie für das Modell (10.2) entwickeln; die Leitungselektron-Linie in Abbildung 10.1 trägt statt der Quantenzahl $s = \nu - \mu$ nun die doppelte Quantenzahl $\nu\mu$.

Wir vergleichen nun das Modell (10.7) mit dem Hamilton-Operator (10.2) für eine Tm-Störstelle in einem Metall:

1. Die statische magnetische Suszeptibilität divergiert in der NCA bei beiden Modellen für $T = 0, H \rightarrow 0$, und das magnetische Moment verschwindet im Grundzustand.
2. Die Rolle der Streukanäle in Vielkanal-Anderson-Modell wird im Tm-Modell vom Drehimpulsübertrag μ übernommen.
3. Vor allem stimmen die relevanten Skelettdiagramme und die NCA-Gleichungen mit denen für eine Tm-Störstelle überein.

Jedoch gibt es einen grundlegenden Unterschied zwischen dem Vielkanal-Anderson-Modell und dem Modell (10.2) für eine Tm-Störstelle [54, 56]: Sobald sich die Wechselwirkungsstärken V_μ in den Kanälen nur um einen beliebig kleinen Betrag unterscheiden, stellt sich wieder das Fermi-Flüssigkeits-Verhalten ein, da der Kanal mit der größten Wechselwirkung für niedrige Energien dominiert.

Dies ist beim Tm-Modell nicht der Fall. Denn in die NCA-Gleichungen (10.5) ging die relative Stärke der Streukanäle nur über die Orthogonalitäts-Relationen (10.3) ein. Auch wenn die ionischen Multipletts durch Kristallfelder energetisch aufspalten und verschieden an das Leitungsband

koppeln, werden solche Orthogonalitäts-Relationen gelten. In den NCA-Gleichungen werden sich also nur die Entartungen $N_{b,f}$ der ionischen Konfigurationen verringern und damit die statische magnetische Suszeptibilität bei $T=0, H \rightarrow 0$ in der NCA divergieren.

Da die NCA die richtigen Energieskalen und die relevanten Skelettdiagramme liefert, liegt der Schluß nahe, daß der Störstellen-Anteil der statischen magnetische Suszeptibilität für $T = 0$ divergiert. Wir haben damit mit Hilfe der relevanten Skelettdiagramme gezeigt, daß eine Tm-Störstelle in einem Metall höchstwahrscheinlich Nicht-Fermi-Flüssigkeits-Verhalten zeigt.

Kapitel 11

Zusammenfassung

In dieser Dissertation wird mittels Diagrammtechnik das universelle Verhalten von Störstellen mit stark korrelierten Elektronen in einem Metall bewiesen und beschrieben.

Universelles Verhalten bedeutet, daß der Störstellen-Anteil X *jeder* Observablen nur über *eine* Energieskala $k_B T_K$ von den elektronischen Eigenschaften des Systems abhängt. Hat X die Dimension einer Energie, so gilt dann:

$$X(T, \text{Bandbreite, Zustandsdichte, } \dots) = T \cdot g\left(\frac{T}{T_K}\right) \quad . \quad (11.1)$$

Dabei hängt die Form der Funktion g für tiefe Temperaturen T nicht vom Material ab. Das bedeutet, daß bei geeigneter Skalierung die experimentellen Daten für viele Systeme auf eine Kurve fallen [2].

In solchen Systemen wechselwirken die lokalen, stark korrelierten Elektronen der Störstelle mit den niederenergetischen Teilchen-Loch-Anregungen des Metalls und bilden einen komplizierten Vielteilchen-Grundzustand. Alle Versuche, diesen Grundzustand, die elementaren Anregungen und die Energieskalen des universellen Verhaltens mit den sonst üblichen störungstheoretischen Methoden zu berechnen, sind gescheitert. In einigen Spezialfällen gelingt mit Hilfe des Bethe-Ansatzes oder der numerischen Renormierungsgruppe eine Bestimmung der Thermodynamik eines Modellsystems, das aber nicht direkt mit dem ursprünglichen System in Verbindung gebracht werden kann.

Daher stellt sich die Frage, wie man das universelle Verhalten von solchen Systemen systematisch beschreiben kann. Die zentralen Aussagen dieser Dissertation lauten:

1. Die Energieskalen eines Systems mit Störstellen lassen sich mit Hilfe einer Diagrammtechnik *exakt* berechnen.
2. Der Störstellen-Anteil *jeder* Observablen skaliert im universellen Limes mit der *gleichen* Energie.
3. *Allein* die Diagrammstruktur liefert ein Kriterium dafür, wann eine Näherung das universelle Verhalten bewahrt.

Die hier benutzte Diagrammtechnik [13, 14] für Störstellen in Metallen wird neu und vereinfacht hergeleitet. Die Zusammenfassung der Diagramme in Klassen von Skelettdiagrammen führt auf ein *Variationsprinzip* für ein erzeugendes Funktional. Das Funktional ist so gewählt, daß sich der Störstellen-Anteil der jeweiligen Observablen als Sattelpunkt des Funktionals bezüglich der Variation nach den ionischen Propagatoren der Störstelle ergibt. Man erhält verschiedene, in sich konsistente Näherungen, wenn man nur einen Teil der Skelettdiagramme berücksichtigt [16]. Für die eigentliche Berechnung der Störstellen-Anteile von Observablen hat man das selbstkonsistente Integralgleichungssystem zu lösen, das sich aus dem Variationsprinzip ergibt. Diese Methode stammt von Luttinger und Ward[15] und benutzt, *daß* sich Observablen durch Skelettdiagramme ausdrücken lassen.

Hier wird dagegen die Information benutzt, *wie* die Skelettdiagramme strukturiert sind. Der entscheidende Punkt ist, daß man die Parameter-Abhängigkeit der *Propagatoren* im erzeugenden Funktional am Sattelpunkt ignorieren kann: Sie wird nur durch die *Struktur* der Skelettdiagramme bestimmt. Die Skelettdiagramme konnten so *allein* aufgrund ihrer Struktur nach der inversen Bandbreite $1/D$ klassifiziert werden. Nur eine als relevant bezeichnete Mindestmenge der Skelettdiagramme trägt im universellen Limes großer D zum erzeugenden Funktional bei. Allein die relevanten Skelettdiagramme bestimmen damit die *exakten* Energieskalen des

Systems, ohne das Modell vorher gelöst zu haben. Dies ergibt die erste Aussage.

Eine Observable ergibt sich stets als Antwort des Systems auf ein entsprechendes äußeres Feld. Es wurde gezeigt, daß es *nicht* von der Observablen abhängt, welche Skelettdiagramme relevant sind. So kann man zeigen, daß der Störstellen-Anteil *jeder* Observablen mit der gleichen Energieskala skaliert. Dies ergibt die zweite Aussage.

Die relevanten Skelettdiagramme beschreiben damit das universelle Verhalten der Störstelle und garantieren eine systematische Näherung für die Thermodynamik und die Dynamik der Störstelle. Berücksichtigt man noch weitere Skelettdiagramme, so verhalten sich die damit berechneten Störstellen-Anteile von Observablen genau dann universell, wenn ganze *Familien* von Skelettdiagrammen mitgenommen werden. Diese Skelettdiagramme ändern in Gleichung (11.1) *nichts* an der Energieskala T_K , ändern aber die Form der Funktion g . Dies ergibt die dritte Aussage.

Für das Anderson-Modell ergeben die relevanten Skelettdiagramme gerade die *non-crossing-approximation* (NCA). Daher existiert die für die NCA vermutete unphysikalische Energieskala [14] *nicht*. Die NCA beschreibt das universelle Verhalten des Anderson-Modells qualitativ richtig und enthält alle Diagramme bis zur Ordnung V^4 und $1/N$ einschließlich. Skelettdiagramme höherer Ordnung ändern das Bild nicht qualitativ [34, 37].

Bisher war man der Ansicht, die NCA sei eine unsystematische $1/N$ -Entwicklung [14]. Daher war es unerklärlich, warum die NCA sogar für $N = 2$ mit den Resultaten der numerischen Renormierungsgruppe so gut übereinstimmt [30]. Die Erklärung findet sich im exakten Skalierungsverhalten der NCA, das hier gezeigt wurde.

Um das Verfahren zu testen, haben wir für das Anderson-Modell im magnetischen Limes das *crossover* untersucht. Für hohe Temperaturen oder Magnetfelder verhält sich das magnetische Moment der Störstelle asymptotisch frei, während es für tiefe Temperaturen durch niederenergetische Teilchen-Loch-Anregungen des Fermi-Sees abgeschirmt wird. Dieses *cross-*

over vom perturbativen Hochtemperatur- zum nichtperturbativen Nieder-temperaturbereich wird durch die Wilson-Zahl charakterisiert [8]. Hier wird die Wilson-Zahl zum ersten Mal mit einer Diagrammtechnik (NCA) berechnet. Das Ergebnis stimmt im Rahmen der Näherung mit dem als exakt postulierten Resultat [9] überein.

Um das universelle Verhalten anderer Observablen zu demonstrieren, wurde sodann für das Anderson-Modell zum ersten Mal explizit gezeigt, daß das Einteilchen-Anregungsspektrum – und damit die Abrikosov-Suhl-Resonanz – richtig skaliert, wenn man es mit Hilfe der NCA berechnet. Wir haben das Analogon der NCA für das Coqblin-Schrieffer-Modell aufgestellt und konnten so direkt zeigen, daß die NCA die Spinfreiheitsgrade des Anderson-Modells qualitativ richtig beschreibt.

Die vorgestellte Methode ermöglicht es, für ein System mit Störstellen die Qualität von Näherungen zu beurteilen: Zum Beispiel zeigt sich, daß die Post-NCA keine entscheidende Verbesserung gegenüber der NCA darstellt. Die Methode von Saso gibt die Energieskalen nicht korrekt wieder.

Außerdem kann man auf einfache Weise mit Hilfe der relevanten Skelettdiagramme zumindest qualitative Aussagen über solche Modelle zu treffen, bei denen die bekannten anderen Methoden versagen. Ein solches Beispiel ist das $f^1 - f^2$ -Problem. Hier sind die *beiden* energetisch niedrigsten Konfigurationen der Störstelle magnetisch. Es wurde vermutet, daß deswegen das magnetische Moment solcher Störstellen bei tiefen Temperaturen nicht vollständig abgeschirmt wird, oder daß sich weitere, kleine Energieskalen ergeben. Die üblichen Verfahren wie der Bethe-Ansatz oder die Entwicklung nach der reziproken Anzahl der Spinfreiheitsgrade versagen hier.

In dieser Arbeit wurden die relevanten Skelettdiagramme für das $f^1 - f^2$ -Problem bestimmt. Man erhält genau *eine* Energieskala für die magnetischen Anregungen. Außerdem wird das magnetische Moment der Störstelle für verschwindende Temperatur und Magnetfelder vollständig abgeschirmt. Aber im Gegensatz zum Anderson-Modell (wo die Störstelle eine *nicht*- und eine magnetische Konfiguration hat) *divergiert* hier die statische magnetische Suszeptibilität. Das System zeigt Nicht-Fermi-Flüssigkeits-Verhalten.

Kapitel 12

Ausblick

In diesem letzten Kapitel diskutieren wir einige andere Probleme, bei denen die vorgestellte Methode hilfreich sein könnte. Das Anderson-Modell ist das einfachste nichttriviale Modell, das starke Korrelationen von Elektronen beschreibt, weil genau *eine* Störstelle mit stark korrelierten Elektronen mit niederenergetischen Freiheitsgraden wechselwirkt. Mit anderen Worten: Es beschreibt eine Situation, in der die Konzentration von Störstellen mit stark korrelierten Elektronen klein ist. In realen Schwerfermion-Systemen gibt es jedoch größenordnungsmäßig eine „Störstelle“ mit stark korrelierten Elektronen *pro Einheitszelle*.

Diese Materialien werden durch das realistischere periodische Anderson-Modell beschrieben. Im Grenzfall unendlicher Koordinationszahl („unendlich viele Dimensionen“) kann man dieses Modell auf ein effektives Störstellenmodell abbilden [57, 58, 59, 60, 61]. Um mit Hilfe dieser Abbildung Observablen berechnen zu können, benötigt man die Einteilchen-Spektralfunktion der Störstelle, weil sie die Zustandsdichte im Pseudo-Leitungsband dieses effektiven Störstellenmodells bestimmt. Daher muß die Zustandsdichte nahe der Fermi-Energie variieren; dies spiegelt die Abweichung des Tieftemperatur-Verhaltens des periodischen Anderson-Modells vom ursprünglichen Störstellenmodell. Hier werden Methoden wie der Bethe-Ansatz oder die Renormierungsgruppe versagen, weil sie auf der Annahme einer konstanten Zustandsdichte nahe der Fermi-Energie beruhen. Es stellt sich die Frage: Was ist die Minimalanzahl von Skelettdia-

grammen, die man in diesem Fall mitzunehmen hat, um das ursprüngliche Modell richtig zu beschreiben? Mit unserer Methode sollte eine Antwort möglich sein.

Mit Hilfe unserer Methode sollten sich daher entsprechende Aussagen über das Hubbard-Modell in unendlich vielen Dimensionen ergeben: Denn auch dieses Modell läßt sich [61] im Limes unendlicher Koordinationszahl auf ein effektives Störstellen-Modell abbilden.

Eine andere Möglichkeit zur Simulation von Schwerfermion-Systemen ist, sukzessive mehr Störstellen mit stark korrelierten Elektronen an ein Leitungsband zu koppeln. Durch die indirekte Wechselwirkung der Störstellen untereinander ergeben sich neue Energieskalen. Man erwartet, daß der Energie-Gewinn durch magnetische Ordnung über die Austausch-Wechselwirkung *zwischen* den Störstellen mit dem Energie-Gewinn durch die Abschirmung der *einzelnen* Störstellen-Spins wetteifert. Die Energieskalen des Systems sollten dies widerspiegeln. Mit unserer Methode sollte man systematische Näherungen angeben können, die solche Systeme beschreiben.

