

Vielteilchentheorien in Modellräumen mit diskreter Darstellung

DISSERTATION

zur Erlangung des Grades eines Doktors
der Naturwissenschaften

der Fakultät für Physik
der Eberhard–Karls–Universität zu Tübingen

vorgelegt von

Clemens H. Harzer
aus München

2000

Tag der mündlichen Prüfung: 15.02.2001

Dekan: Professor Dr. Gerhard Wagner

1. Berichterstatter: Professor Dr. Herbert Müther

2. Berichterstatter: Professor Dr. Alejandro Muramatsu
Institut für Theoretische Physik III
Universität Stuttgart

”All right! . . . The Answer to the Great Question of Life, the Universe and Everything is **42**”, said Deep Thought with infinite majesty and calm.

D. Adams

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Vielteilchenmethoden	7
2.1	Greensche Funktionen	7
2.1.1	Der Ein-Teilchen-Propagator	8
2.1.2	Observablen und Greensfunktion	10
2.1.3	Die Dyson-Gleichung	12
2.1.4	Die Hartree-Fock Näherung	15
2.1.5	Selbstkonsistenz und Terme höherer Ordnung	17
2.2	Adaptive Basisgenerierung	25
2.2.1	Das $\exp[S]$ -Verfahren	25
2.2.2	LANCZOS-Diagonalisierung	31
3	Modelle und Modellräume	34
3.1	Schalenmodell	34
3.1.1	Motivation	34
3.1.2	Sauerstoff 16	36
3.2	Paarwechselwirkung	36
3.3	Das Hubbard-Modell	38
4	Technische Aspekte	42
4.1	G -Matrix	42

4.2	Besetzungszahldarstellung	44
4.3	Programmiertechniken	45
4.3.1	Speicheroptimierung	46
4.3.2	Parallelisierung	50
5	Ergebnisse	55
5.1	Verletzung der Ladungssymmetrie in Sauerstoff	55
5.1.1	Nolen–Schiffer Anomalie und starke Wechselwirkung	55
5.1.2	Berechnung der Coulomb–Verschiebung	56
5.1.3	Bindungsenergie und Ein–Teilchen–Eigenschaften	57
5.1.4	Korrelationen und Coulomb–Verschiebung	59
5.2	Paarwechselwirkung	63
5.2.1	Die BCS–Theorie	63
5.2.2	BCS und exakte Lösung im Vergleich	65
5.2.3	Lösung mit Lanczos	66
5.2.4	Paarkraft und $\exp[S]$ –Verfahren	69
5.3	Hubbard–Modell	74
5.3.1	Das HF–Verfahren für das Hubbard–Modell	75
5.3.2	Diskussion der HF–Resultate	78
5.3.3	Lösung mit Lanczos	82
5.3.4	Eindimensionales Hubbard–Modell und SCGF–Verfahren	85
5.3.5	Zweidimensionales Hubbard–Modell und SCGF–Verfahren	97
6	Zusammenfassung und Ausblick	106
6.1	Zusammenfassung	106
6.2	Ausblick	108
A	Meson–Austausch–Potentiale	110

B QMC-Formalismus	113
Literaturverzeichnis	116
Abbildungs- und Tabellenverzeichnis	121

Kapitel 1

Einleitung

Schon seit Wissenschaftler versuchen in der Natur vorkommende Phänomene vorherzusagen und physikalisch zu beschreiben, besteht eines der Grundprinzipien der Physik darin, den Sachverhalt auf ein Modell abzubilden, das die wesentlichen Eigenschaften des beobachteten Effekts zu reproduzieren vermag. Das mit Hilfe des Modells im Modellraum erzielte Ergebnis ist fast immer eine Näherung, mit der die Wirklichkeit mehr oder weniger gut beschrieben werden kann.

Streng genommen baut alle Physik auf einem nicht perfekten Modell auf. Durch die Entdeckung weiterer Freiheitsgrade und deren Einbeziehung in das Modell kann man in der Regel eine konsistente Verbesserung der Theorie erreichen. Prominentes Beispiel für eine solche schrittweise Verbesserung der Theorie ist das Termschema des Wasserstoffatoms. Qualitativ kann man es schon mit dem atomphysikalischen Schalenmodell beschreiben. Jedoch erst nach der Entdeckung von Spin–Bahn–Kopplung und Kernspin sowie mit Hilfe der Quantenelektrodynamik konnte es bis zur Hyperfeinstruktur verstanden werden. Ganz ähnlich stellt sich der Sachverhalt auch in der Kernphysik dar. Obwohl das einfache Schalenmodell des Atomkerns weit davon entfernt ist, das Verhalten der Nukleonen im Kernverbund in jeder Hinsicht gut zu beschreiben, gibt es doch eine Reihe kernphysikalischer Phänomene, die mit ihm erklärt werden können.

Da Schalenmodelle also in der Lage sind, einigen Aufschluß über die zugrunde liegende Physik zu geben, sollten sie als ein relevanter Teil der Theorie akzeptiert werden. In der Sichtweise der Schalenmodelle bewegen sich die Nukleonen oder Elektronen voneinander unabhängig in einem mittleren Ein–Teilchen–Potential. In dieser Näherung ist die Grundzustandswellenfunktion eine Slaterdeterminante und alle Ein–Teilchen–Zustände bis zur Fermienergie sind besetzt. In einem Modellraum aus Ein–Teilchen–Zuständen und unter der Annahme sich unabhängig bewegender Teilchen, erhält man ein solches mittleres Ein–Teilchen–Potential aus einer Hartree–Fock–(HF)–Rechnung. Eine HF–Rechnung eignet sich insbesondere in der Atomphysik bei der Beschreibung von Mehrelektronen-

systemen, da die Coulomb–Repulsion zwischen den einzelnen Elektronen gut als mittleres Potential interpretiert werden kann, das die Bindungsenergie aller Elektronen um einen bestimmten Betrag vermindert. Auch in der Festkörperphysik finden mittlere Ein–Teilchen–Potentiale Anwendung. So kann der Ising–Ferromagnet näherungsweise mit einem mean–field–Verfahren beschrieben werden. Auch die erfolgreiche BCS–Theorie zur Beschreibung des Grundzustands eines Supraleiters kann unter bestimmten Voraussetzungen aus einem mittleren Ein–Teilchen–Potential, also einem HF–Ansatz hergeleitet werden.

Im Gegensatz zu den Beispielen aus Atom– und Festkörperphysik erschwert die kompliziertere Struktur der Nukleon–Nukleon–(NN)–Wechselwirkung in der Kernphysik die Berechnung sinnvoller HF–Ein–Teilchen–Potentiale. Da realistische NN–Wechselwirkungen bei kleinen Nukleonabständen (~ 0.4 fm) stark repulsiv werden, führt hier eine HF–Rechnung zu ungebundenen Kernen. Eine so erhaltene Slaterdeterminante für den Grundzustand kann also nicht sinnvoll sein. Zu gebundenen Kernen gelangt man erst, wenn die nackte NN–Wechselwirkung durch eine effektive ersetzt wird. Tatsächlich haben die Nukleonen im Kernverbund aber sehr selten Relativabstände, die zu starker Repulsion führen. Diese kurzreichweitigen Komponenten der Wellenfunktion sind stark unterdrückt, was man auch als Korrelation der Nukleonen bezeichnet. In der Kernphysik sollte man demnach versuchen diese Korrelationseffekte zu beschreiben, was wiederum Aufschluß über deren Ursache, also das Verhalten der Nukleonen im Kernverbund bei kurzen Abständen, gibt.