Anhang A

Diskussion der Lösungsmethoden für Störstellensysteme

A.1 *Poor man's scaling*

Wir erläutern *poor man's scaling* anhand des Coqblin-Schrieffer-Modells (2.4): In diesem Skalierungsverfahren von Anderson [20] eliminiert man mit Hilfe der Störungstheorie Streuprozesse zwischen Zuständen mit der Energie E ,

$$D - \delta D \leq |E| \leq D ,$$

und dem Rest des Bandes. Man erhält so effektive Streuprozesse in einem Band der Breite $2(D - \delta D)$. Die Wechselwirkung wird dabei eine Funktion der Bandbreite. In der einfachsten Version eliminiert man die Zustände an der Bandkante mittels Störungstheorie zweiter Ordnung [9]. Wenn J und D die ursprünglichen Parameter des Systems sind, wird die Stärke der Wechselwirkung J' eine Funktion der reduzierten Bandbreite $2D'$:

$$D' \exp\left(-\frac{1}{\rho J'(D')}\right) = D \exp\left(-\frac{1}{\rho J}\right) .$$

J' wächst für fallendes D' , wenn die Austausch-Wechselwirkung antiferromagnetisch, also $J > 0$ ist. Für

$$D' = D \exp\left(-\frac{1}{\rho J}\right) = T_K \tag{A.1}$$

divergiert dann J' ; die Störstelle koppelt unendlich stark an das Band und bildet folglich mit einem Leitungselektron ein Singulett, das mit dem restlichen Band als nichtmagnetische Störstelle wechselwirkt. Nach diesem Verfahren wäre die Energieskala des Systems durch die reduzierte Bandbreite $k_B T_K$ gegeben. T_K heißt die Kondo-Temperatur. Nozières [62] hat so ein heuristisches Modell für magnetische Störstellen in einem Metall aufgestellt.

Jedoch bricht dieses Verfahren schon ab, wenn D' so klein wie die Kopplung J' der Störstelle an das Band wird, also bevor D' zur Skala des Systems wird. Denn für $J' > D'$ macht der störungstheoretische Zugang keinen Sinn mehr.

Der Bereich der niederenergetischen Anregungen bleibt verschlossen.

Außerdem darf man die Streuung zwischen Zuständen nahe $D - \delta D$ nicht vernachlässigen. Diese werden nur mit Störungstheorie eliminiert. Eine störungstheoretische Elimination von Freiheitsgraden ist nur dann unproblematisch, wenn diese durch eine Energielücke vom Rest des Systems getrennt sind [19]. Das ist hier für die Zustände der Energie $D - \delta D < |E| < D$ nicht der Fall.

Wird dagegen die Zustandsdichte diskretisiert wie in der numerischen Renormierungsgruppe, so läßt sich das Verfahren des *poor man's scaling* anwenden.

A.2 Numerische Renormierungsgruppe

Die im folgenden diskutierte Methode der numerischen Renormierungsgruppe wurde von Wilson ursprünglich auf das Kondo-Modell angewendet [8]. Wir diskutieren hier aber weiter das Coqblin-Schrieffer-Modell (für $N=2$), da der Unterschied zwischen den beiden Modellen für die Diskussion der Methode unwesentlich ist: Für $N=2$ unterscheidet sich das Coqblin-Schrieffer-Modell vom Kondo-Modell nur durch einen Potentialstreuungsterm ([9], Seite 16).

Wie in Kapitel A.1 erläutert, ist eine störungstheoretische Elimination

von Freiheitsgraden zur Ermittlung des Niederenergie-Verhaltens problematisch und kann nicht bis in den Bereich durchgeführt werden, in dem die effektive Bandbreite D' kleiner als die Kopplungskonstante J' wird. Dieses Problem läßt sich umgehen, indem eine diskretisierte Version des Coqblin-Schrieffer-Modells benutzt wird [8, 9]:

$$\begin{aligned} H_N &= H_{0N} + H_{1N} & (A.2) \\ H_{0N} &= D \sum_{\nu=\pm 1} \sum_{n=0}^{N-1} \Lambda^{-n/2} (c_{n,\nu}^+ c_{n+1,\nu} + h.k.) , \\ H_{1N} &= \frac{J}{2} \sum_{\mu\nu} c_{0,\mu}^+ c_{0,\nu} f_\nu^+ f_\mu . \end{aligned}$$

Das Modell beschreibt nun eine endliche Kette mit Gitterpunkten $0, 1, 2, \dots, N$, deren nullter Gitterpunkt an die Störstelle koppelt. Die zwei Spinfreiheitsgrade sind $\nu, \mu = \pm 1$. Für $\Lambda = 1$ beschreibt H_{0N} ein Leitungsband der Bandbreite $2D$ im Limes $N \rightarrow \infty$. Da sich für $\Lambda = 1$ der typische Abstand zweier Eigenwerte von H_{0N} proportional zu $1/N$ verkleinert, brauchte man eine Kette der Länge

$$N \gtrsim \frac{D}{T_K},$$

um diese Energieskala des Systems mit Störstelle aufzulösen. Dies ist numerisch nicht durchführbar: Wie aus Kapitel 1 und Gleichung (A.1) ersichtlich, benötigt man kleine Werte für J ,

$$\frac{J}{D} \approx 1/100, \quad \frac{T_K}{D} \approx D e^{-1/(\rho J)}, \quad (A.3)$$

um universelles Verhalten studieren zu können ([8], Seite 824). Dann aber wächst die notwendige Kettenlänge N zu sehr an.

Man wählt daher $\Lambda > 1$. Dann nimmt das Hüpfmatrixelement zwischen dem n -ten und $n+1$ -ten Gitterplatz exponentiell ab. Die Einteilchen-Energien von H_{0N} haben für nicht zu kleines N die Form

$$E_i \propto \pm \Lambda^{-i}, \quad i = 1 \dots N,$$

und zwar um so besser, je länger die Kette ist. Verlängert man die Kette um zwei Glieder, ändern sich die $2N$ vorherigen Einteilchen-Energien praktisch

nicht, es kommen nur die Werte $\propto \pm\Lambda^{-(N+1)}$ hinzu. Der kleinste Abstand zweier Eigenwerte einer Kette der Länge N ist dann $\propto \Lambda^{-N}$. Man braucht nur noch Ketten der Länge [8]

$$N \gtrsim \frac{\ln \frac{D}{T_K}}{\ln \Lambda} .$$

Für einen typischen Λ -Wert von $\Lambda = 2$ ergibt sich eine Kette der Mindestlänge

$$N \gtrsim \frac{1/J}{\ln 2} \approx 150 .$$

Eine Kette der Länge N entspricht einem Leitungsband mit diskretisierter Zustandsdichte, in dem von jedem Energie-Intervall

$$D\Lambda^n \geq |E| > D\Lambda^{n+1}$$

nur ein Zustand mitgenommen wird [9]. Streuprozesse am Rande der Energie-Intervalle werden so vernachlässigt. Verkleinert man D auf D/Λ , so werden die kleinsten Einteilchen-Energien

$$\pm D\Lambda^{-N} \rightarrow \pm D\Lambda^{-N-1} .$$

Dies entspricht einer Verlängerung der Kette um zwei Glieder. Die effektive Kopplung $J'(D')$ wird eine Funktion $J'(N)$. Man erhält daher dieselbe Skalierungsinvariante wie durch *poor man's scaling* ([8], Seite 835).

Für kleine D' , also große N , koppelt die Störstelle an den nullten Gitterplatz sehr stark und bildet ein Singulett, welches nur schwach mit der restlichen Kette der Länge $N-1$ *nichtmagnetisch* wechselwirkt.

Daher wird der Hamilton-Operator H_N durch einen effektiven Hamilton-Operator H_{N-1}^{eff} ersetzt: Es werden alle nichtmagnetischen Wechselwirkungen zugelassen, die nicht kleiner werden, wenn D' weiter ab-, das heißt N weiter zunimmt. Die Parameter des effektiven Hamilton-Operators H_{N-1}^{eff} für große N werden dann ermittelt, indem man die niedrigsten Eigenwerte von H_N an die von H_{N-1}^{eff} anpaßt. Dann ist man in der Lage, die Thermodynamik des Coqblin-Schrieffer-Modells bei tiefen Temperaturen mit diesem effektiven Hamilton-Operator H^{eff} zu beschreiben [9].

Die Rechnungen wurden stets für $\Lambda \geq 2$ durchgeführt ([8], Seite 834). Aber für $\Lambda > 1$ sind die Elektronen wegen des exponentiell abfallenden Hüpfmatrixelements um die Störstelle lokalisiert. Wollte man statt dessen mit Λ -Werten nahe bei Eins operieren, so erhöhte sich die Anzahl der benötigten Kettenglieder $\propto 1/\ln \Lambda$ schnell so sehr, daß eine genaue Bestimmung selbst der kleinsten Eigenwerte von H_N unmöglich würde. Eine Extrapolation der Resultate für $\Lambda \geq 2$ auf den Limes $\Lambda \rightarrow 1$ ist also nicht ohne weiteres erlaubt.

Es ist auch möglich, mit einer Verallgemeinerung der Methode die f -Spektraldichte zu berechnen [9, 37].

A.3 Diagrammatische Renormierungsgruppe

Diese Methode beruht auf der Invarianz der Dyson-Gleichung

$$R^{-1}(z) = R_0^{-1}(z) - \Sigma(z)$$

unter bestimmten Skalentransformationen der Propagatoren R_0 und R , Selbstenergien Σ , Vertexkorrekturen und Kopplungskonstanten [21]. Da diese Transformationen eine Gruppe bilden, faßt man sie unter dem Begriff „Renormierungsgruppe“ zusammen. Sie allein erlaubt aber nicht, die Energieskalen des Systems anzugeben. Denn dazu muß man die Dyson-Gleichung lösen. Dazu benötigt man Informationen über die *Diagrammstruktur*.

Für große Frequenzen berechnet man die Propagatoren, Selbstenergien und Vertexkorrekturen mit Hilfe der Diagrammtechnik mit Störungstheorie. Man ermittelt dann näherungsweise die Energieskalen des Systems, indem man die so gewonnenen störungstheoretischen Resultate an die exakten Skalenrelationen der Dyson-Gleichung anpaßt [21, 22, 23]. Diese Skalierungsgesetze gelten nur in dem Frequenzbereich, in dem Störungstheorie anwendbar ist und können nicht auf das eigentliche interessante Niederenergie-Verhalten des Systems angewendet werden.

Mit der diagrammatische Renormierungsgruppe summiert man so über

eine bestimmte Teilklasse von Diagrammen. Dies ist für das Coqblin-Schrieffer-Modell äquivalent zum Verfahren des *poor man's scaling* [22].

Um dies zu verdeutlichen, betrachten wir wieder das Coqblin-Schrieffer-Modell (2.4): Bei $T=0$ zeigt man mit Hilfe der störungstheoretisch ermittelten Skalengesetze, daß der Störstellen-Anteil der Magnetisierung M als Funktion des Magnetfeldes H sich als skalierende Funktion

$$\frac{M(H)}{M(H \rightarrow \infty)} = f\left(\frac{g\mu_B H}{T_H}\right) \quad (\text{A.4})$$

für große Magnetfelder

$$g\mu_B H \gg T_H \quad (\text{A.5})$$

darstellen läßt. Dabei ist T_H proportional zur Energieskala des Systems, der Kondo-Temperatur:

$$T_H = \frac{T_K}{\mu} \quad , \quad T_K = D e^{-1/(\rho J)} \sqrt[N]{\rho J} \quad (\text{A.6})$$

$$\mu = \exp\left[\frac{2}{N(N-1)} \sum_{m=1}^{N-1} m \cdot \ln(m)\right] \quad .$$

Die Proportionalitätskonstante μ erhält man, indem man für solche Magnetfelder die Störungstheorie anwendet ([9], Seite 187):

$$\frac{M(H)}{M(H \rightarrow \infty)} = 1 - \frac{\rho J}{N} + \frac{(\rho J)^2}{N} \ln \frac{g\mu_B H \cdot \mu}{D} + O(J^3) \quad . \quad (\text{A.7})$$

Dies ist nur zulässig, solange der dritte Term deutlich kleiner als der zweite bleibt:

$$\rho J \ln \frac{D}{g\mu_B H} \ll 1 \quad ,$$

in Übereinstimmung mit (A.5). Drückt man nun ρJ in (A.7) mit Hilfe von (A.6) durch T_H aus und fordert das Skalierungsgesetz (A.4), erhält man eine asymptotische Entwicklung für die Magnetisierung. Dabei ist in (A.6) der Wert von μ und damit von T_H eindeutig durch die Forderung festgelegt, daß die sich ergebende asymptotische Entwicklung keine Terme $\propto 1/\ln^2 \frac{g\mu_B H}{T_H}$ enthalten soll ([9], Seite 157):

$$\frac{M(H)}{M(H \rightarrow \infty)} = 1 - \frac{1}{N} \cdot \frac{1}{\ln \frac{g\mu_B H}{T_H}} - \frac{1}{N^2} \cdot \frac{\ln \ln \frac{g\mu_B H}{T_H}}{\ln^2 \frac{g\mu_B H}{T_H}} + O\left(\frac{\ln \ln \frac{g\mu_B H}{T_H}}{\ln^3 \frac{g\mu_B H}{T_H}}\right). \quad (\text{A.8})$$

Wir erkennen zwei Haupteigenschaften der diagrammatischen Renormierungsgruppe:

1. Die Diagrammstruktur geht in der Bestimmung der Energieskala ein. Die Energieskala läßt sich nur im störungstheoretischen Bereich bestimmen. Gleichung (A.8) gilt nur für große Magnetfelder und macht nur für

$$g\mu_B H \gg T_H$$

Sinn. Es ist damit nicht möglich, mit Hilfe der exakten Energieskala das diagrammatische Resultat in den Bereich kleiner Energien hin auszudehnen ([8], Seite 807), auch wenn darüber spekuliert wurde [22].