Eine solche korrelierte Wellenfunktion kann als Superposition aller zum Modellraum gehörender Ein–Teilchen–Orbitale dargestellt werden. Die Restriktion, daß nur Zustände bis zur Fermikante besetzt sind, wird dadurch aufgehoben. Ein–Teilchen–Zustände unterhalb der Fermienergie werden so teilweise entvölkert und Zustände oberhalb der Fermienergie haben keine verschwindende Besetzungswahrscheinlichkeit mehr. Eine solche Konfigurationsmischung ist sinnvoll, da z. B. die d –Beimischung in der Deuteronwellenfunktion experimentell gezeigt werden kann. Diese Abweichung von der vollständigen Besetzung der Schalenmodellzustände unterhalb der Fermikante ist sozusagen ein Maß für die im naiven Schalenmodell vernachlässigten Korrelationen. Experimente mit dem Ziel diese Abweichung der Besetzungszahlen von 1 und 0 zu bestimmen, sind daher von größter Wichtigkeit [Sic91, Gra94, Leu94]. Selbstverständlich ist nicht nur die Observable Besetzungszahl korrelationssensitiv. Auch die Ergebnisse für die Gesamtbindungsenergie und den mittleren Radius sowie die Energie– und Impulsverteilung der Nukleonen im Kern sind experimentell zugängliche Größen, an denen man die Güte der Theorie messen kann.

Wegen der besonderen Struktur der NN–Wechselwirkung kommen Korrelationen in der Kernphysik also eine große Bedeutung zu. Insbesondere ist eine sinnvolle Beschreibung von

endlichen Kernen nur dann möglich, wenn Korrelationen berücksichtigt werden und mit effektiven Wechselwirkungen gearbeitet wird. Aber auch abseits der Kernphysik spielen Korrelationen in Vielteilchenproblemen eine wichtige Rolle. Immer dann, wenn komplizierte Zwei-Teilchen-Wechselwirkungen durch mittlere Ein-Teilchen-Potentiale ersetzt werden, hat man Korrelationen oder Freiheitsgrade des Systems vernachlässigt und somit nur einen Teil der Wechselwirkung diagonalisiert. Allerdings sind die Auswirkungen solcher Näherungen von Fall zu Fall sehr unterschiedlich und in der Kernphysik besonders drastisch. Auch muß nur in der Kernphysik auf effektive Wechselwirkungen zurückgegriffen werden. Selbst wenn bei Problemstellungen wie Ising-Ferromagnet, Paarwechselwirkung von Elektronen, Hubbard-Modell und anderen die mit Mean-Field-Verfahren erzielten Ergebnisse vernünftiger als in der Kernphysik sind, macht es natürlich auch in diesen Fällen Sinn Korrelationen zu berücksichtigen, um zu einer konsistent verbesserten Theorie zu gelangen.

Will man nun in einem Vielteilchensystem Korrelationen berücksichtigen, also über ein mittleres Ein-Teilchen-Potential hinausgehen, gibt es eine Vielzahl möglicher Ansätze. Konfigurationsmischungen, also Überlagerungen von Ein-Teilchen-Wellenfunktionen, lassen sich z. B. durch Variationsrechnungen, Coupled Cluster Methoden (CCM) und Random Phase Approximation (RPA) oder Störungstheorie herbeiführen. Mit Störungstheorie ist hier eine diagrammatische Analyse der Greensfunktion gemeint und es zeigt sich, daß HF und RPA spezielle Terme dieser Störungsreihe sind. Während in der Störungstheorie die einzelnen Diagramme über ihre Ordnung klassifiziert sind und bei CCM systematisch bestimmte Konfigurationen auf einer Startwellenfunktion aufgebaut werden, ist ein Variationsansatz häufig eher intuitiv. So müssen z. B. bei der Generatorkoordinaten-Methode, die ein spezielles Variationsverfahren darstellt, die beizumischenden Konfigurationen im Prinzip geraten werden. Zwar gibt es dabei meistens eine Reihe von Plausibilitätsargumenten, trotzdem entscheidet letztlich das Ergebnis über die Qualität des Ansatzes. Wenn man wie z. B. in der Kernphysik Kopplungskonstanten der Größenordnung Eins hat, ist aber auch die Konvergenz der Störungsreihe für die Ein-Teilchen-Greensfunktion nicht garantiert. Das CCM-Verfahren (auch $exp[S]$ -Verfahren genannt) ist im Grenzfall zwar sicher mit der exakten Lösung des Problems identisch, unterscheidet sich dann aber auch in seiner Komplexität nicht mehr von dieser.

Bei all diesen Verfahren ist es daher wichtig, Vergleiche zu exakt lösbaren Problemen anzustellen um die erzielten Resultate bewerten zu können. Leider sind exakt lösbare physikalische Probleme selten dergestalt, daß sie auch experimentell beobachtbar sind. Andersherum haben Objekte wie ein Atomkern oder ein Kristall natürlich eine sehr große Zahl von Freiheitsgraden und eine exakte Bestimmung der Vielteilchenwellenfunktion ist illusorisch. Deswegen ist man häufig gezwungen, einfachere Modelle für wenige Teilchen zu untersuchen, die nur einen Teil der wirklichen Physik beinhalten, dafür aber sowohl mit Näherungsmethoden als auch exakt beschrieben werden können. Haben die Näherungs-

methoden in den einfacheren Modellen Erfolg, kann man auch kompliziertere Modelle, die näher an der Wirklichkeit sind, mit den Näherungsmethoden untersuchen und dann die so erzielten Ergebnisse eventuell mit Experimenten vergleichen.

Entschließt man sich nun etwa ein physikalisches Modell mit dem Formalismus der Greenschen Funktionen, also der diagrammatischen Analyse der Störungsreihe anzugehen, gibt es aber noch immer eine Fülle von Möglichkeiten, wie dies getan werden kann. Zunächst hat man mit der hierarchischen Struktur der Greenschen Funktionen zu kämpfen. Da die N -Teilchen-Greensfunktion von der $N+1$ -Teilchen-Greensfunktion abhängt, ist man gezwungen diese Kopplung auf eine sinnvolle Art aufzubrechen. Dies gelingt, indem man z. B. die Abhängigkeit zwischen Ein- und Zwei-Teilchen-Greensfunktion in die Selbstenergie steckt. Nun gibt es aber unendlich viele Terme der Störungsreihe, die zur Berechnung der Selbstenergie herangezogen werden können, so daß man sich auf einige Wenige, möglichst wichtige Diagramme beschränken muß. Darüberhinaus müssen Greensfunktion und Selbstenergie selbstkonsistent bestimmt werden, was ebenfalls mit sehr unterschiedlichen Ansätzen in Angriff genommen werden kann.

Die Möglichkeiten den Formalismus der Greenschen Funktionen zu diversifizieren sind praktisch unbegrenzt. Sei es durch Berücksichtigung verschiedener Feynman-Graphen, Verwendung unterschiedliche Rechen- und Selbstkonsistenzverfahren oder, hauptsächlich in der Kernphysik, durch die Untersuchung relativistischer Strukturen der Selbstenergie. All diesen Verfahren ist zudem noch zu eigen, daß die Dimension des Konfigurationsraums mit steigender Teilchenzahl bzw. höheren Ordnungen in der Störungsreihe so stark zunimmt, daß eine sinnvolle Berechnung irgendwann unmöglich wird. Obwohl also eine Berechnung der Ein-Teilchen-Greensfunktion immer mit mehr oder weniger drastischen Näherungen verbunden ist, zeigen über HF hinausgehende Rechnungen aus der Kernphysik, daß eine deutliche Verbesserung der Beschreibung erzielt werden kann. Oft wird dabei nur ein Diagramm zweiter Ordnung berücksichtigt, dafür aber Wert auf eine sorgfältige Behandlung des Selbstkonsistenzproblems gelegt [Nec91, Koe92, Mue95a, Dew97].