2. Nimmt man vom asymptotischen Resultat (A.8) nur den führenden Beitrag mit, hat man:

$$\begin{aligned} \frac{M(H)}{M(H \rightarrow \infty)} &= 1 - \frac{1}{N} \cdot \frac{1}{\ln \frac{g\mu_B H}{T_H}} \approx 1 - \frac{1}{N} \cdot \frac{\rho J}{1 - \rho J \ln \frac{D}{g\mu_B H}} \\ &= 1 - \frac{\rho J}{N} - \frac{(\rho J)^2}{N} \ln \frac{D}{g\mu_B H} - \frac{(\rho J)^3}{N} \ln^2 \frac{D}{g\mu_B H} - \dots \end{aligned}$$

Jeder Ordnung in J entsprechen endlich viele Diagramme. Hier wird eine Teilklasse von Diagrammen aufsummiert.

Im Rahmen des beschriebenen Verfahrens kann nicht begründet werden, warum gerade die mitgenommenen Diagramme das Verhalten der Störstelle bei niedrigen Energien besonders gut beschreiben sollten ([8], Seite 791). In dieser Arbeit werden diese Schwierigkeiten umgangen, indem die Diagrammtechnik mit *vollen*, selbstkonsistent zu bestimmenden Propagatoren formuliert wird (siehe Abschnitt 4.1 und Kapitel 6). Die diagrammatische Renormierungsgruppe arbeitet dagegen mit *nackten* Propagatoren.

A.4 Bethe-Ansatz

Ein weiterer Weg, das Coqblin-Schrieffer-Modell (2.4) zu lösen, beruht auf dem Bethe-Ansatz [10, 24]: Betrachtet man das Coqblin-Schrieffer-Modell im Ortsraum und vernachlässigt den Abschneideparameter D , so erhält man aus Gleichung (2.4) den Hamilton-Operator

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_1 & (A.9) \\ H_0 &= \sum_m \int dx c_m^+(x) \frac{1}{i} \frac{d}{dx} c_m(x) \\ H_1 &= \frac{J\rho}{N} \sum_{mn} \int dx \delta(x) c_m^+(x) c_n(x) f_n^+ f_m \quad . \end{aligned}$$

Die Austausch-Wechselwirkung H_1 kann man als eine Permutation der inneren Freiheitsgrade der Wellenfunktion des Systems auffassen. Der Grund dafür ist, daß die Störstelle keine räumliche Ausdehnung hat. Das an der Störstelle streuende Leitungselektron ist stets links oder rechts der Störstelle, und das System ist eindimensional. (Genauer ist das System halbdimensional, da sich alle Leitungselektronen nur von links nach rechts bewegen.) Das Verfahren funktioniert deshalb nur für ein völlig lokales Streupotential.

Die Eigenfunktionen des Systems transformieren sich *ohne* Wechselwirkung H_1 unter der antisymmetrischen Darstellung der Permutationsgruppe der Freiheitsgrade (Pauli-Prinzip). Man geht nun zu einer Basis über, in der die exakten Eigenfunktionen sich nach einer allgemeineren, nichtkommutativen Darstellung der Permutationsgruppe der Freiheitsgrade auch der Störstelle transformieren [10]. Ist diese Darstellung gefunden, so ist das Problem auf ein verallgemeinertes Modell von freien Teilchen zurückgeführt ([24], Seite 334).

Das Resultat der Streuung ist in verallgemeinerten Streuphasen enthalten. Die (spinabhängige!) Wellenfunktion Ψ für M Teilchen wird so, ausgehend vom Koordinatenbereich

$$x_1 < x_2 < \dots < x_M ,$$

für alle Koordinaten x_1, \dots, x_M bestimmt. Die Eigenwerte der Energie

ergeben sich, indem man für die Wellenfunktion Ψ periodische Randbedingungen auf einem Intervall $x_1 < x_2 < \dots < x_M < x_1 + L$ der Länge L fordert:

$$\Psi(x_1 + L, x_2, \dots, x_M) = \Psi(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad .$$

Diese Randbedingungen sind jedoch kompliziert, da man dazu eine Koordinate (hier x_1) mit allen anderen permutieren muß und die dann nicht-kommutative Darstellung der Symmetriegruppe eingeht. Man erhält so statische, basisunabhängige Größen wie die Zustandssumme, aber keine Matrixelemente von Observablen. Denn man kann den komplizierten Basiswechsel gar nicht explizit ausführen.

Die Energieskalen von H ergeben sich als Funktion eines Abschneideparameters D' , der die unbeschränkten Energie-Eigenwerte des Systems *nach* der Diagonalisierung nach oben und unten abschneidet. Rasul und Hewson [63] stellten diesen Abschneideparameter D' als Funktion von D dar, dem ursprünglichen Abschneideparameter des Anderson-Modells:

$$D' = \frac{\pi e D}{N^{\frac{N}{N-1}}} \quad .$$

Dies ist bemerkenswert, da sich die beiden Abschneideparameter auf verschiedene Basen im Hilbertraum beziehen. So konnten Rasul und Hewson zeigen, daß sich die freie Energie des Anderson-Modells in eine Potenzreihe in $1/N$ entwickeln läßt [9]. Außerdem läßt sich damit die exakte Kondotemperatur im Anderson-Modell ermitteln. Allerdings versagt diese Methode für das Coqblin-Schrieffer-Modell [9]: Bis heute wurde für dieses Modell eine zum Anderson-Modell analoge Anpassung des Abschneideparameters des Bethe-Ansatzes *nicht* gefunden.

A.5 1/N-Entwicklung

Für das Anderson-Modell konnte mit Hilfe des Bethe-Ansatzes und der im Anhang A.4 erwähnten Anpassung des Abschneideparameters gezeigt werden [9], daß die freie Energie sich als Potenzreihe in $1/N$ schreiben läßt. Dabei ist N die Anzahl innerer Freiheitsgrade der Teilchen. Für

den Störstellen-Anteil der Thermodynamik kann man daher auf eine Diagrammtechnik zurückgreifen, bei der die Diagramme in Klassen nach $1/N$ geordnet und aufsummiert werden. Diese Diagrammtechnik heißt daher eine $1/N$ -Entwicklung. Allerdings ist es schwierig, mit dieser Diagrammtechnik auch Störstellen-Anteile von Greenschen Funktionen zu ermitteln. Zum Beispiel wird in der $1/N$ -Entwicklung die f -Spektralfunktion nichtintegrierbar [14, 36]. Der Grund dafür ist, daß die *Breite* einer Resonanz von der Ordnung $1/N$ sein kann (siehe auch Abschnitt 5.5).

Ein weiteres Problem ist, daß die so ermittelten Störstellen-Anteile von Observablen nicht mit der exakten Energieskala des Systems skalieren. Auch wenn dies behauptet wurde [25], kann man mit der $1/N$ -Entwicklung *nicht* den Bereich hoher Temperaturen oder Magnetfelder beschreiben. Zum Beispiel erkennt man an Gleichung (A.8), daß der dritte Term auf der rechten Seite von der Ordnung $1/N^2$ ist, der nächste Term aber *nicht* von höherer Ordnung in $1/N$.

Es ist zudem nicht klar, unter welchen Umständen die $1/N$ -Entwicklung für andere Modelle anwendbar ist. Vermutlich beschreibt die $1/N$ -Entwicklung das Tieftemperatur-Verhalten des Störstellensystems nur, wenn das System Fermi-Flüssigkeits-Verhalten zeigt [9].

Anhang B

Bedeutung der Spektraldichten $\rho_{0,m}$ und $\widehat{\rho}_{0,m}$

Die Resolvente $1/(z-\widetilde{H})$, die in Gleichung (4.5) eingeführt wurde, lässt sich folgendermaßen zerlegen:

Sei $P_i = |\Psi_i\rangle\langle\Psi_i|$ der Projektor auf den i -ten Eigenzustand von H mit der Energie E_i . Der Hamilton-Operator H lässt sich spektral zerlegen:

$$H = \sum_i E_i P_i \quad .$$

Sei P_j^α der Projektor auf den j -ten Eigenzustand von $H_0 = H_f + H_c$, wobei für $\alpha=0$ die Störstelle unbesetzt und für $\alpha=1, \dots, m$ die Störstelle besetzt ist. Diese Zustände haben die Energie

$$E_j^{\alpha=0} = E_j^c \quad , \quad E_j^{\alpha=1\dots N} = E_j^c + \epsilon_f \quad .$$

Dabei ist E_j^c die Energie des j -ten Eigenzustandes des Fermi-Sees. Dann kann man wegen

$$\widetilde{H}X = [H_c, X] + (H_f + H_1) \cdot X = H \cdot X - X \cdot H_c$$

den Superoperator \widetilde{H} zerlegen:

$$\widetilde{H}(P_i P_j^\alpha) = (E_i - E_j^c)(P_i P_j^\alpha) \quad . \quad (\text{B.1})$$

Die gesuchte Zerlegung der Resolvente lautet damit

$$\frac{1}{z - \widetilde{H}} \mathbf{1} = \frac{1}{z - \widetilde{H}} \sum_{\substack{i,j \\ \alpha=0\dots N}} P_i P_j^\alpha = \sum_{\substack{i,j \\ \alpha=0\dots N}} \frac{P_i P_j^\alpha}{z - (E_i - E_j^c)} \quad . \quad (\text{B.2})$$

Dies ist keine Zerlegung nach orthogonalen Projektoren, aber das braucht man für das Folgende nicht. Für $T=0$ können wir mit Hilfe der Zerlegung von $1/(z-\tilde{H})$ die Spektralzerlegung der Propagatoren R_0, R_m gewinnen und so einige allgemeine Aussagen über ihr Verhalten machen.

Wir setzen hier die Grundzustandsenergie des Fermi-Sees zu Null ([14], Seite 855). Bezeichne $|\Psi_0^\alpha\rangle$ den ungestörten Grundzustand des Systems mit unbesetzter ($\alpha=0$) oder besetzter ($\alpha=1\dots N$) Störstelle. Für $T\rightarrow 0$ geht der Propagator $R_\alpha(z)$ in den Erwartungswert der Resolvente $1/(z-\tilde{H})$ mit dem ungestörten Grundzustand über:

$$R_\alpha(z) \rightarrow \langle \Psi_0^\alpha | \frac{1}{z-\tilde{H}} | \Psi_0^\alpha \rangle = \sum_j \frac{|\langle \Psi_0^\alpha | \Psi_j \rangle|^2}{z - (E_j - E_0^c)} \quad . \quad (\text{B.3})$$

Deshalb lautet für $T=0$ die Spektraldichte des Propagators $R_\alpha(z)$

$$\rho_\alpha(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} R_\alpha(\omega + i0^+) = \sum_j |\langle \Psi_j | \Psi_0^\alpha \rangle|^2 \delta(\omega - E_j + E_0^c) \quad . \quad (\text{B.4})$$

Folglich mißt $\rho_\alpha(\omega - E_0^c)$ den Überlapp zwischen dem nicht wechselwirkenden Grundzustand $|\Psi_0^\alpha\rangle$ und einem exakten Eigenzustand der Energie ω . Die mit dem Boltzmann-Faktor gewichtete Zustandsdichte

$$\hat{\rho}_\alpha(\omega) = e^{\beta(E_0 - \omega)} \rho_\alpha(\omega) \quad (\text{B.5})$$

bestimmt wegen (4.7) die Thermodynamik des Systems. Für tiefe Temperaturen kann man sie mit Hilfe der Zerlegung (B.2) der Resolvente gewinnen:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_\alpha(\omega) &= -\frac{1}{\pi} e^{\beta(E_0 - \omega)} \text{Im} R_\alpha(\omega + i0^+) \\ &= e^{\beta(E_0 - \omega)} \sum_{i,j} P_i P_j^\alpha e^{-\beta E_j^c} \delta(\omega - (E_i - E_j^c)) \\ &= \sum_{i,j} P_i P_j^\alpha e^{-\beta(E_0 - E_i)} \delta(\omega - (E_i - E_j^c)) \\ &\xrightarrow{T \rightarrow 0} \sum_j |\langle \Psi_0 | \Psi_j^\alpha \rangle|^2 \delta(\omega - E_0 + E_j^c) \quad . \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Also mißt $\hat{\rho}_{0,m}(E_0 - \omega)$ den Überlapp des exakten Grundzustandes $|\Psi_0\rangle$ mit den Eigenzuständen des ungestörten Hamilton-Operators der Energie ω .

Anhang C

Orthogonalitäts-Katastrophe

Wir können mit Hilfe der Spektralzerlegung (B.3) des Propagators R_α die in Kapitel 3 erwähnte Orthogonalitäts-Katastrophe diskutieren, ohne die Brillouin-Wigner-Störungstheorie wie Kuramoto [39] zu benötigen.

Der Propagator R_α hat bei der Energie

$$z = E_0 - E_0^c$$

einen Pol der Stärke

$$| \langle \Psi_0^\alpha | \Psi_0 \rangle |^2 \quad .$$

Im thermodynamischen Limes verschwindet dieser Überlapp wegen der Orthogonalitäts-Katastrophe. Die Selbstenergie $\Sigma_f(z)$ von $R_f(z)$ ist bei $T=0$ durch

$$R_f(z) = \frac{1}{z - H_f - \Sigma_f(z)}$$

gegeben, mithin die Polstärke durch

$$| \langle \Psi_0^\alpha | \Psi_0 \rangle |^2 = \langle \Psi_0^\alpha | \frac{1}{1 - \frac{d}{dz} \Sigma_f(z)} | \Psi_0^\alpha \rangle \quad .$$

Folglich divergieren bei $z = E_0 - E_0^c$ die Ableitungen

$$\frac{d}{dz} \Sigma_0(z), \dots, \frac{d}{dz} \Sigma_N(z) \quad .$$

Diese Eigenschaft sollte bei einer Näherung erhalten bleiben. Es ist bekannt, daß die relevanten Skelettdiagramme diese Eigenschaft besitzen [39].

Die entsprechenden Spektralfunktionen in einer $1/N$ -Entwicklung dagegen zeigen keine Orthogonalitäts-Katastrophe. Denn es werden zwar im Gegensatz zur Störungstheorie unendlich viele Anregungen mitgenommen, jedoch enthält jede dieser Anregungen nur endlich viele Teilchen-Loch-Paare ([14], Seite 879).

Anhang D

Diagrammtechnik

D.1 Diagrammtechnik für die freie Energie

Man entwickelt den Propagator $R_f(z)$ aus Gleichung (4.5) in eine geometrische Reihe in die Hybridisierung:

$$R_f(z) = \sum_{\nu \geq 0} \left\langle \frac{1}{z - L_c - H_f} \left(H_1 \frac{1}{z - L_c - H_f} \right)^\nu \right\rangle_{\text{Band}} .$$

Sämtliche Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren für Leitungselektronen stehen in H_1 :

$$H_1 = \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_{p,m} (c_{pm}^+ b^+ f_m + h.k.)$$

Wir wenden daher *zuerst* L_c auf alle *rechts* von ihm stehenden c -Operatoren an und erhalten die Energie-Nenner $z - E - H_f$, wobei

$$L_c(c_{pm}^+ c_{qn} \dots) = (\epsilon_p - \epsilon_q + \dots)(c_{pm}^+ c_{qn} \dots) = E(c_{pm}^+ c_{qn} \dots) .$$

Wegen $L_c H_0 = 0$ ist der rechts stehende Energie-Nenner gerade $1/(z - H_f)$. *Danach* wird der thermodynamische Mittelwert bezüglich der Leitungselektronen ausgewertet. Da H_c ein Einteilchen-Operator ist, kann dazu das Wick'sche Theorem angewandt werden. In 2ν -ter Ordnung müssen 2ν Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren der Leitungselektronen gepaart werden, um $\langle \dots \rangle_{\text{Band}}$ zu bilden. Die f -Störstelle ist entweder null- oder einfach besetzt. Daher hat jedes Diagramm ein Rückgrat aus abwechselnd

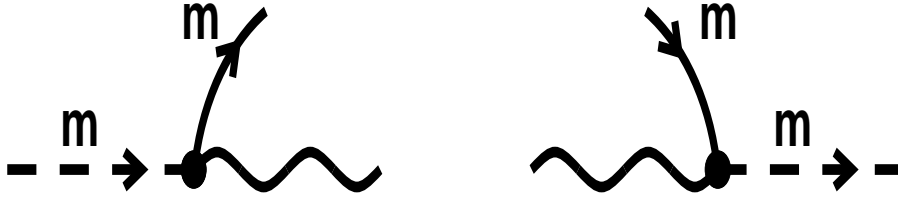


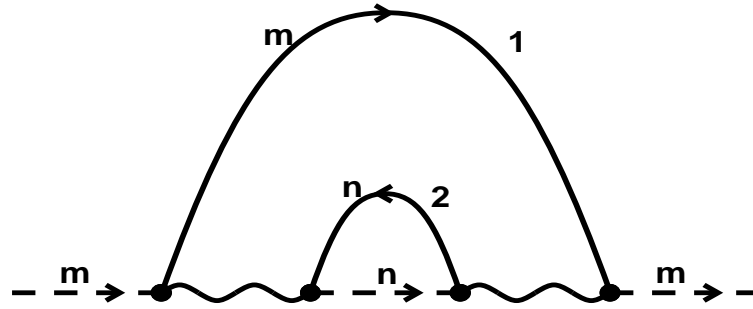
Abbildung D.1: Vertices für das Anderson-Modell. Eine gestrichelte Linie stellt den nackten Propagator für die besetzte f^1 -Konfiguration mit interner Quantenzahl m dar. Eine geschwungene Linie stellt den nackten Propagator für die unbesetzte f^0 -Konfiguration dar. Eine durchgezogene Linie stellt den Propagator für ein effektives Leitungselektron mit interner Quantenzahl m dar.

geschwängelten b - und gestrichelten f -Linien. Ansonsten können die Regeln für Feynman-Diagramme verwendet werden. Die Wickschen Paarungen werden durch eine durchgezogene, gekrümmte Leitungselektron-Linie dargestellt. An jedem Vertex läuft eine b -Linie und eine c -Linie ein und eine f -Linie aus oder umgekehrt; siehe Abbildung D.1.

Es gibt nur Diagramme gerader Ordnung. Jedes Diagramm 2ν -ter Ordnung hat den Vorfaktor $V^{2\nu}/N^\nu$. Bei ungerader Anzahl der sich kreuzenden c -Linien wechselt das Vorzeichen.

Als Beispiel berechnen wir ein Diagramm vierter Ordnung in V , das in Abbildung D.2 gezeigt ist. Wir wählen die Integrationsvariablen $\epsilon_{1,2}$ wie im Diagramm. Es folgt

$$\begin{aligned}
 R_m^{(4)}(z) &= \frac{\rho^2 V^4}{N^2} \frac{1}{z - \epsilon_f} \cdot N \cdot \int_{-D}^D d\epsilon_1 f(\epsilon_1) \frac{1}{z + \epsilon_1} \times \\
 &\quad \times \int_{-D}^D d\epsilon_2 f(-\epsilon_2) \frac{1}{z + \epsilon_1 - \epsilon_2 - \epsilon_f} \frac{1}{z + \epsilon_1} \frac{1}{z - \epsilon_f} \\
 &= \frac{\rho^2 V^4}{N} \int_{-D}^D d\epsilon_1 \int_{-D}^D d\epsilon_2 f(\epsilon_1) f(\epsilon_2) \frac{1}{z - \epsilon_f} \frac{1}{z + \epsilon_1} \frac{1}{z + \epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon_f} \frac{1}{z + \epsilon_1} \frac{1}{z - \epsilon_f}.
 \end{aligned} \tag{D.1}$$

Abbildung D.2: Diagramm vierter Ordnung für $R_m(z)$

Dabei sei die Zustandsdichte ρ konstant. f ist die Fermi-Funktion. Diese Regeln stimmen mit denen bei Bickers ([14], Tabelle III) überein. Jedoch ist die Herleitung hier einfacher, da wir die Resolvente $1/(z-\tilde{H})$ verwendet haben.

D.2 Selbstenergien und Skelettdiagramme

Die entsprechenden irreduziblen Diagramme für die *Selbstenergie* Σ ergeben sich aus der Diagrammtechnik. Ein *irreduzibles* Diagramm ist eines, das nicht durch Zertrennung einer inneren Linie in zwei Teile getrennt werden kann. Eine *Selbstenergie* ist ein Teildiagramm, das *irreduzibel* ist und an einem nackten ionischen Propagator beginnt und endet. Zum Beispiel ergibt sich für das Diagramm vierter Ordnung in Abbildung D.2 der Selbstenergie-Anteil, indem die beiden äußeren ionischen Propagatoren weggelassen werden:

$$\Sigma_m^{(4)}(z) = \frac{\rho^2 V^4}{N} \int_{-D}^D d\epsilon_1 \int_{-D}^D d\epsilon_2 f(\epsilon_1) f(\epsilon_2) \frac{1}{z + \epsilon_1} \frac{1}{z + \epsilon_1 + \epsilon_2} \frac{1}{z + \epsilon_1}.$$

Ein Diagramm heißt *Skelettdiagramm*, wenn man alle *inneren* Propagatoren mit Selbstenergie-Anteilen durch die nackten Propagatoren ersetzt. Ein Beispiel zeigt Abbildung D.3: Entfernt man in diesem Diagramm vierter Ordnung für $R_m(z)\Sigma_m(z)$ die Selbstenergie, so bleibt ein Skelettdiagramm zweiter Ordnung. Man erkennt an diesem Beispiel: *Alle* Diagramme für $R_m\Sigma_m$ mit nichtkreuzenden Leitungselektron-Linien haben dieses Skelettdiagramm zweiter Ordnung, entsprechend für $R_0\Sigma_0$. Summiert man in der

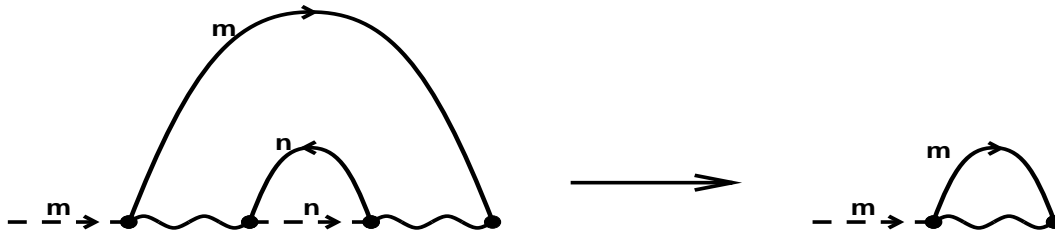


Abbildung D.3: Entfernung eines Selbstenergie-Einschubes

sogenannten „non-crossing-approximation“ oder NCA *alle* nichtkreuzenden Diagramme, so nimmt man die Skelettdiagramme zweiter Ordnung mit.

Man beachte: Diese Definition eines Skelettdiagramms *unterscheidet* sich von der üblichen [64] dadurch, daß die Vertexkorrekturen *nicht* aus den Skelettdiagrammen entfernt werden. Mit dieser Definition der Skelettdiagramme folgt:

Weil alle Selbstenergie-Einschübe aus den Skelettdiagrammen herausgenommen werden, wird ein Selbstenergie-Diagramm n -ter Ordnung $\Sigma_f^{(n)}$ ein Funktional der vollen ionischen Propagatoren R_f :

$$\Sigma_f^{(n)} = \Sigma_f^{(n)}(R_f). \quad (\text{D.2})$$

Wir benötigen genau diese Eigenschaft der Skelettdiagramme, um das universelle Verhalten von Störstellensystemen zu beschreiben. Um die Propagatoren aus den Skelettdiagrammen zu bestimmen, verwendet man ein erzeugendes Funktional, das im Abschnitt 4.1 eingeführt wird.

D.3 Diagrammtechnik für den f -Propagator

Ausgehend von der Integraldarstellung (4.11) kann man den f -Propagator in Diagramme entwickeln:

Ein Diagramm vierter Ordnung für ZG_{fm} ist in Abbildung D.4 gezeigt. Dabei ist in den Energie-Nennern unterhalb der gestrichelten Hilfslinie z durch $z+\omega$ zu ersetzen, um (4.11) zu erhalten. Wenn wir die gestrichelte Linie als Propagator eines Hilfsfeldes Ψ_m auffassen, zeigt Abbildung D.4 das Diagramm für einen Ausdruck der Form $R_0\Sigma_0^{(4)}$.

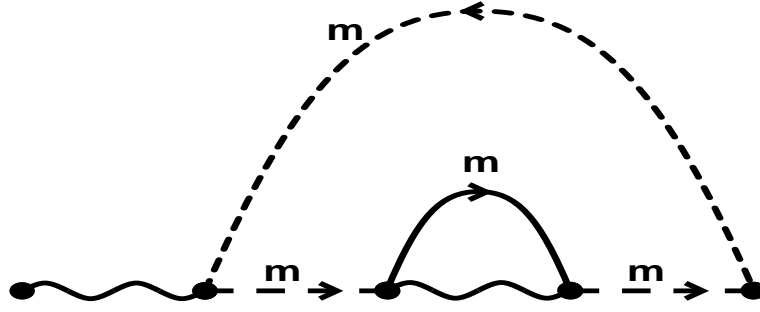


Abbildung D.4: Das Diagramm vierter Ordnung für $ZG_{fm}(\omega)$ entspricht einem Diagramm vierter Ordnung für $R_0\Sigma_0$

Um das erzeugende Funktional aufzustellen, koppeln wir die Störstelle an fermionische Hilfsfelder Ψ_{qm} mit gleicher Zustandsdichte wie das Leitungsband:

$$\begin{aligned}
 H_0 &= H_c + H_\Psi = \sum_{|\epsilon_p| \leq D, m} \epsilon_p c_{pm}^+ c_{pm} + \sum_{\epsilon_q \leq \omega, m} \epsilon_q \Psi_{qm}^+ \Psi_{qm} \\
 H_f &= \epsilon_f \cdot \sum_m f_m^+ f_m \\
 H_1 &= \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_{p,m} (c_{pm}^+ b^+ f_m + h.k.) + \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_{q,m} (\lambda_m \Psi_{qm}^+ b^+ f_m + h.k.) \quad .
 \end{aligned}$$

Statt des Liouville-Operators L_c haben wir $L_c + L_\Psi$ einzusetzen, und der thermodynamische Mittelwert ist über die Leitungselektronen und die Hilfsfelder Ψ zu bilden.

Jeder Vertex hat das Gewicht V/\sqrt{N} oder $\lambda_m V/\sqrt{N}$, je nachdem, ob eine c - oder eine Ψ -Linie ein- oder ausläuft. Jede Ψ -Linie ist gestrichelt.