Aufgrund des Erfolgs dieser Vorgehensweise wird auch in dieser Arbeit der Formalismus der Greenschen Funktionen auf verschiedene Problemstellungen angewendet. Zum einen wird er für eine realistische Kernstrukturrechnung von ^{16}O mit NN-Wechselwirkungen, die eine explizite Verletzung der Isospinsymmetrie der starken Wechselwirkung zulassen, getestet. Zum anderen wird ein neuer Weg beschritten, indem diese, hauptsächlich in der Kernphysik angewandte Theorie auf das aus der Festkörperphysik stammende Hubbard-Modell übertragen wird. Obwohl die genannten Problemstellungen sehr unterschiedlicher Natur sind, besteht über ihre Darstellung in einem diskreten Modellraum eine gewisse Verwandtschaft, die es erlaubt den Formalismus der Greenschen Funktionen auch an einem Vielelektronensystem zu testen. Von besonderem Interesse ist hierbei, daß das Hubbard-Modell in bestimmten Fällen exakt gelöst werden kann und somit die Ergebnisse aus der

Störungstheorie gut interpretiert werden können.

Die allgemeine Theorie Greenscher Funktionen und das im speziellen angewandte Verfahren wird daher detailliert in Kapitel 2.1 dargelegt, bevor in Kapitel 3 die Gemeinsamkeiten und Unterschiede der kern- und festkörperphysikalischen Modellräume diskutiert werden. Technische Details, die sich aus mathematischen und numerischen Schwierigkeiten bei der Realisierung der Rechnungen ergeben, werden in Kapitel 4 erläutert. Eine Ausführliche Darstellung der Ergebnisse findet sich in Kapitel 5.

Im Gegensatz zum Formalismus Greenscher Funktionen ist die Paarwechselwirkung ein Beispiel für eine aus der Festkörperphysik stammende Theorie, die auch in der Kernphysik mit Erfolg eingesetzt werden kann. So eignet sich die BCS-Theorie gut zur Erklärung der höheren Bindungsenergie eines Kerns mit gerader Nukleonenzahl im Vergleich zu einem Kern der aus einer ungeraden Anzahl von Protonen und Neutronen aufgebaut ist. Bei gerader Nukleonenzahl können alle Nukleonen einen Partner finden und energetisch begünstigte Paare bilden. Der Hamiltonoperator für eine reine Paarkraft kann leicht in einem einfachen Modellraum aufgestellt und exakt diagonalisiert werden, falls man sich auf eine kleinere Zahl von Teilchen beschränkt. Der Modellraum ist hier dem des Hubbard-Modells sehr ähnlich und es zeigt sich, daß die BCS-Theorie eine gute Näherungslösung ist. Bei gleichbleibenden Levelabständen der Ein-Teilchen-Energien findet man jedoch bei großen und sehr kleinen Paarkräften eine zum Teil deutliche Abweichung der BCS-Vorhersagen von den exakten Resultaten. Insbesondere kann bei sehr kleinen Paarkräften der Fall eintreten, daß die aus der BCS-Theorie abgeleitete Gap-Gleichung gar keine Lösung mehr besitzt. Deswegen ist eine nähere Untersuchung der Paarwechselwirkung durchaus von Interesse.

Auch bei den Paarkräften ist ab einer gewissen Teilchenzahl eine exakte Diagonalisierung nicht mehr durchführbar, weswegen auch hier Näherungsmethoden von Bedeutung sind. Zu einer gut konvergierenden Näherungslösung für den Paarhamiltonoperator gelangt man beispielsweise mit einer Lanczos-Diagonalisierung. Aber auch das CCM- oder $\exp[S]$ -Verfahren soll in dieser Arbeit zur Beschreibung der Paarwechselwirkung herangezogen werden. Dieses scheint besonders gut geeignet zu sein, weil bei einer reinen Paarkraft immer nur Teilchenpaare erzeugt und vernichtet werden, so daß die erstmögliche Anregung eine Zwei-Teilchen-Zwei-Loch-(2T2L)-Anregung und die nächstmögliche eine 4T4L-Anregung ist. Die Beimischung dieser Anregungen auf einem Startzustand läßt sich im Modellraum der Paarkräfte relativ einfach durchführen. Im Gegensatz zum Formalismus Greenscher Funktionen ist beim CCM-Verfahren die Methodik klar, so daß nicht zwischen verschiedenen möglichen Vorgehensweisen abgewogen werden muß. Trotzdem kann auch für die Paarwechselwirkung die Ein-Teilchen-Greensfunktion auf die gleiche Weise wie beim Hubbard-Modell berechnet werden.

Die nötige Theorie des CCM-Verfahrens sowie eine kurze Darstellung der Lanczos-Dia-

gonalisierung ist daher in Kapitel 2.2.1 bzw. 2.2.2 zu finden. Erläuterungen über den Modellraum für die Paarkräfte finden sich in Kapitel 3 und ein Vergleich der mit den unterschiedlichen Verfahren erzielten Ergebnisse findet sich im Ergebnisteil (Kapitel 5). Den Abschluß der Arbeit bildet Kapitel 6. Dort sollen die wesentlichen Ideen nochmals zusammengefaßt und die wichtigsten Resultate kompakt diskutiert werden, sowie ein Ausblick auf Weiterführendes gegeben werden.

Kapitel 2

Vielteilchenmethoden

In diesem Kapitel werden die in der vorliegenden Arbeit verwendeten Methoden der Vielteilchenphysik vorgestellt. Diese gliedern sich zum einen in Verfahren, die im Bild Greenscher Funktionen unterschiedliche Näherungslösungen der Dyson-Gleichung liefern, und zum anderen in Methoden, deren Ansatz darin besteht, die gesuchte exakte Wellenfunktion durch ihre wichtigsten Bestandteile zu approximieren.

2.1 Greensche Funktionen

Im folgenden Abschnitt soll der Formalismus der Greenschen Funktionen dargestellt werden. Diese Methode basiert auf der Berechnung des 'mittleren' Verhaltens eines oder mehrerer Teilchen¹ in Anwesenheit der anderen, ohne daß die tatsächliche Vielteilchenwellenfunktion berechnet werden muß. Die Greenschen Funktionen oder Propagatoren beschreiben dieses gemittelte Verhalten. Mit ihnen ist es möglich die Grundzustandsenergie, das Anregungsspektrum und den Grundzustandserwartungswert jedes Ein-Teilchen-Operators zu bestimmen.

Die Berechnung der exakten N -Teilchen-Greensfunktion eines N -Teilchensystem ist äquivalent zur vollständigen Lösung des Problems. Dies ist genauso schwierig, wie die Berechnung der N -Teilchen-Wellenfunktion. Der Vorteil Greenscher Funktionen ist, daß man leichter die Störungsrechnung benützen kann, um zu Näherungslösungen zu gelangen. Außerdem stellen die Feynman-Diagramme ein geeignetes Werkzeug dar, mit dem die einzelnen Terme der Störungsreihe anschaulich und unterscheidbar gemacht werden können.

¹Die Ein-Teilchen-Greensfunktion beschreibt das 'mittlere' Verhalten eines Teilchens, die N -Teilchen-Greensfunktion das Verhalten von N Teilchen.

2.1.1 Der Ein-Teilchen-Propagator

Definition

In einem N -Fermionensystem, das durch einen geeigneten Hamiltonoperator H beschrieben wird, ist die Ein-Teilchen-Greensfunktion definiert durch

$$G_{\alpha\beta}(t-t') \equiv -i \frac{\langle \psi_0^N | T [a_{\alpha H}(t) a_{\beta H}^\dagger(t')] | \psi_0^N \rangle_H}{\langle \psi_0^N | \psi_0^N \rangle_H}. \quad (2.1.1)$$

Wobei T der Zeitordnungsoperator ist und α bzw. β für einen Vollständigen Satz von Quantenzahlen stehen. Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren gehorchen den fermionischen Antikommutatorrelationen. Die Wellenfunktion ist der exakte Heisenberg-Grundzustand des N -Teilchensystems, angedeutet, durch $|\rangle_H$. Zur Vereinfachung der Schreibweise ist $\hbar = 1$ gesetzt. Im folgenden wird, falls nicht explizit auf eine andere Darstellung hingewiesen wird, immer das Heisenberg-Bild für Wellenfunktionen angenommen und der Index H weggelassen.

Nimmt man in (2.1.1) eine bestimmte Zeitordnung an, beispielsweise $t > t'$, kann man die Greensfunktion als die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür interpretieren, daß zur Zeit t' ein Teilchen im Zustand β erzeugt wurde und sich nach der Zeitspanne $t - t'$, im Zustand α befindet.

Lehmann-Darstellung

Nimmt man eine normierte Wellenfunktion $|\psi_0^N\rangle$ an und fügt zwischen den Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren aus (2.1.1) die Vollständigkeitsrelation des Fockraums

$$1 = |\rangle \langle| + \sum_n |\psi_n^1\rangle \langle\psi_n^1| + \dots + \sum_n |\psi_n^N\rangle \langle\psi_n^N| + \dots + \quad (2.1.2)$$

ein, wobei $|\psi_n^N\rangle$ die Eigenfunktionen zum Hamiltonoperator eines Systems mit N Teilchen sind, und führt dann eine Fouriertransformation durch, so erhält man die Lehmann-Darstellung der Ein-Teilchen-Greensfunktion.

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = \sum_n \frac{\langle \psi_0^N | a_\alpha | \psi_n^{N+1} \rangle \langle \psi_n^{N+1} | a_\beta^\dagger | \psi_0^N \rangle}{\omega - (E_n^{N+1} - E_0^N) + i\eta} + \sum_m \frac{\langle \psi_0^N | a_\beta^\dagger | \psi_m^{N-1} \rangle \langle \psi_m^{N-1} | a_\alpha | \psi_0^N \rangle}{\omega - (E_0^N - E_m^{N-1}) - i\eta} \quad (2.1.3)$$

Hier, wie auch im folgenden, sind die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren in Schrödinger-Darstellung. Die Pole der Lehmann-Darstellung des Ein-Teilchen-Propagators

sind die Anregungsenergien eines Systems mit $A + 1$ bzw. $A - 1$ Teilchen relativ zur Grundzustandsenergie des A -Teilchensystems. Die Residuen, die zu diesen Polen gehören, sind die entsprechenden Übergangsamplituden.

Spektralfunktion

Bei Prozessen, in denen ein Teilchen zu einem System hinzugefügt oder entfernt wird² spielt die Spektralfunktion eine wichtige Rolle. Für niedrig liegende Anregungen in endlichen Systemen ist die Spektralfunktion eine Summe gewichteter Deltafunktionen mit Energieargumenten, die den Polen der Greensfunktion entsprechen. Im diagonalen Fall sind die Teilchen- und Lochspektralfunktionen gegeben durch

$$S_{h,\alpha}(\omega) = \sum_m \left| \langle \psi_m^{N-1} | a_\alpha | \psi_0^N \rangle \right|^2 \delta(\omega - E_0^N + E_m^{N-1}) \quad (2.1.4)$$

$$S_{p,\alpha}(\omega) = \sum_n \left| \langle \psi_n^{N+1} | a_\alpha^\dagger | \psi_0^N \rangle \right|^2 \delta(\omega - E_n^{N+1} + E_0^N), \quad (2.1.5)$$

wobei $|\langle \psi_m^{N-1} | a_\alpha | \psi_0^N \rangle|^2$ und $|\langle \psi_n^{N+1} | a_\alpha^\dagger | \psi_0^N \rangle|^2$ Spektroskopische Faktoren genannt werden. Sie beschreiben die Wahrscheinlichkeit dafür, daß durch Entfernen (Hinzufügen) eines Teilchens im Ein-Teilchen-Zustand α des N -Teilchensystem der m -te (n -te) Anregungszustand eines Systems mit einem Teilchen mehr (weniger) und der Energie E_m^{N-1} (E_n^{N+1}) entsteht. Die volle Spektralfunktion ist demzufolge

$$S_\alpha(\omega) = S_{h,\alpha}(\omega) + S_{p,\alpha}(\omega). \quad (2.1.6)$$

Da die Terme der Spektralfunktion Wahrscheinlichkeitsdichten sind, gilt

$$S_{h,\alpha}^*(\omega) = S_{h,\alpha}(\omega) \geq 0 \quad (2.1.7)$$

$$S_{p,\alpha}^*(\omega) = S_{p,\alpha}(\omega) \geq 0$$

sowie

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega [S_{h,\alpha}(\omega) + S_{p,\alpha}(\omega)] = 1. \quad (2.1.8)$$

Benützt man die Lehmann-Darstellung (2.1.3) und die Integral-Formel

$$\frac{1}{x \pm i\eta} = P \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x), \quad (2.1.9)$$

²Z. B. die Kernreaktion $^{16}\text{O}(e, e')^{15}\text{N}$.

kann man die Teilchen und Lochspektralfunktionen in Abhängigkeit des Ein-Teilchen-Propagators ausdrücken

$$S_{h,\alpha}(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im}g G_\alpha(\omega) \quad \text{für } \omega < \mu^- , \quad (2.1.10)$$

$$S_{p,\alpha}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}g G_\alpha(\omega) \quad \text{für } \omega > \mu^+ , \quad (2.1.11)$$

wobei $\mu^- = E_0^N - E_0^{N-1}$ und $\mu^+ = E_0^{N+1} - E_0^N$ die chemischen Potentiale für das Entfernen (Hinzufügen) eines Teilchens sind. Da die Spektroskopischen Faktoren und die Anregungsenergien eines Systems, z. B. eines Atomkerns, experimentell zugänglich sind, ist so ein wichtiger Zusammenhang zwischen der mikroskopischen Theorie des Ein-Teilchen-Propagators und meßbaren Größen hergestellt.

Der freie Propagator

Falls die Teilchen nicht miteinander wechselwirken, reduziert sich der exakte Ein-Teilchen-Propagator auf den freien Propagator. Seine Lehmann-Darstellung ist gegeben durch

$$g_{\alpha\beta}(\omega) = g_\alpha(\omega)\delta_{\alpha\beta} = \left[\frac{\Theta(\alpha - F)}{\omega - \varepsilon_\alpha + i\eta} + \frac{\Theta(F - \alpha)}{\omega - \varepsilon_\alpha - i\eta} \right] , \quad (2.1.12)$$

wobei F den letzten besetzten Ein-Teilchen-Zustand bezeichnet. Nicht wechselwirkend heißt hier, daß sich die Teilchen unabhängig voneinander bewegen, wobei aber alle Konstituenten einem äußeren Potential unterworfen sein können. Wie man an (2.1.12) sieht, hat der Freie Propagator genau einen Pol entweder über oder unter der Fermikante, dessen Residuum demzufolge den Betrag 1 haben muß. Der Hamiltonoperator sowie der Grundzustand eines solchen Systems ³ sind gegeben durch

$$H_0 = \sum_\alpha \varepsilon_\alpha a_\alpha^\dagger a_\alpha \quad |\phi_0\rangle = \prod_{\varepsilon_\alpha < \varepsilon_F} a_\alpha^\dagger |0\rangle . \quad (2.1.13)$$

Steckt man die gesamte Wechselwirkung in ein äußeres Feld und vernachlässigt die Korrelationen zwischen den Teilchen, stellt der freie Propagator die nullte Näherung des Vielteilchenproblems dar.