Werten wir das Diagramm in Abbildung D.4 aus, erhalten analog zu (D.1):

$$\begin{aligned}
 &R_0^{(4)}(z)\Sigma_0(z) \\
 &= \frac{\rho^2 V^4}{N^2} \sum_m \lambda_m^2 \int_{-\infty}^{\omega} d\epsilon_1 \int_{-D}^D d\epsilon_2 f(\epsilon_1) f(\epsilon_2) \frac{1}{z} \frac{1}{z + \epsilon_1 - \epsilon_f} \frac{1}{z + \epsilon_1 + \epsilon_2} \frac{1}{z + \epsilon_1 - \epsilon_f} .
 \end{aligned}$$

Differenzieren wir dies nach λ_m^2 für $\lambda_1 = \dots = \lambda_N = 0$ und dann nach ω , so erhalten wir den Beitrag der Abbildung D.4 zum f -Propagator als

$$\left. \frac{\partial}{\partial \omega} \frac{\partial}{\partial \lambda_m^2} \right|_{\lambda_1 = \dots = \lambda_N = 0} R_0^{(4)}(z)\Sigma_0(z) = \rho V^2 f(\omega) G_f(\omega) \cdot Z \quad .$$

Dies zeigt, wie wir allgemein vorzugehen haben. Wir führen Skelettdiagramme ein und erhalten das erzeugende Funktional (4.8). Ein Skelettdiagramm mit n_c Leitungselektron-Linien und n_Ψ Ψ -Linien hat die Ordnung $n = n_c + n_\Psi$. Das Funktional Φ_Ψ erfüllt nach Konstruktion die Sattelpunktsbedingung (4.9). Wir erhalten daher die Darstellung (4.13), wenn wir das Analogon der freien Energie als $F_\Psi = -T \ln \Phi_\Psi$ definieren.

Anhang E

Beweis der Sattelpunkteigenschaft

Für den Beweis der Sattelpunkteigenschaft [14] verwendet man folgende Identität:

$$\oint dz e^{-\beta z} \Lambda_1(z) \int_{-D}^D d\epsilon f(\epsilon) \Lambda_2(z + \epsilon) = \oint dz e^{-\beta z} \Lambda_2(z) \int_{-D}^D d\epsilon f(\epsilon) \Lambda_1(z + \epsilon). \quad (\text{E.1})$$

Sie ergibt sich durch Verschieben der Variablen $z \rightarrow z - \epsilon$. Dies entspricht einer zyklischen Vertauschung der Vertices im Skelettdiagramm. Ein Beispiel zeigt Abbildung 4.2.

Nehmen wir nun an, R_f hänge von einem Parameter λ *nur* über die Propagatoren R_f ab. Wegen (E.1) kann man in jedem Skelettdiagramm die Parameterabhängigkeit immer auf den äußeren Propagator umwälzen. Dies zeigt Abbildung E.1. Es folgt im erzeugenden Funktional:

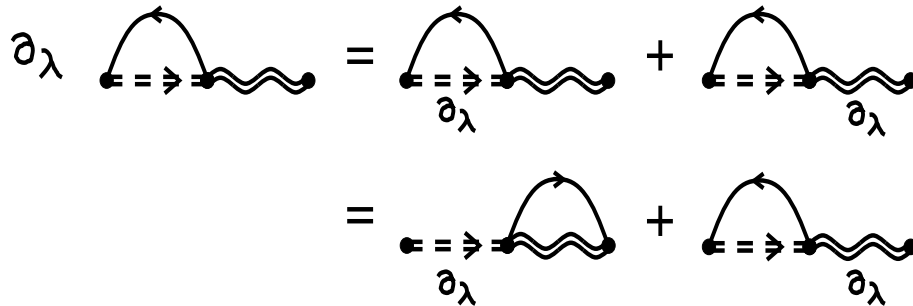


Abbildung E.1: Die Ableitung nach einem Parameter λ kann immer auf den äußeren Propagator umgewälzt werden. Das andere Skelettdiagramm zweiter Ordnung ergibt das gleiche Resultat.

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} Sp_f \Sigma_f^{(n)} R_f = n Sp_f \Sigma_f^{(n)} \frac{\partial}{\partial \lambda} R_f \quad .$$

Genauso gilt

$$Sp_f R_f \frac{\partial}{\partial \lambda} \Sigma_f^{(n)} = (n-1) Sp_f \Sigma_f^{(n)} \frac{\partial}{\partial \lambda} R_f$$

und damit, falls man die Dyson-Gleichung annimmt,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda} \Phi &= \beta Sp_f \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} \left(\sum_n \left(1 - \frac{1}{n}\right) \frac{\partial}{\partial \lambda} \Sigma_f^{(n)} R_f - R_f \sum_n \frac{\partial}{\partial \lambda} \Sigma_f^{(n)} \right) \\ &= 0 \quad . \end{aligned}$$

Die Sattelpunktsbedingung lautet mit anderen Worten: Wenn Z von einem Parameter λ abhängt, dann nur noch explizit: Wir können R als von λ unabhängig auffassen. Ersetzen wir daher in Gleichung (4.8) jeden Propagator $R_f(z)$ durch $R_f(\mu z)$, so können wir wegen

$$\left. \frac{\partial}{\partial \mu} \right|_{\mu=1} R_f(\mu z) = \frac{d}{dz} R_f(z)$$

als Parameter nun $\lambda = z$ wählen. Daher folgt aus (4.8) durch partielle Integration nach $e^{-\beta z}$ am Sattelpunkt

$$\Phi = Z \quad .$$

Damit ist (4.9) für das exakte Funktional (4.8) und jede Näherung gezeigt, die Familien von Skelettdiagrammen mitnimmt (Abschnitt 4.3).

Anhang F

Beweis der Integraldarstellung für den f -Propagator

Wir leiten eine Verallgemeinerung zum Ergebnis von Keiter/Morandi [65] für den Störstellen-Anteil von Korrelationsfunktionen für Operatoren A und B her. A und B müssen dabei weder Fermion- noch Bosonoperatoren sein.

Man erhält die Korrelationsfunktion ([14], Seite 861)

$$G_{AB}(\tau) = (-1) \langle T_\tau A(\tau) B \rangle_H$$

$$\stackrel{\tau \geq 0}{=} \frac{(-1) Sp_f Sp_c e^{-\beta H} \cdot (e^{\tau H} A e^{-\tau H} B)}{Sp_f Sp_c e^{-\beta H}}$$

im Frequenzraum mit den Matsubara-Frequenzen $\omega_n = (n + \frac{1}{2}) \cdot 2\pi T$ als

$$G_{AB}(i\omega_n) = \int_0^\beta e^{i\omega_n \tau} G_{AB}(\tau) d\tau \quad (\text{F.1})$$

folgendermaßen: Wendet man die Identität (4.2) zweimal auf G_{AB} an, so folgt

$$G_{AB}(\tau) = \frac{(-1)}{Z} Sp_f \langle e^{-(\beta-\tau)\tilde{H}} A e^{-\tau\tilde{H}} B \rangle_{\text{Band}} \quad .$$

Man stellt dies als doppeltes Wegintegral über die z, z' -Pole von \tilde{H} dar:

$$Z G_{AB}(\tau) = Sp_f \frac{(-1)}{(2\pi i)^2} \oint \oint dz dz' \langle \frac{e^{-(\beta-\tau)z}}{z - \tilde{H}} A \frac{e^{-\tau z'}}{z' - \tilde{H}} B \rangle_{\text{Band}} \quad .$$

Die τ -Integration ergibt wegen $e^{i\omega_n\beta} = -1 = \mu$

$$\begin{aligned}
& (-Z)G_{AB}(i\omega_n) \tag{F.2} \\
&= Sp_f \frac{1}{(2\pi i)^2} \oint \oint dz dz' \frac{\mu e^{-\beta z'}}{i\omega_n + z - z'} < \frac{1}{z - \widetilde{H}} A \frac{1}{z' - \widetilde{H}} B >_{\text{Band}} \\
&- Sp_f \frac{1}{(2\pi i)^2} \oint \oint dz dz' \frac{e^{-\beta z}}{i\omega_n + z - z'} < \frac{1}{z - \widetilde{H}} A \frac{1}{z' - \widetilde{H}} B >_{\text{Band}} ,
\end{aligned}$$

wobei über alle Pole von \widetilde{H} integriert wird. Man beachte, daß das Spektrum $E_n - E_m^c$ von \widetilde{H} nicht nach unten beschränkt ist im Gegensatz zum Spektrum von H bei Keiter [65]. Daher integriert man den ersten Summanden (der $e^{-\beta z'}$ enthält) über z . Der Integrand verschwindet dann für $|z| \rightarrow \infty$ wie $1/z^2$. Daher verschwindet auch das Integral über *alle* Pole des Integranden. Folglich ist das Integral über die *reellen* Pole von $1/(z - \widetilde{H})$ gleich dem negativen Integral über die komplexen Pole von $1/(i\omega_n + z - z')$. Die beiden Regionen überlappen sich offenbar nicht. Entsprechend verfährt man mit dem zweiten Summand:

$$\begin{aligned}
& (-Z)G_{AB}(i\omega_n) \\
&= Sp_f(-1) \oint_{\frac{1}{z' - \widetilde{H}} - \text{Pole}} \frac{dz'}{(2\pi i)} \mu e^{-\beta z'} < \frac{1}{z' - i\omega_n - \widetilde{H}} A \frac{1}{z' - \widetilde{H}} B >_{\text{Band}} \\
&+ Sp_f(-1) \oint_{\frac{1}{z - \widetilde{H}} - \text{Pole}} \frac{dz}{(2\pi i)} e^{-\beta z} < \frac{1}{z - \widetilde{H}} A \frac{1}{i\omega_n + z - \widetilde{H}} B >_{\text{Band}} .
\end{aligned}$$

Verschiebt man im ersten Integral z nach $z + i\omega_n$ und benennt z' in z um, so erhält man wegen $\mu^2 = 1$ insgesamt ein Integral über alle Pole:

$$ZG_{AB}(i\omega_n) = Sp_f \frac{1}{(2\pi i)} \oint dz e^{-\beta z} < \frac{1}{z - \widetilde{H}} A \frac{1}{z + i\omega_n - \widetilde{H}} B >_{\text{Band}} . \tag{F.3}$$

Dies ist das Analogon zum Keiter/Morandi-Ausdruck für die Korrelationsfunktion. Man kann damit die gesuchte Integraldarstellung für den f -Propagator gewinnen:

Im Anderson-Modell mit verbotener Doppelbesetzung der Störstelle bezeichne $|m \rangle \langle m|$ den Projektor auf eine der einfach besetzten ionischen Konfigurationen und $|0 \rangle \langle 0|$ auf die unbesetzte ionische Konfiguration.

Für einen Operator X ist dann die Spur über alle f -Zustände gegeben durch

$$Sp_f X = \sum_m \langle m | X | m \rangle + \langle 0 | X | 0 \rangle \quad .$$

Setzt man B als Erzeugungs- und A als Vernichtungs-Operator für ein f -Elektron auf der Störstelle an (und das sind keine Fermi-Operatoren),

$$A = |0\rangle\langle m| = F_m, \quad B = |m\rangle\langle 0| = F_m^+,$$

so folgt für den f -Propagator die gesuchte Darstellung [14]:

$$ZG_f(i\omega_n) = Sp_f \oint \frac{e^{-\beta z} dz}{2\pi i} \langle \langle m | \frac{1}{z + i\omega_n - \widetilde{H}} | m \rangle \rangle \cdot \langle \langle 0 | \frac{1}{z - \widetilde{H}} | 0 \rangle \rangle_{\text{Band}} \quad .$$

Der Imaginärteil dieses Propagators beschreibt die Spektralverteilung für die Wegnahme oder Hinzufügung eines Elektrons in das System.

Anhang G

Abhängigkeit des erzeugenden Funktionals von V , ϵ_f und T

G.1 Abhängigkeit von der Hybridisierung V

Das Skelettdiagramm n -ter Ordnung $\Sigma_f^{(n)} R_f(z)$ hängt von ρV^2 explizit nur durch den Faktor V^n ab. Wegen

$$\rho V^2 \frac{\partial}{\partial \rho V^2} V^n = \frac{n}{2} V^n$$

folgt aus dem erzeugenden Funktional (4.8)

$$\begin{aligned} \rho V^2 \frac{\partial}{\partial \rho V^2} Z &= \beta S p_f \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} \left[\sum_n \left(1 - \frac{1}{n}\right) \frac{n}{2} \Sigma_f^{(n)}(z) \cdot R_f(z) \right. \\ &\quad \left. - R_f(z) \sum_n \frac{n}{2} \Sigma_f^{(n)}(z) \right] \\ &= -\frac{\beta}{2} S p_f \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} \Sigma_f(z) R_f(z) \quad . \end{aligned}$$

Der Störstellen-Anteil der freien Energie, $F = -T \ln Z$, hängt daher wie folgt von der Hybridisierung ab:

$$Z \cdot \rho V^2 \frac{\partial}{\partial \rho V^2} F = \frac{1}{2} S p_f \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} \Sigma_f(z) R_f(z) \quad . \quad (\text{G.1})$$

G.2 Abhängigkeit von der f^0 - f^1 -Energiedifferenz ϵ_f

Das erzeugende Funktional (4.8) hängt von ϵ_f nur über

$$H_f = \epsilon_f \sum_m f_m^+ f_m$$

explizit ab. Wegen

$$\sum_m R_m(z) = Sp_f R_f(z) \sum_m f_m^+ f_m$$

hängt der Störstellen-Anteil der freien Energie wie folgt von ϵ_f ab:

$$Z \epsilon_f \frac{\partial}{\partial \epsilon_f} F = \sum_m \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} R_m(z) \quad . \quad (\text{G.2})$$

G.3 Abhängigkeit von der Temperatur T

Es wird die auf die Variable $z = T \cdot u$ transformiert:

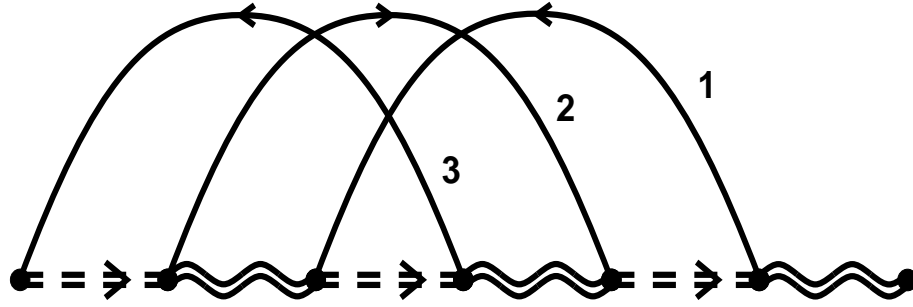
$$\Phi = Sp_f \oint \frac{du}{2\pi i} e^{-u} \left[\sum_n \left(1 - \frac{1}{n}\right) \Sigma_f^{(n)}(Tu) \cdot R_f(Tu) + \ln(Tu - H_f - \Sigma_f(Tu)) \right].$$

Man kann hier wie in Anhang E beweisen, daß Z Sattelpunkt bezüglich Variation von R_f ist. Die explizite T -Abhängigkeit steckt in Φ im Tu -Term im Logarithmus und in der expliziten T -Abhängigkeit der Skelettdiagramme:

$$\begin{aligned} T^2 \frac{\partial}{\partial T} Z &= Sp_f \oint \frac{du}{2\pi i} e^{-u} T^2 \frac{\partial}{\partial T} \sum_n \left(1 - \frac{1}{n} - 1\right) \Sigma_f^{(n)}(Tu) \cdot R_f(Tu) \\ &+ Sp_f \oint \frac{du}{2\pi i} e^{-u} T^2 u R_f(Tu) \quad . \end{aligned}$$

Um diese explizite T -Abhängigkeit der Skelettdiagramme zu ermitteln, betrachten wir zum Beispiel das einzige Skelettdiagramm sechster Ordnung für $\Sigma_0 R_0$ (Abbildung G.1, Integrationsvariable $\epsilon_{1,2,3}$ wie im Diagramm):

$$\begin{aligned} &\Sigma_0^{(6)}(Tu) R_0(Tu) \\ &= (-1)^3 T^3 \frac{\rho^3 V^6}{N^2} \int_{-\beta D}^{\beta D} \int_{-\beta D}^{\beta D} \int_{-\beta D}^{\beta D} d\epsilon_1 d\epsilon_2 d\epsilon_3 f(\epsilon_1 T) f(\epsilon_2 T) f(\epsilon_3 T) \times \\ &\quad \times R_m(T(u + \epsilon_3)) R_0(T(u + \epsilon_3 + \epsilon_2)) R_m(T(u + \epsilon_3 + \epsilon_2 + \epsilon_1)) \times \\ &\quad \times R_0(T(u + \epsilon_2 + \epsilon_1)) R_m(T(u + \epsilon_1)) R_0(Tu) \quad . \end{aligned}$$

Abbildung G.1: Skelettdiagramm sechster Ordnung für $\Sigma_0 R_0$

Man erkennt an diesem Beispiel: Die umskalierten Fermi-Funktionen hängen nicht mehr von T ab; falls T im Integral als Argument von R_f vorkommt, ist es implizite Variable. Die explizite T -Abhängigkeit steckt bei einem Skelettdiagramm n -ter Ordnung nun im Vorfaktor $T^{n/2}$ und in den Integrationsgrenzen $\pm\beta D$. Letztere kann wegen der Identität

$$T^2 \frac{\partial}{\partial T} g(\beta D) = -T \cdot D \frac{\partial}{\partial D} g(\beta D)$$

in eine D -Abhängigkeit umgewandelt werden, erstere ergibt

$$T^2 \frac{\partial}{\partial T} T^{\frac{n}{2}} = \frac{n}{2} T^{\frac{n}{2}} \quad .$$

Es folgt, nachdem wieder zur Integrationsvariablen z übergegangen wird,

$$\begin{aligned} T^2 \frac{\partial}{\partial T} Z &= -\frac{1}{2} S p_f \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} \Sigma_f(z) R_f(z) - T \cdot D \frac{\partial}{\partial D} Z \\ &+ S p_f \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} z \cdot R_f(z) \quad . \end{aligned}$$

Wegen

$$z = H_f + \Sigma_f(z) + R_f^{-1}(z)$$

folgt

$$\begin{aligned} T^2 \frac{\partial}{\partial T} Z &= \frac{1}{2} S p_f \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} \Sigma_f(z) R_f(z) \\ &- T D \frac{\partial}{\partial D} Z + S p_f H_f \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} R_f(z) \quad . \end{aligned}$$

Mit der Identität

$$T^2 \frac{\partial}{\partial T} Z = Z(F - \frac{\partial}{\partial T} F) \tag{G.3}$$

folgt

$$\begin{aligned} Z(F - \frac{\partial}{\partial T}F) &= \frac{1}{2}Sp_f \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} \Sigma_f(z) R_f(z) \\ &+ ZD \frac{\partial}{\partial D}F + Sp_f H_f \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} R_f(z) \quad . \quad (\text{G.4}) \end{aligned}$$

Faßt man die Gleichungen (G.1), (G.2) und (G.4) zusammen, so folgt das Skalierungsgesetz (6.1).

Die Skalierungsgleichungen für F_Ψ (siehe Abschnitt 4.2) folgen analog. Die T -Abhängigkeit wurde in Gleichung (G.4) durch die Integrationsgrenzen $\pm D$ ausgedrückt. Hier kommt die Integrationsgrenze ω hinzu, weil an die Hilfsfelder Ψ gekoppelt wird. Die restlichen Terme bleiben unverändert. Damit erfüllt F_Ψ die Skalierungsgleichung

$$F_\Psi = \left(T \frac{\partial}{\partial T} + \rho V^2 \frac{\partial}{\partial \rho V^2} + \epsilon_f \frac{\partial}{\partial \epsilon_f} + \omega \frac{\partial}{\partial \omega} + D \frac{\partial}{\partial D} \right) F_\Psi \quad . \quad (\text{G.5})$$

Wegen (4.13) ergibt sich durch Differenzieren nach λ_m^2 für $\lambda_1 = \dots = \lambda_N = 0$ und nach ω wegen

$$\left(T \frac{\partial}{\partial T} + \rho V^2 \frac{\partial}{\partial \rho V^2} + \epsilon_f \frac{\partial}{\partial \epsilon_f} + \omega \frac{\partial}{\partial \omega} + D \frac{\partial}{\partial D} \right) f(\omega) = 0$$

das Skalierungsgesetz (6.6).

Wir haben an keiner Stelle der Herleitung von der Diagrammstruktur Gebrauch gemacht, *außer* daß Skelettdiagramm-Familien mitgenommen werden. Denn genau dann gilt das Variationsprinzip.

Anhang H

Beweis der $1/D$ -Klassifikation

In Abschnitt 6.2 haben wir anschaulich gemacht, warum gerade die NCA die relevanten Skelettdiagramme liefert. Hier zeigen wir dies mit Hilfe der Spektralzerlegung der ionischen Propagatoren.

Jedes Skelettdiagramm hängt von D explizit nur über die Integrationsgrenzen $\pm D$ der Integration über die Leitungselektron-Linien ab. Sei für $\alpha = 0, \dots, N$ ein solches Skelettdiagramm $\Sigma_\alpha^{(2n)} R_\alpha$ $2n$ -ter Ordnung mit p geschlossenen Fermion-Linien und n ionischen Propagatoren R_i gegeben:

$$\oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z \Sigma_\alpha^{(2n)}}(z) R_\alpha(z) \quad (\text{H.1})$$

$$= \frac{\rho^n V^{2n}}{N^{n-p}} \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} \prod_{j=1}^n \int_{-D}^D f(\epsilon_j) d\epsilon_j \prod_{i=1}^n R_i(z + \sum_j^{(i)} \epsilon_j) \quad .$$

Dabei bezeichnet $\int_{-D}^D f(\epsilon_j) d\epsilon_j$ die Integration über die j -te Leitungselektron-Linie. $\sum_j^{(i)}$ im Argument von R_i deutet an, daß die Summe über den Wert j läuft, wenn sich der i -te Propagator unter der j -ten Leitungselektron-Linie befindet (siehe zum Beispiel Abbildung G.1). Der i -te Propagator R_i im Skelettdiagramm hat die Spektralzerlegung

$$R_i(z + \sum_j^{(i)} \epsilon_j) = \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \frac{\rho_i(\lambda_i)}{z + \sum_j^{(i)} \epsilon_j - \lambda_i} \quad .$$

Also gibt das Linienintegral Beiträge von den reellen Polen

$$z = \omega_k = \lambda_k - \sum_j^{(k)} \epsilon_j \quad .$$

Für reelle ω gilt die Relation

$$\operatorname{Re} R_{0,m}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_{0,m}(\lambda)}{\omega - \lambda} d\lambda \quad ,$$

wobei der Hauptwert des Integrals zu nehmen ist. Daher gibt der k -te Pol des Linienintegrals den Beitrag

$$\prod_{j=1-D}^n \int^D f(\epsilon_j) d\epsilon_j \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-\beta(\omega - \sum_j^{(k)} \epsilon_j)} \rho_k(\omega) \prod_{i \neq k}^n \operatorname{Re} R_i(\omega - \sum_j^{(k)} \epsilon_j + \sum_j^{(i)} \epsilon_j) \quad .$$

Wir gehen wegen $f(\epsilon_j) e^{\beta \epsilon_j} = f(-\epsilon_j)$ bei den in $\Sigma^{(k)}$, aber nicht in $\Sigma^{(i)}$ vorkommenden ϵ_j zu $-\epsilon_j$ über und erhalten

$$\prod_{j=1-D}^n \int^D f(\epsilon_j) d\epsilon_j \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-\beta \omega} \rho_k(\omega) \prod_{i \neq k}^n \operatorname{Re} R_i(\omega + \sum_j^{(i)} \epsilon_j) \quad ,$$

wobei jetzt $\Sigma_j^{(i)}$ über den Wert j läuft, wenn sich im Skelettdiagramm mit entsprechend zyklisch vertauschten Vertices der Propagator R_i unter der j -ten Leitungselektron-Linie befindet. In diesem Diagramm steht R_k ganz außen.

An dieser Stelle geht ein, daß wir ganze *Familien* von Skelettdiagrammen mitnehmen: Wir haben soeben gezeigt, daß es zu jedem Skelettdiagramm einer Familie ein anderes aus dieser Familie gibt, so daß der Beitrag zum Linienintegral sich als

$$\int d\omega e^{-\beta \omega} \left[\rho_0(\omega) \operatorname{RE} \Sigma_0^{(2n)}(\omega) + \sum_m \rho_m(\omega) \operatorname{RE} \Sigma_m^{(2n)}(\omega) \right]$$

schreiben läßt. Der Operator RE nimmt von allen in $\Sigma_f^{(2n)}(\omega)$ vorkommenden Propagatoren nur den Realteil mit. Damit können wir für eine komplette Familie von Skelettdiagrammen $\Sigma_f^{(2n,F)} R_f$ das Linienintegral (H.1)

in ein reelles Integral umformen:

$$Sp_f \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} \Sigma_f^{(2n, F)}(z) R_f(z) = 2n \int d\omega e^{-\beta\omega} \left[\rho_0(\omega) \text{RE} \Sigma_0^{(2n)}(\omega) + \sum_m \rho_m(\omega) \text{RE} \Sigma_m^{(2n)}(\omega) \right] .$$

Der Faktor $2n$ kommt daher, daß jedes Skelettdiagramm in einer Familie $2n$ mal vorkommt. Jedes Skelettdiagramm $2n$ -ter Ordnung hängt im erzeugenden Funktional Φ nur explizit über die Integrationsgrenzen $(-D)$ und D seiner n Integrationen von D ab. Das Integral über die i -te Leitungselektron-Linie kann in

$$\text{RE} \Sigma_f^{(2n)}(\omega) = \frac{\rho^n V^{2n}}{N^{n-p}} \left(\int_{-D}^D \right)^{n-1} \Lambda_1(\omega) \int_{-D}^D d\epsilon_i f(\epsilon_i) \Lambda_2(\omega + \epsilon_i) ,$$

zerlegt werden, wobei der Teil Λ_1 des Diagrammes nicht von ϵ_i abhängt, dessen ionische Propagator-Linien sich also links und rechts der i -ten Leitungselektron-Linie befinden, und der Teil Λ_2 unterhalb der i -ten Leitungselektron-Linie steht. $(f)^{n-1}$ deutet die restlichen Integrationen an, jeweils mit den Fermi-Funktionen gewichtet. Wir differenzieren nach D , indem wir je das Integral über die i -te Leitungselektron-Linie ϵ_i an den Grenzen $\pm D$ auswerten:

$$2n \int d\omega e^{-\beta\omega} \rho_{0,m}(\omega) [\Lambda_1(\omega) D f(D) \Lambda_2(\omega + D) + \Lambda_1(\omega) D f(-D) \Lambda_2(\omega - D)] .$$

Das Integral muß noch mit $1/Z$ gewichtet werden, um die D -Ableitung des entsprechenden Beitrags zur freien Energie zu geben. Weil $e^{\beta E_0} Z$ für tiefe Temperaturen gegen eins strebt und wegen der Identität

$$-\beta(e^{\beta E_0} Z) D \frac{\partial}{\partial D} F = D e^{\beta E_0} \frac{\partial}{\partial D} Z$$

gewichten wir $\rho_{0,m}$ mit $e^{\beta(E_0 - \omega)}$. Diese gewichtete Spektraldichte trägt im Integral für niedrige Temperaturen $T \ll D$ nur für $\omega \lesssim E_0$ bei. Da die weiteren Integrationen über Leitungselektron-Linien ϵ_j je mit der Fermi-Funktion $f(\epsilon_j)$ gewichtet sind, trägt für tiefe Temperaturen $T \ll D$ der

Realteil eines Propagators

$$\operatorname{Re} R_f(\omega - D + \sum_j \epsilon_j)$$

in $\Lambda_2(\omega - D)$ nur bei für

$$\omega - D \lesssim E_0 - D < -D \quad .$$

Man kann $\operatorname{Re} R_f$ in diesem Frequenzbereich durch seinen nackten Wert $1/(\omega - H_f - D)$ ersetzen und damit seinen Betrag durch $1/D$ nach oben abschätzen. Wegen des Faktors $f(D)$ trägt der Term $\propto \Lambda_2(\omega + D)$ für $T \ll D$ nicht bei. Wir können folglich

$$\frac{1}{Z} D \frac{\partial}{\partial D} \Sigma_f^{(2n)} R_f$$

für die i -te Integration durch D/D^{m_i} nach oben abschätzen. Wir haben in Abschnitt 6.2 gesehen, daß alle Skelettdiagramme irrelevant sind, die für große D wie $1/D$ oder schneller abfallen. Bei der i -ten Integration wird mindestens über einen Propagator integriert. Also muß für mindestens ein m_i

$$m_i = 1$$

gelten, sonst ist das Diagramm irrelevant.