2.1.2 Observablen und Greensfunktion

Der Formalismus der Greenschen Funktionen ist natürlich nur dann sinnvoll, wenn die wichtigsten Observablen zugänglich sind [Fet71]. Insbesondere ermöglicht die Kenntnis der Ein-Teilchen-Greensfunktion

³Z. B. ein freies Elektronengas oder die Hartree-Fock-Näherung für ein N -Nukleonen-System.

1. Die Berechnung des Erwartungswertes jedes Ein-Teilchen-Operators im Grundzustand.
2. Die Berechnung der Grundzustandsenergie
3. Vorhersagen über das Anregungsspektrum des $N \pm 1$ -Systems

Auf diese Punkte soll im folgenden eingegangen werden.

Erwartungswerte von Ein-Teilchen-Operatoren

Ein beliebiger Ein-Teilchen-Operator ist in zweiter Quantisierung [Rin80, Bau68] gegeben durch

$$\hat{O} = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | \hat{o} | \beta \rangle a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta} , \quad (2.1.14)$$

wobei α und β für einen Satz orthonormierter Ein-Teilchen-Zustände stehen. Mit Hilfe der Greensfunktion ergibt sich für den Erwartungswert dieses Ein-Teilchen-Operators

$$\langle \psi_0^N | \hat{O} | \psi_0^N \rangle = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | \hat{o} | \beta \rangle \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int \frac{d\omega}{2\pi i} e^{i\omega\eta} G_{\alpha\beta}(\omega) . \quad (2.1.15)$$

Relevante Ein-Teilchen-Operatoren wären z. B. die kinetische Energie, der Spin oder die Besetzungszahl. Für letztere ergibt sich insbesondere

$$N(\alpha) = \langle \psi_0^N | a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} | \psi_0^N \rangle = \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} d\omega S_{h,\alpha}(\omega) . \quad (2.1.16)$$

Im Modell unabhängiger Teilchen erhält man für alle Ein-Teilchen-Zustände unterhalb der Fermienergie die Besetzungszahl 1. Wird die Restwechselwirkung, oder zumindest ein Teil von ihr, mitberücksichtigt, verringert sich die Besetzung der Zustände unterhalb der Fermikante und Zustände über ihr werden bevölkert. Je größer dieser Effekt ist, desto stärker ist die Korrelation der Teilchen untereinander. ⁴

Grundzustandsenergie

Eine besonders interessante Größe ist selbstverständlich die totale Grundzustandsenergie. Falls die Wechselwirkung zwischen den Teilchen reinen Zwei-Körper-Charakter hat, erhält man für den Erwartungswert des Hamiltonoperators [Fet71]

$$E = \langle \psi_0^N | H | \psi_0^N \rangle = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} \frac{d\omega}{4\pi i} e^{i\omega\eta} \sum_{\alpha\beta} [\langle \alpha | T | \beta \rangle + \omega \delta_{\alpha\beta}] G_{\beta\alpha}(\omega) . \quad (2.1.17)$$

Diese Beziehung ist auch unter dem Begriff "Koltun-Summenregel" bekannt.

⁴Was gleichbedeutend damit ist, daß sich die Teilchen nicht mehr unabhängig voneinander bewegen.

Anregungsspektrum

Die Anregungsenergien des $N \pm 1$ -Systems sind die Pole der Greensfunktion ($E_n^{N \pm 1} \gtrsim \varepsilon_F$) in der Lehmann-Darstellung (2.1.3). Die zugehörigen spektroskopischen Faktoren ergeben sich aus den Spektralfunktionen (2.1.4) (2.1.5).⁵

2.1.3 Die Dyson-Gleichung

Eine diagrammatische Analyse der Störungstheorie zeigt, daß man die Entwicklung der Ein-Teilchen-Greensfunktion auf Terme reduzieren kann, die durch verbundene Feynman-Diagramme dargestellt werden können.⁶ Eine Analyse dieser Diagramme zeigt, daß die exakte Greensfunktion aus einem ungestörten Propagator und allen zusammenhängenden Graphen mit einem freien Propagator an jedem Ende besteht. Diagrammatisch ist dieser Sachverhalt in Abbildung 2.1.1 dargestellt. Die doppelschraffierte Fläche steht für die Summe aller zusammenhängenden Graphen und wird reduzierbare Selbstenergie genannt. Wäre sie bekannt, könnte die exakte Greensfunktion sofort angegeben werden. Beispiele für solche zusammenhängenden Graphen sind in Abbildung 2.1.2 zu finden. Mathematisch formuliert gilt

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = g_{\alpha\beta}(\omega) + \sum_{\delta\gamma} g_{\alpha\delta}(\omega) \Sigma_{\delta\gamma}^R(\omega) g_{\gamma\beta}(\omega) . \quad (2.1.18)$$

Hier bezeichnet $\Sigma_{\delta\gamma}^R(\omega)$ die reduzierbare Selbstenergie. Im Unterschied zur irreduziblen Selbstenergie tragen zur reduzierbaren Selbstenergie auch solche Graphen bei, die man durch Zerschneiden einer einzigen Ein-Teilchen-Linie in ein Diagramm niedrigerer Ordnung überführen könnte. Daraus folgt, daß die reduzierbare Selbstenergie die Summe aller denkbaren Wiederholungen der irreduziblen Selbstenergie ist. Dieser Sachverhalt ist in Abbildung 2.1.3 dargestellt. Für die dazugehörige Ein-Teilchen-Greensfunktion ergibt sich dann

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(\omega) &= g_{\alpha\beta}(\omega) + \sum_{\delta\gamma} g_{\alpha\delta}(\omega) \Sigma_{\delta\gamma}(\omega) g_{\gamma\beta}(\omega) \\ &+ \sum_{\delta\gamma\delta'\gamma'} g_{\alpha\delta}(\omega) \Sigma_{\delta\gamma}(\omega) g_{\gamma\delta'}(\omega) \Sigma_{\delta'\gamma'}(\omega) g_{\gamma'\beta}(\omega) \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (2.1.19)$$

Betrachtet man nun Abbildung 2.1.3, so sieht man, daß die gestrichelte Linie erneut die

⁵Siehe oben, Spektralfunktion.

⁶Eine erste solche "linked cluster" Entwicklung wurde von Brueckner angegeben und bis zur vierten Ordnung bewiesen [Bru55b]. Der allgemeine Beweis des sogenannten "linked cluster theorem" gelang Goldstone [Gol57].

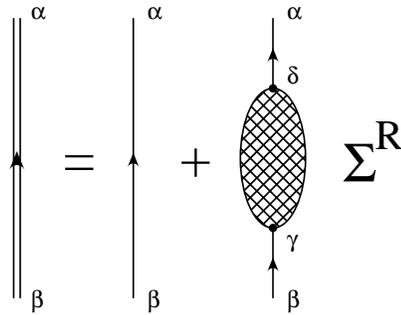


Abbildung 2.1.1: Diagrammatische Darstellung der Störungsreihe für die Greensfunktion mit Hilfe der reduzierten Selbstenergie (doppelschraffierte Fläche)

gesamte Reihe für den exakten Propagator G einschließt. Damit läßt sich (2.1.19) mit Hilfe der irreduziblen Selbstenergie schreiben als

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = g_{\alpha\beta}(\omega) + \sum_{\delta\gamma} g_{\alpha\delta}(\omega)\Sigma_{\delta\gamma}(\omega)G_{\gamma\beta}(\omega) . \tag{2.1.20}$$

Die obige Gleichung (2.1.20) ist die Dyson–Gleichung. Die diagrammatische Darstellung der Dyson–Gleichung ist in Abbildung 2.1.4 zu finden. Beachtet man, daß $g_{\alpha\beta}(\omega) = g_{\alpha}(\omega)\delta_{\alpha\beta}$ gilt, kann man (2.1.20) umschreiben in

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = g_{\alpha}(\omega)\delta_{\alpha\beta} + \sum_{\gamma} g_{\alpha}(\omega)\Sigma_{\alpha\gamma}(\omega)G_{\gamma\beta}(\omega) . \tag{2.1.21}$$

Für den Fall, daß die Selbstenergie in (2.1.21) diagonal ist, kann man die Dyson–Gleichung nach G auflösen und erhält

$$G_{\alpha\alpha}(\omega) = \frac{1}{[g_{\alpha}(\omega)]^{-1} - \Sigma_{\alpha\alpha}(\omega)} = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{\alpha} - \Sigma_{\alpha\alpha}(\omega)} \tag{2.1.22}$$

Wobei die Beziehung (2.1.12) für den freien Propagator eingesetzt wurde.