An *dieser* Stelle geht ein, daß wir *Skelettdiagramme* summieren. Denn ein solches Diagramm ist nur dann ein Skelettdiagramm, wenn es zweiter Ordnung ist, ansonsten wäre, wie in Abbildung D.3 gezeigt, im Diagramm ein Selbstenergie-Einschub vorhanden. Es bleiben nur die beiden $2n = 2, k = 1$ -Skelettdiagramme der Abbildung 4.2 auf Seite 22. Sie geben beide denselben Beitrag, tragen aber im erzeugenden Funktional den Faktor

$$\left(1 - \frac{1}{2}\right) - 1 = -\frac{1}{2} \quad .$$

(H.1) ist also gleich

$$2 \cdot \left(-\frac{1}{2}\right) \cdot \frac{D}{\omega - H_f - D} \quad .$$

Da die Spektraldichte $\hat{\rho}_{0,m}$ für große negative ω schnell abfällt, kann man ersetzen:

$$\lim_{D \rightarrow \infty} \frac{D}{\omega - H_f - D} = -1 \quad .$$

Wir haben damit gezeigt: Die freie Energie der NCA-Näherung erfüllt die exakten Skalierungsgleichungen des Anderson-Modells. Jede Vertexkorrektur ist $\propto 1/D$, da über mehr als einen Propagator integriert wird. Wir erhalten die Skalierungsgleichung (6.2).

Anhang I

Skalierungsgleichungen im Magnetfeld

Die Herleitung der Skalierungsgleichungen kann man für ein angelegtes Magnetfeld praktisch unverändert aus den Anhängen G und H übernehmen; man hat statt $NR_m(z)$ nun $\sum_m R_m(z)$ zu schreiben. Vor allem ändert sich die D -Skalierung von F nicht. Allgemein ist der Einfluß eines Magnetfeldes auf das Leitungsband ein $1/D$ -Effekt, da das Leitungsband auf der Energieskala D auf das Magnetfeld reagiert. Für die ϵ_f -Skalierung jedoch muß die Änderung von H_f berücksichtigt werden. Es ist

$$H_f = \sum_m (\epsilon_f + g\mu_B m H) |m\rangle \langle m|$$

mit $\sum_m m = 0$ wegen der Rotationsinvarianz, also

$$\left(\epsilon_f \frac{\partial}{\partial \epsilon_f} + h \frac{\partial}{\partial h} \right) H_f = H_f \quad .$$

Daher ergibt sich die verallgemeinerte erste Skalierungsgleichung

$$F = T \frac{\partial}{\partial T} F + \rho V^2 \frac{\partial}{\partial \rho V^2} F + \epsilon_f \frac{\partial}{\partial \epsilon_f} F + g\mu_B H \frac{\partial}{\partial g\mu_B H} F + D \frac{\partial}{\partial D} F \quad . \quad (\text{I.1})$$

Dies ist zusammen mit der Haldane-Skalierung äquivalent zum Skalierungsgesetz (5.8), wenn man die freie Energie noch nach dem Magnetfeld H differenziert.

Anhang J

Was ist die Grundzustandsenergie der NCA?

Die Grundzustandsenergie der NCA ergibt sich als

$$E_0^{\text{NCA}} = \lim_{T \rightarrow 0} F^{\text{NCA}} \quad .$$

Allerdings ist es bisher nicht gelungen, die NCA-Integralgleichungen (7.1) für tiefe Temperaturen zu lösen. Stattdessen werden die NCA-Gleichungen für $T=0$ gelöst. Es konnte bisher nicht bewiesen werden ([14], Seite 889), daß die niedrigsten (reellen) Nullstellen der inversen Propagatoren, $Y_{0,m}$ die NCA-Grundzustandsenergie ergeben. Wir zeigen dies mit Hilfe der in Anhang B definierten gewichteten Spektraldichten $\hat{\rho}_{0,m}$ (für die NCA) so: Wegen

$$\lim_{T \rightarrow 0} F^{\text{NCA}} = E_0^{\text{NCA}}$$

erfüllt E_0^{NCA} die Gleichung

$$\lim_{T \rightarrow 0} e^{\beta E_0^{\text{NCA}}} Z^{\text{NCA}} = \lim_{T \rightarrow 0} e^{\beta E_0^{\text{NCA}}} \int e^{-\beta \omega} \left[\rho_0(\omega) + \sum_m \rho_m(\omega) \right] d\omega = 1 \quad .$$

Also existieren für $T=0$ die positiven Spektraldichten

$$\hat{\rho}_{0,m}(\omega) = e^{\beta(E_0^{\text{NCA}} - \omega)} \rho_{0,m}(\omega) \quad .$$

Mithin verschwinden für $T \rightarrow 0$ und $\omega < E_0^{\text{NCA}}$ die Spektraldichten $\rho_{0,m}$. Folglich sind die $Y_{0,m}$ unterhalb E_0^{NCA} reell. Außerdem verschwinden die $\hat{\rho}_{0,m}$ für $\omega > E_0$, weil die $\rho_{0,m}$ endlich bleiben. Aber aus den NCA-Differentialgleichungen [14] folgt, daß es genau ein ω_0 gibt, für das gilt:

1. Die $Y_{0,m}$ haben in ω_0 ihre einzige Nullstelle, und werden oberhalb der Nullstelle komplex, wenn sie unterhalb der Nullstelle reell sind. Da wir gezeigt haben, daß die $Y_{0,m}$ unterhalb E_0 reell sind, sind sie es auch unterhalb von ω_0 .
2. Die $\rho_{0,m}$ verschwinden unterhalb von ω_0 , also ist $\omega_0 \leq E_0$.
3. Die $\hat{\rho}_{0,m}$ verschwinden oberhalb von ω_0 , also ist $\omega_0 \geq E_0$.

Daher ist ω_0 , die niedrigste gemeinsame Nullstelle von $Y_{0,m}$ für $T = 0$, die Grundzustandsenergie E_0 der NCA.

Anhang K

Abhängigkeit des erzeugenden Funktionals von J , T und D

K.1 Abhängigkeit von der Stärke J der Wechselwirkung

Wie in Anhang G.1 folgt

$$\begin{aligned} \rho J \frac{\partial}{\partial \rho J} Z &= -\frac{\beta}{2} \sum_m \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} \Sigma_m(z) R_m(z) \\ &\quad - \frac{\beta}{2} \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} \Pi(z) R_0(z) \quad . \end{aligned} \quad (\text{K.1})$$

Wegen der zyklischen Vertauschbarkeit der Elektron-Linien folgt daraus

$$\begin{aligned} \rho J \frac{\partial}{\partial \rho J} Z &= -\beta \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} [\Pi(z) - 1 + 1] R_0(z) \\ &= -\beta \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} R_0(z) \quad , \end{aligned}$$

also

$$Z \cdot \rho J \frac{\partial}{\partial \rho J} F = \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} R_0(z) \quad . \quad (\text{K.2})$$

K.2 Abhängigkeit von der Temperatur T

Wie in Anhang G.3 wird auf die Variable $z = T \cdot u$ transformiert. Es folgt

$$\begin{aligned} T^2 \frac{\partial}{\partial T} Z &= - \sum_m \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} \Sigma_m(z) R_m(z) - T \cdot D \frac{\partial}{\partial D} Z \\ &+ \sum_m \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} z \cdot R_m(z) \\ &= -T \cdot D \frac{\partial}{\partial D} Z \quad . \end{aligned}$$

Also folgt mit der Identität (G.3) das Skalierungsgesetz

$$F = T \frac{\partial}{\partial T} F + D \frac{\partial}{\partial D} F \quad . \quad (\text{K.3})$$

K.3 Abhängigkeit von der Bandbreite D

Betrachten wir die Skelettdiagramme zweiter Ordnung, also die NCA. Bei der Ableitung nach D sind die Propagatoren an der unteren Bandkante auszuwerten. Aus den NCA-Gleichungen (9.5) folgt für die Selbstenergie Σ_m folgendes asymptotische Verhalten:

$$\Sigma_m(\omega - D) \approx -\rho J D / N \quad \text{für} \quad |\omega| \ll D \quad . \quad (\text{K.4})$$

Bei der Herleitung der NCA für das Coqblin-Schrieffer-Modell wurde die Schrieffer-Wolff-Transformation nachvollzogen. Man muß zu dem so aus dem Anderson-Modell gewonnenen Modell (9.2) die Konstante $2\rho J D / N$ addieren, um zum Coqblin-Schrieffer-Modell (2.4) zu gelangen, also in jedem Propagator z durch $z - 2\rho J D / N$ ersetzen. Zusammen mit (K.4) ergibt sich für die Propagatoren R_{0m} in (9.5) in erster Ordnung in J das folgende asymptotische Verhalten:

$$\begin{aligned} R_m(\omega - D) &= \frac{1}{1 + \frac{\rho J}{N}} \cdot \frac{-1}{D} \quad \text{für} \quad |\omega| \ll D \\ R_0(\omega - D) &= 1 \quad \text{für} \quad |\omega| \ll D \quad . \end{aligned} \quad (\text{K.5})$$

Höhere Ordnungen in J brauchen wir für den universellen Bereich $J \ll D$ nicht zu betrachten, wie wir sofort sehen werden.

Wegen (K.5) folgt wie in Abschnitt 6.2.1 mit Gleichung (K.2)

$$\begin{aligned} D \frac{\partial}{\partial D} Z &= \beta(-J) \oint \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} \left(\frac{D}{D(1 + \rho J/N)} R_0(z) - \frac{D}{1} \cdot R_m(z) \right) \\ &= \frac{J^2}{1 + \frac{\rho J}{N}} \frac{\partial}{\partial J} Z + \beta \frac{\rho J}{N} D Z \quad . \end{aligned}$$

Also folgt für die freie Energie der NCA das Skalierungsgesetz

$$D \frac{\partial}{\partial D} F^{\text{NCA}} = \frac{(\rho J)^2}{1 + \frac{\rho J}{N}} \frac{\partial}{\partial \rho J} F^{\text{NCA}} - \frac{\rho J}{N} D \quad . \quad (\text{K.6})$$

Damit skaliert F^{NCA} wie in Gleichung (9.6). Man rechnet leicht nach, daß sich dieses Gesetz im universellen Bereich $J \ll D$ nicht ändert, wenn man das asymptotische Verhalten (K.5) in höheren Ordnungen in J durch Terme wie

$$\frac{1}{1 + \frac{\rho J}{N}} \longrightarrow \frac{1}{1 + \frac{\rho J}{N} + \alpha J^2}$$

berücksichtigt.

Literatur

- [1] KONDO, J.: *Solid State Physics*, Band 23, Seiten 183–281. Academic Press, New York, 1969.
- [2] GRÜNER, G. und A. ZAWADOWSKI: *Magnetic impurities in non-magnetic metals*. Rep. Prog. Phys., 37:1497–1583, 1974.
- [3] GRÜNER, G. und A. ZAWADOWSKI: *Prog. Low Temp. Phys.*, Band VIIB, Seiten 591–647. Elsevier, Amsterdam, 1978.
- [4] GREWE, N. und F. STEGLICH: *Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths*, Band 14, Kapitel 97. Elsevier, Amsterdam, 1991.
- [5] OTT, H.R.: *Prog. Low Temp. Phys.*, Band XI, Seiten 215–289. Elsevier, Amsterdam, 1987.
- [6] RADO, G.T. und H. SUHL (Herausgeber): *Magnetism*, Band V. Academic Press, New York, London, 1973.
- [7] FULDE, P.: *Electron Correlations in Molecules and Solids*. Springer Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1995.
- [8] WILSON, K.G.: *The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem*. Rev. Mod. Phys., 47(4):773–840, 1975.
- [9] HEWSON, A.C.: *The Kondo Problem to Heavy Fermions*. Cambridge University press, Cambridge, 1993.
- [10] WIEGMANN, P.B. und A.M. TSVELICK: *Exact results in the theory of magnetic alloys*. Adv. Phys., 32(4):453–713, 1983.