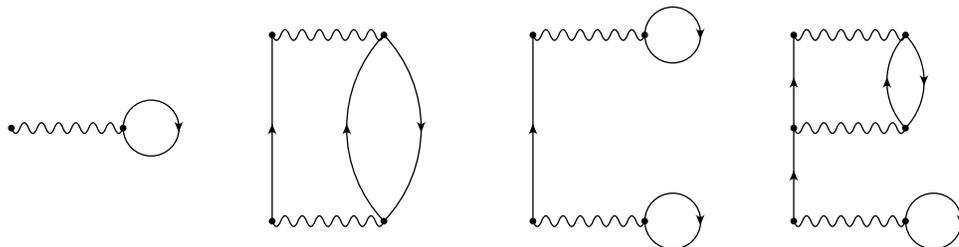


Abbildung 2.1.2: Beispiele für irreduzible (erstes und zweites Diagramm von links) und reduzible (übrige Diagramme) Selbstenergieeinschübe

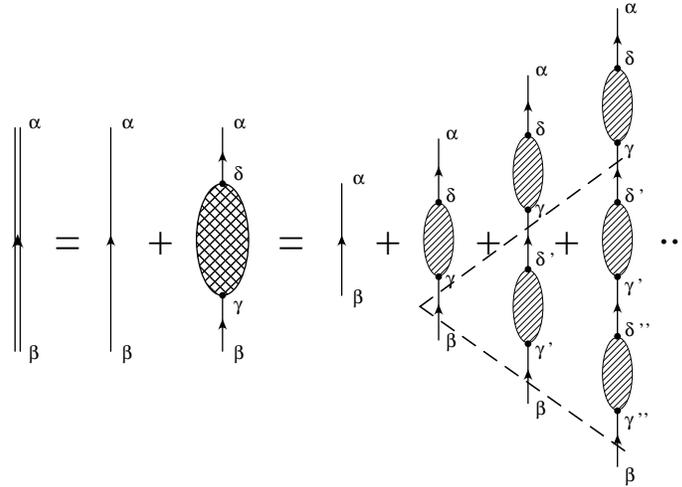


Abbildung 2.1.3: Der exakte Propagator in Abhängigkeit der irreduziblen Selbstenergie (schraffierte Flächen). Die Aufsummation aller möglichen Wiederholungen gibt wieder die reduzible Selbstenergie (doppelschraffierte Fläche).

Vergleicht man obigen Ausdruck für die Greensfunktion mit dem entsprechenden des freien Propagators (2.1.12), kann man die irreduzible Selbstenergie $\Sigma_{\alpha\alpha}(\omega)$ als ein effektives Potential interpretieren, das den Nenner um einen nicht-kinetischen Anteil erweitert, der im allgemeinen komplex und explizit energieabhängig ist.

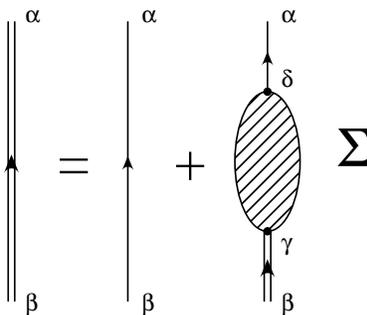


Abbildung 2.1.4: Diagrammatische Darstellung der Dyson-Gleichung. Durch die irreduzible Selbstenergie (schraffierte Fläche) wird ein Zusammenhang zwischen dem exakten Propagator (Doppellinie) und dem freien Propagator (Einfachlinie) hergestellt.

2.1.4 Die Hartree–Fock Näherung

Wie schon erwähnt, ist der einfachste Zugang zu einem Vielteilchenproblem die Annahme, daß sich die Teilchen unabhängig voneinander in einem mittleren Potential (”mean field”) bewegen. Ein solches Potential kann man als den gemittelten Einfluß aller anderen Teilchen auf ein gerade betrachtetes verstehen. Diese Reduktion einer komplizierten Zwei–Teilchen Wechselwirkung⁷ auf ein Ein–Teilchen–Potential ist die Grundidee des Hartree–Fock Verfahrens (HF). Vielteilchenprobleme, die ausschließlich mit einem solchen gemittelten Potential gelöst wurden, nennt man oft Systeme ohne Korrelation.

Will man die Dyson–Gleichung (2.1.20) in HF–Näherung lösen, entspricht die irreduzible Selbstenergie diesem mittleren Ein–Teilchen Potential. In Abbildung 2.1.5 ist die Dyson–Gleichung in HF–Näherung diagrammatisch dargestellt. Obwohl die HF–Näherung eine drastische Vereinfachung des echten Vielteilchenproblems darstellt, können die HF–Gleichungen nur selbstkonsistent gelöst werden. Dies wird deutlich, wenn man die Ausdrücke für Greensfunktion und irreduzible Selbstenergie betrachtet.

$$G_{\alpha\beta}^{HF}(\omega) = g_{\alpha}(\omega) + \sum_{\gamma} g_{\alpha}(\omega) \Sigma_{\alpha\gamma}^{HF}(\omega) G_{\gamma\beta}^{HF}(\omega) \quad (2.1.23)$$

$$\Sigma_{\alpha\beta}^{HF}(\omega) = -i \int \frac{d\omega'}{2\pi} \sum_{\gamma\gamma'} \langle \alpha\gamma | \bar{V} | \beta\gamma' \rangle G_{\gamma\gamma'}^{HF}(\omega') \quad (2.1.24)$$

In (2.1.24) steht $\langle \alpha\gamma | \bar{V} | \beta\gamma' \rangle$ für antisymmetrisierte Matrixelemente, d. h. Direkter und Austauschterm werden berücksichtigt.

Wie man an (2.1.23) sehen kann, ist zur Berechnung des HF–Propagators die Kenntnis der irreduziblen Selbstenergie erforderlich. Diese hängt ihrerseits wieder vom HF–Propagator ab, so daß die Gleichungen nur selbstkonsistent gelöst werden können, etwa indem man in einem ersten Iterationsschritt die Selbstenergie mit dem freien Propagator berechnet und iteriert. Hat man die gekoppelten Gleichungen (2.1.23) und (2.1.24) gelöst, kann man den Propagator in der HF–Basis⁸ angeben

$$G_{\alpha}^{HF}(\omega) = \frac{\Theta(\varepsilon_{\alpha} + \Sigma_{\alpha}^{HF} - F)}{\omega - \varepsilon_{\alpha} - \Sigma_{\alpha}^{HF} + i\eta} + \frac{\Theta(F - \varepsilon_{\alpha} - \Sigma_{\alpha}^{HF})}{\omega - \varepsilon_{\alpha} - \Sigma_{\alpha}^{HF} - i\eta}. \quad (2.1.25)$$

Durch die Energieintegration in (2.1.24) ist die Selbstenergie hier zu einer energieunabhängigen Größe geworden. Vergleicht man (2.1.25) mit dem freien Propagator (2.1.12), so sieht man, daß durch die HF–Rechnung nur die Einteilchenenergie modifiziert wurde.