- [11] ANDERSON, P.W.: *Infrared Catastrophe in Fermi Gases with local Scattering Potentials*. Phys. Rev. Lett., 18(24):1049–1051, 1967.
- [12] ANDERSON, P.W.: *Localized Magnetic States in Metals*. Phys. Rev., 124(1):41–53, 1961.
- [13] KEITER, H. und J.C. KIMBALL: *Perturbation Technique for the Anderson Hamiltonian*. Phys. Rev. Lett., 25(10):672–675, 1970.
- [14] BICKERS, N.E.: *Review of techniques in the large- N expansion for dilute magnetic alloys*. Rev. Mod. Phys., 59(4):845–939, 1987.
- [15] LUTTINGER, J.M. und J.C. WARD: *Ground-State Energy of a Many-Fermion System. II*. Phys. Rev., 118(5):1417–1427, 1960.
- [16] BAYM, G.: *Self-Consistent Approximations in Many-Body Systems*. Phys. Rev., 127(4):1391–1401, 1962.
- [17] KURAMOTO, Y.: *Self-Consistent Perturbation Theory for Dynamics of Valence Fluctuations I*. Z. Phys. B., 53:37–52, 1983.
- [18] COLEMAN, P.: *New approach to the mixed-valence problem*. Phys. Rev. B., 29(6):3035–3044, 1984.
- [19] SCHRIEFFER, J.R. und P.A. WOLFF: *Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians*. Phys. Rev., 149(2):491–492, 1966.
- [20] ANDERSON, P.W.: *A poor man's derivation of scaling laws for the Kondo problem*. J. Phys. C, 3(12):2436–2441, 1970.
- [21] BOGOLIUBOV, N.N. und D.V. SHIRKOV: *Quantenfelder*. Physik-Verlag, Weinheim, 1984.
- [22] FOWLER, M. und A. ZAWADOWSKI: *Scaling and the renormalization group in the Kondo effect*. Solid State Commun., 9:471–476, 1971.
- [23] IZYUMOV, Y.A. und Y.N. SKRYABIN: *Statistical Mechanics of Magnetically Ordered Systems*, Kapitel 2. Consultants Bureau, New York, 1988.

- [24] ANDREI, N., K. FURUYA und J.H. LOWENSTEIN: *Solution of the Kondo problem*. Rev. Mod. Phys., 55(2):331–402, 1983.
- [25] KURODA, Y. und B. JIN: *Critical Study of the Anderson Impurity and the Anderson Lattice*. J. Phys. Soc. Jap., 57(5):1687–1698, 1988.
- [26] DONIACH, S. und E.H. SONDHEIMER: *Green's functions for Solid State Physicists*. Addison-Wesley, 1974.
- [27] LANDAU, L.D. und E.M. LIFSHITZ: *Lehrbuch der theoretischen Physik*, Band IV. Akademie-Verlag Berlin, 1986.
- [28] GREWE, N.: *Spectral Properties of the Anderson Model*. Z. Phys. B., 53:271–282, 1983.
- [29] BICKERS, N.E., D.L. COX und J.W. WILKINS: *Self-Consistent large- N expansion for normal-state properties of dilute magnetic alloys*. Phys. Rev. B, 36(4):2036–2079, 1987.
- [30] ZHANG, F.C. und T.K. LEE: *Spectral density and magnetic susceptibility for the asymmetric degenerate Anderson model*. Phys. Rev. B, 30(3):1556–1558, 1984.
- [31] MÜLLER-HARTMANN, E.: *Self-Consistent Perturbation Theory of the Anderson-Model: Ground State Properties*. Z. Phys. B., 57:281–287, 1984.
- [32] SASO, T.: *Susceptibility of mixed valent Tm-Impurities*. J.Magn.Magn.Mat., 76&77:176–178, 1988.
- [33] GREWE, N. und F.B. ANDERS: *Perturbational Approach to the Anderson Model: New Results from a Post-NCA Treatment*. Europhys. Lett., 26(7):551–556, 1994.
- [34] ANDERS, F.B.: *An enhanced perturbational study on spectral properties of the Anderson model*. J. Phys.: Condens. Matter, 7:2801–2818, 1995.

- [35] RICKAYZEN, G.: *Green's Functions and Condensed Matter*. Academic Press, 1980.
- [36] GUNNARSSON, O. und K. SCHÖNHAMMER: *Electron spectroscopies for Ce compounds in the impurity model*. Phys. Rev. B, 28(8):4315–4341, 1983.
- [37] COSTI, T.A., J. KROHA und P. WÖLFLE: *Spectral properties of the Anderson impurity model: Comparison of numerical-renormalization-group and noncrossing-approximation results*. Phys. Rev., 53(4):1850–1865, 1996.
- [38] HALDANE, F.D.M.: *Scaling Theory of the Asymmetric Anderson Model*. Phys. Rev. Lett., 40(6):416–419, 1978.
- [39] KURAMOTO, Y.: *Self-Consistent Perturbation Theory for Dynamics of Valence Fluctuations III*. Z. Phys. B., 57:95–105, 1984.
- [40] INAGAKI, S.: *Ground state of the Asymmetric Anderson Model*. Prog. Theor. Phys., 62(6):1441–1457, 1979.
- [41] KURAMOTO, Y. und H. KOJIMA: *Dynamical Response of Intermediate-Valence and Kondo Systems*. J. Magn. Magn. Mat., 47&48:329–334, 1985.
- [42] ANDREI, N. und J.H. LOWENSTEIN: *Scales and Scaling in the Kondo Model*. Phys. Rev. Lett., 46(5):356–360, 1981.
- [43] KURAMOTO, Y.: *Self-Consistent Perturbation Theory for Dynamics of Valence Fluctuations IV*. Z. Phys. B., 65:29–37, 1986.
- [44] HOLTZBERG, F., T. PENNY und R. TOURNIER: *Valence instabilities of Tm in its compounds and solid solutions*. J. Phys. (Paris), Colloq., 40(5):C5–314, 1979.
- [45] SCHLOTTMANN, P.: *Multichannel Kondo problem and some applications*. Adv. Phys., 42(6):641–682, 1993.

- [46] READ, N., K. DHARAMVIR, J.W. RASUL und D.M. NEWNS: *Theory of a Tm impurity in metals in a jj-coupling model*. J. Phys. C, 19:1597–1616, 1986.
- [47] NEWNS, D.M. und N. READ: *Mean-field theory of intermediate valence/heavy fermion systems*. Adv. Phys., 36(6):799–849, 1987.
- [48] LANDAU, L.D. und E.M. LIFSCHITZ: *Lehrbuch der theoretischen Physik*, Band III. Akademie-Verlag Berlin, 1988.
- [49] YAFET, Y., C.M. VARMA und B. JONES: *Ground state of an ion fluctuating between two magnetic valence states*. Phys. Rev. B, 32(1):360–370, 1985.
- [50] LUSTFELD, H.: *Rare Earth Impurities near a Valence Instability*. Physica B, 113:69–93, 1982.
- [51] COX, D.L. und A.E. RUCKENSTEIN: *Spin-Flavor Separation and Non-Fermi-Liquid Behavior in the Multichannel Kondo Problem: A Large-N Approach*. Phys. Rev. Lett., 71(10):1613–1616, 1993.
- [52] ANDREI, N. und C. DESTRI: *Solution of the Multichannel Kondo Problem*. Phys. Rev. Lett., 52(5):364–367, 1984.
- [53] WIEGMANN, P.B. und A.M. TSVELICK: *Solution of the n-channel Kondo Problem (Scaling and Integrability)*. Z. Phys. B, 54:201–206, 1984.
- [54] NOZIÈRES, P. und A. BLANDIN: *Kondo Effect in real metals*. J. Physique, 41(3):193–211, 1980.
- [55] KIM, TAE-SUK und D.L. COX: *Theory of One-Channel versus Multichannel Kondo Effects for Ce³⁺ Impurities*. Phys. Rev. Lett., 75(8):1622–1625, 1995.
- [56] PANG, H.B. und D.L. COX: *Stability of the fixed point of the two-channel Kondo Hamiltonian*. Phys. Rev. B, 44(17):9454–9457, 1991.

- [57] METZNER, W. und D. VOLLHARDT: *Correlated Lattice Fermions in $d = \infty$ Dimensions*. Phys. Rev. Lett., 62(3):324–327, 1989.
- [58] MÜLLER-HARTMANN, E.: *Correlated fermions on a lattice in high dimensions*. Z. Phys. B., 74:507–512, 1989.
- [59] MÜLLER-HARTMANN, E.: *The Hubbard model at high dimensions: some exact results and weak coupling theory*. Z. Phys. B., 76:211–217, 1989.
- [60] OHKAWA, F.J.: *Electron Correlation in the Hubbard Model in $d = \infty$ Dimension*. J. Phys. Soc. Jap., 60(10):3218–3221, 1991.
- [61] GEORGES, A. und G. KOTLIAR: *Hubbard model in infinite dimensions*. Phys. Rev. B., 45(12):6479–6483, 1992.
- [62] NOZIÈRES, P.: *A “Fermi-Liquid” Description of the Kondo Problem at Low Temperatures*. J. Low Temp. Phys., 17(1/2):31–42, 1974.
- [63] RASUL, J.W. und A.C. HEWSON: *Comparison of the $1/N$ expansion and Bethe ansatz results for the degenerate Anderson model*. J. Phys. C, 17:3337–3353, 1984.
- [64] FETTER, A.L. und J.D. WALECKA: *Quantum Theory of Many Particle Systems*. McGraw-Hill, 1971.
- [65] KEITER, H. und G. MORANDI: *Thermodynamic Perturbation Theory for Systems with strong local Correlations*. Phys. Rep., 109(5):227–308, 1984.

Abbildungen

4.1	Skelettdiagramm zweiter Ordnung für das Anderson-Modell	20
4.2	zyklische Vertauschbarkeit der Vertices in Skelettdiagrammen	22
5.1	spezifische Wärme, mit der NCA genähert	31
5.2	statische magnetische Suszeptibilität, mit der NCA genähert	33
5.3	Kondo-Resonanz, mit der NCA genähert	34
5.4	elektrischer Widerstand, mit der NCA genähert	35
6.1	NCA-Diagramme, nach D logarithmisch abgeleitet	39
6.2	Skelettdiagramme zweiter Ordnung für den f -Propagator .	41
7.1	W -Funktion	46
9.1	Übergang von Pseudopropagatoren zu Vertices	64
10.1	Skelettdiagramm zweiter Ordnung für eine Tm-Störstelle .	72
10.2	relevante Skelettdiagramme für eine Tm-Störstelle	72
D.1	Vertices für das Anderson-Modell	102
D.2	Diagramm vierter Ordnung für $R_m(z)$	103
D.3	Entfernung eines Selbstenergie-Einschubes	104
D.4	Diagramm vierter Ordnung für den f -Propagator	105
E.1	Abwälzung der λ -Ableitung auf den äußeren Propagator .	107
G.1	Skelettdiagramm sechster Ordnung für $\Sigma_0 R_0$	115

Danksagung

Es war für mich ein Glücksfall, bei Professor Dr. Fulde die Doktorarbeit anfertigen zu dürfen. In der offenen Atmosphäre in seiner Arbeitsgruppe in Stuttgart und später in Dresden habe ich weit mehr gelernt, als mich nur in ein spezielles Gebiet einzuarbeiten.

Nie wurde ich gedrängt, ein bestimmtes Thema zu wählen, im Gegenteil: Professor Dr. Fulde hat mich stets ermuntert, neue Ideen auszuprobieren. Er schlug mir unter anderem vor, mich mit der selbstkonsistenten Störungstheorie für das Anderson-Modell zu beschäftigen. Dieser Vorschlag sollte Folgen haben.

Denn Professor Dr. Fulde ermöglichte mir nicht zuletzt im Februar 1995, die Winterschule für Turbulenz, Musterbildung und Biologie am Weizmann-Institut in Rehovot zu besuchen. Während einer Vorlesung von Prof. Procaccia darüber, wie man mit einer Diagrammtechnik die Skalierungsgesetze der Turbulenz behandeln kann, kam mir die Idee, mit Skellettogrammen Störstellen in Metallen zu untersuchen.

Aber von einer Idee zu einer Theorie ist es ein Stück. Hier möchte ich vor allem Frau Dr. Zwicknagl danken. Von ihrem reichen Erfahrungsschatz habe ich viel gelernt, vor allem bei der Darstellung und Einordnung meiner Ergebnisse in den Gesamtzusammenhang. Sie schlug mir vor, meine Methode einmal am f^1 - f^2 -Problem auszuprobieren.

Dr. Tom Schork und Thomas Klemm haben sich die Zeit genommen, mit mir lange über die verschiedenen diagrammatischen Methoden zu diskutieren. Nur so konnte ich herausfinden, wo meine Methode ihre Grenzen findet.

Ich danke Professor Dr. Vilen Zevin für sein Interesse und seinen kritischen, humorvollen Anregungen.

Ich möchte auch Herrn Professor Dr. Wagner herzlich dafür danken, daß er das Korreferat übernommen hat.

Zum Schluß möchte ich hier meine Freude ausdrücken, daß es mir möglich war, einige Zeit in der schönen Stadt Dresden zu leben und zu arbeiten.

Lebenslauf

28.04.1965	Geburt in Kleve am Niederrhein
1971-1975	Besuch der Grundschule in Kellen bei Kleve
1975-1984	Besuch des Konrad-Adenauer-Gymnasiums in Kellen bei Kleve
Juni 1984	Abitur
1984-1986	Wehrdienst
Wintersemester 1986 - Sommersemester 1988	Studium der Physik und der Mathematik an der Rheinisch-Westfälisch-Technischen Hochschule Aachen.
Juli 1988	Vordiplome in Physik und Mathematik
Wintersemester 1988 - Sommersemester 1990	Physikstudium an der Eidgenössischen Technischen Hochschule in Zürich
Wintersemester 1990/91	Diplomarbeit über das Thema: Vortices in suprafluidem Helium-3.
Frühjahr 1991	Diplomprüfung an der ETH Zürich
Oktober 1991 bis Februar 1994	Doktorarbeit bei Prof. Dr. Fulde am Max-Planck-Institut für Festkörperforschung in Stuttgart und
seit Februar 1994	bei Prof. Dr. Fulde am Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme in Dresden

Hiermit erkläre ich an Eides Statt, daß ich diese Dissertation selbständig und mit den angegebenen Hilfsmitteln angefertigt habe.

Bisher habe ich noch keinen Promotionsversuch unternommen.

Stuttgart, im Mai 1996