⁷In der Kernphysik benützt man meistens effektive Zwei–Teilchen Wechselwirkungen. Manchmal werden auch Drei–Teilchen oder höhere Wechselwirkungen untersucht.

⁸D. h. die Greensfunktion wird diagonal, also $G_{\alpha\beta}^{HF}(\omega) = G_{\alpha}^{HF}(\omega) \delta_{\alpha\beta}$, und es gilt $\int_{-\infty}^F S_{h,\alpha} = 1$.

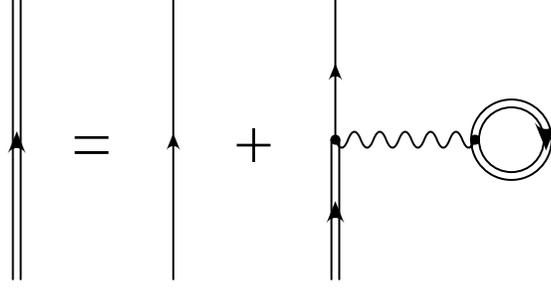


Abbildung 2.1.5: Der Ein-Teilchen Propagator in HF-Näherung

Der zugehörige Hamiltonoperator läßt sich demzufolge (2.1.13) als Ein-Teilchen-Operator schreiben

$$H^{HF} = \sum_{\mu} \left[\varepsilon_{\mu} + \sum_{\kappa \leq F} \langle \mu\kappa | \bar{V} | \mu\kappa \rangle \right] a_{\mu}^{\dagger} a_{\mu} = \sum_{\lambda} \varepsilon_{\lambda}^{HF} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} . \quad (2.1.26)$$

An Gleichung (2.1.26) kann man ablesen, daß

$$\varepsilon_{\alpha}^{HF} = \varepsilon_{\alpha} + \Sigma_{\alpha}^{HF} \quad (2.1.27)$$

und demzufolge

$$\Sigma_{\alpha}^{HF} = \sum_{\kappa \leq F} \langle \alpha\kappa | \bar{V} | \alpha\kappa \rangle = \sum_{\kappa} \langle \alpha\kappa | \bar{V} | \alpha\kappa \rangle \Theta(F - \kappa) \quad (2.1.28)$$

gilt. Die HF-Selbstenergie stellt hier das gemittelte äußere Ein-Teilchen-Potential dar, dem alle Teilchen unterworfen sind. Der einzige Unterschied zum freien Propagator ist eine Redefinition der Ein-Teilchen-Energien, woran man sehen kann, daß man nach wie vor ein System unabhängiger Teilchen hat.

Die HF-Näherung ist von großer Bedeutung, da sie die einfachste selbstkonsistente Lösung eines Vielteilchensystems darstellt. Insbesondere in der Atomphysik kann in Mehrelektronensystemen der Beitrag der $e^{-}e^{-}$ -Abstoßung gut mit einem solchen mittleren Potential behandelt werden. In der Kernphysik ist der Sachverhalt weniger einfach. Aufgrund der stark repulsiven Beiträge der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung bei kleinen Relativabständen liefert eine reine HF-Rechnung ungebundene Kerne. Will man zu sinnvollen Ergebnissen gelangen, muß man diesen kurzreichweitigen Korrelationen Rechnung tragen. Ein möglicher Ansatz ist die nackte Wechselwirkung durch eine effektive zu ersetzen. Dies gelingt durch Lösung der Bethe-Goldstone-Gleichung [Rin80, Bru55a]

$$\mathcal{G}(\omega) = \bar{V} + \bar{V} \frac{Q}{\omega - H_0} \mathcal{G}(\omega) , \quad (2.1.29)$$

die in Analogie zur Lippmann-Schwinger-Gleichung die Streuung von zwei Nukleonen im Medium beschreibt. Deshalb tritt in obiger Gleichung auch der Pauli-Operator Q

auf, der dafür sorgt, daß nicht in schon besetzte Zustände gestreut wird. Desweiteren ist H_0 in (2.1.29) nicht nur der kinetische Anteil des Hamiltonoperators, sondern der Ein-Teilchen-Anteil, der sich aus einer HF-Rechnung in der die nackte Wechselwirkung durch die effektive ersetzt wurde, ergibt.

Dieses Verfahren nennt man Brueckner-Hartree-Fock (BHF) und die Ein-Teilchen-Energien ergeben sich zu

$$\varepsilon_\alpha^{BHF} = \varepsilon_\alpha + \sum_{\mu \leq F} \langle \alpha\mu | \mathcal{G}(\omega = \varepsilon_\alpha^{BHF} + \varepsilon_\mu^{BHF}) | \alpha\mu \rangle . \quad (2.1.30)$$

An Gleichungen (2.1.29) und (2.1.30) sieht man, daß wieder selbstkonsistent gerechnet werden muß. Das BHF-Verfahren ist das einfachste selbstkonsistent lösbare Verfahren, das gebundene Atomkerne zu liefern vermag. Allerdings weichen z. B. die erzielten Bindungsenergien deutlich von den experimentellen Werten ab.

2.1.5 Selbstkonsistenz und Terme höherer Ordnung

Da HF bzw. BHF keine zufriedenstellende Ergebnisse liefert, liegt es nahe auch Feynman-Graphen höherer Ordnung mit in die diagrammatische Analyse der Greensfunktion einzubeziehen. Abbildung 2.1.6 zeigt die in der folgenden Analyse berücksichtigten Selbstenergieeinschübe. Ganz links findet sich der HF-Selbstenergiebeitrag. Die beiden anderen Terme sind Zwei-Teilchen-Ein-Loch-(2T1L)- und Zwei-Loch-Ein-Teilchen-(2L1T)-Beiträge zur Selbstenergie zweiter Ordnung. Wie bei der HF-Rechnung hat man es auch hier mit einem Selbstkonsistenzproblem zu tun, allerdings ist dieses aufgrund der zusätzlichen Graphen erheblich schwieriger zu lösen. Als Ergebnis einer solchen Rechnung erhält man eine selbstkonsistente Greensfunktion, weswegen man diese Vorgehensweise auch "Self Consistent Green's Function"- oder SCGF-Verfahren nennt.

Will man die Ein-Teilchen-Greensfunktion mit dem SCGF-Verfahren berechnen, hat man mit einer Vielzahl rechentechnischer und numerischer Schwierigkeiten zu kämpfen. Darüberhinaus kann ein größerer Modellraum dazu führen, daß man selbst die Speicherkapazität von Großrechnern überschreitet. Die von der Numerik bzw. Rechnerarchitektur herrührenden Probleme werden in Kapitel 4 näher erläutert. Im folgenden soll zunächst der mathematische Apparat bzw. der Iterationszyklus geschildert werden.

Selbstenergiebeiträge erster und zweiter Ordnung

Startpunkt des Verfahrens ist die irreduzible Selbstenergie, die nun Beiträge erster und zweiter Ordnung hat.

$$\Sigma^{SCGF}(\omega) = \Sigma^{(1)}(\omega) + \Sigma^{(2)}(\omega) \quad (2.1.31)$$

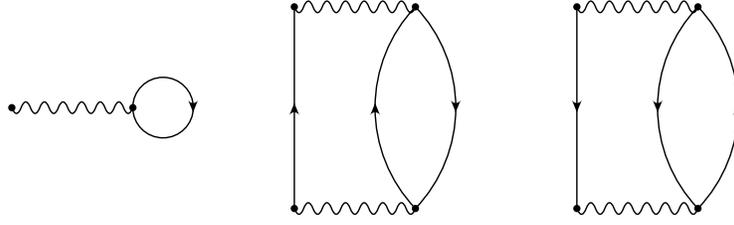


Abbildung 2.1.6: *Untersuchte Beiträge zur Selbstenergie erster und zweiter Ordnung*

Explizit ergibt sich für den Beitrag erster Ordnung⁹

$$\Sigma_{\alpha\beta}^{(1)}(\omega) = -i \int \frac{d\omega'}{2\pi} \sum_{\gamma\gamma'} \langle \alpha\gamma | \bar{V} | \beta\gamma' \rangle G_{\gamma\gamma'}(\omega'). \quad (2.1.32)$$

Die beiden Terme zweiter Ordnung kann man in einen Ausdruck zusammenfassen

$$\begin{aligned} \Sigma_{\alpha\beta}^{(2)} &= \frac{1}{2} \sum_{\gamma\delta\mu\gamma'\delta'\mu'} \int \frac{d\omega_1}{2\pi i} \int \frac{d\omega_2}{2\pi i} \langle \alpha\mu | \bar{V} | \gamma'\delta' \rangle \langle \gamma\delta | \bar{V} | \beta\mu' \rangle \\ &\times G_{\gamma\gamma'}(\omega - \omega_1 + \omega_2) G_{\delta\delta'}(\omega_1) G_{\mu\mu'}(\omega_2). \end{aligned} \quad (2.1.33)$$

Die Summation über die Quantenzahlen γ, δ, \dots ist hier auf die Zustände des Modellraums beschränkt. Die zur Berechnung der Selbstenergiebeiträge benötigte Ein-Teilchen Greensfunktion $G_{\alpha\beta}(\omega)$ ist Lösung der Dyson-Gleichung¹⁰

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = g_{\alpha}^{HF}(\omega) \delta_{\alpha\beta} + \sum_{\gamma} g_{\alpha}^{HF}(\omega) \Sigma_{\alpha\gamma}^{(2)} G_{\gamma\beta}(\omega). \quad (2.1.34)$$

In (2.1.34) ist $g_{\alpha}^{HF}(\omega)$ bereits aus den Selbstenergiebeiträgen erster Ordnung $\Sigma^{(1)}$ bestimmt worden. Die Gleichungen (2.1.32) bis (2.1.34) hängen wiederum alle voneinander ab. Ziel des SCFG-Verfahrens ist es nun, diesen Satz gekoppelter Gleichungen selbstkonsistent zu lösen.

Startwerte für die Selbstenergie

In einem ersten Iterationsschritt werden (2.1.32) und (2.1.34) mit dem HF-Propagator

$$g_{\alpha}^{HF} = \frac{\Theta(\varepsilon_{\alpha}^{HF} - F)}{\omega - \varepsilon_{\alpha}^{HF} + i\eta} + \frac{\Theta(F - \varepsilon_{\alpha}^{HF})}{\omega - \varepsilon_{\alpha}^{HF} - i\eta} \quad (2.1.35)$$

⁹Will man Kerne mit realistischer Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung berechnen, ist in den Ausdrücken für die Selbstenergiebeiträge \bar{V} durch \mathcal{G} zu ersetzen.

¹⁰Da die HF-Greensfunktion bis auf die modifizierte Ein-Teilchen-Energie einem freien Propagator entspricht, wird sie in der Folge mit $g_{\alpha}^{HF}(\omega)$ bezeichnet.

berechnet. Für die Selbstenergie erster Ordnung erhält man so¹¹

$$\Sigma_{\alpha\beta}^{(1)}(\omega) = \sum_{\gamma} \langle \alpha\gamma | \bar{V} | \beta\gamma \rangle \Theta(F - \varepsilon_{\gamma}) . \quad (2.1.36)$$

Der Ausdruck für die Selbstenergie zweiter Ordnung ist etwas komplizierter und ergibt sich zu

$$\begin{aligned} \Sigma_{\alpha\beta}^{(2)}(\omega) &= \frac{1}{2} \sum_{\gamma\delta\mu} \int \frac{d\omega_1}{2\pi i} \int \frac{d\omega_2}{2\pi i} \langle \alpha\mu | \bar{V} | \gamma\delta \rangle \langle \gamma\delta | \bar{V} | \beta\mu \rangle g_{\gamma}^{HF}(\omega - \omega_1 + \omega_2) g_{\delta}^{HF}(\omega_1) g_{\mu}^{HF}(\omega_2) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\gamma\delta\mu} \langle \alpha\mu | \bar{V} | \gamma\delta \rangle \langle \gamma\delta | \bar{V} | \beta\mu \rangle \\ &\quad \times \left[\frac{\Theta(\varepsilon_{\gamma} - F)\Theta(\varepsilon_{\delta} - F)\Theta(F - \varepsilon_{\mu})}{\omega - (\varepsilon_{\gamma}^{HF} + \varepsilon_{\delta}^{HF} - \varepsilon_{\mu}^{HF})} + \frac{\Theta(F - \varepsilon_{\gamma})\Theta(F - \varepsilon_{\delta})\Theta(\varepsilon_{\mu} - F)}{\omega - (\varepsilon_{\gamma}^{HF} + \varepsilon_{\delta}^{HF} - \varepsilon_{\mu}^{HF})} \right] . \end{aligned} \quad (2.1.37)$$

Die so berechneten Startwerte für die Selbstenergien sind in Abbildung 2.1.7 a) – c) dargestellt. Diagramm a) stellt $\Sigma^{(1)}$ dar, während b) und c) zu $\Sigma^{(2)}$ gehören. Mit den so gewonnenen Ausdrücken für die Selbstenergien, kann man jetzt die Dyson–Gleichung (2.1.34) lösen.

Überführung der Dyson–Gleichung in ein Eigenwertproblem

Die Dyson–Gleichung für $\Sigma^{(2)}$ kann einfacher behandelt werden, wenn man sie in ein nichtlineares Eigenwertproblem umschreibt. Dazu setzt man die Lehmann–Darstellung der Greensfunktion (2.1.3) sowie den HF–Propagator (2.1.35) in (2.1.34) ein, multipliziert diese Gleichung mit $\omega - (E_n^{N+1} - E_0^N)$ und bildet den Grenzwert $\omega \rightarrow (E_n^{N+1} - E_0^N)$. Dadurch erhält man eine Eigenwertgleichung für $\omega_n = (E_n^{N+1} - E_0^N)$, was die Anregungsenergien des $N + 1$ –Systems relativ zum Grundzustand sind. Diese Eigenwertgleichung läßt sich schreiben als [Bra90]

$$\sum_{\beta} \left[\delta_{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha}^{HF} + \Sigma_{\alpha\beta}^{(2)}(\omega_n) \right] \langle \psi_n^{N+1} | a_{\beta}^{\dagger} | \psi_0^N \rangle = \omega_n \langle \psi_n^{N+1} | a_{\alpha}^{\dagger} | \psi_0^N \rangle . \quad (2.1.38)$$

In analoger Weise kann man die korrespondierende Gleichung für $\omega_m = (E_0^N - E_m^{N-1})$, den Energien des $N - 1$ –Systems herleiten, und erhält

$$\sum_{\beta} \left[\delta_{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha}^{HF} + \Sigma_{\alpha\beta}^{(2)}(\omega_m) \right] \langle \psi_n^{N-1} | a_{\beta} | \psi_0^N \rangle = \omega_m \langle \psi_n^{N-1} | a_{\alpha} | \psi_0^N \rangle . \quad (2.1.39)$$

Die erhaltenen Eigenwertgleichungen kann man für $s = m$ oder $s = n$ auch in eine kompakte Matrix–Gleichung umschreiben, wobei die Größe des Modellraums die Anzahl

¹¹Vgl. (2.1.28).

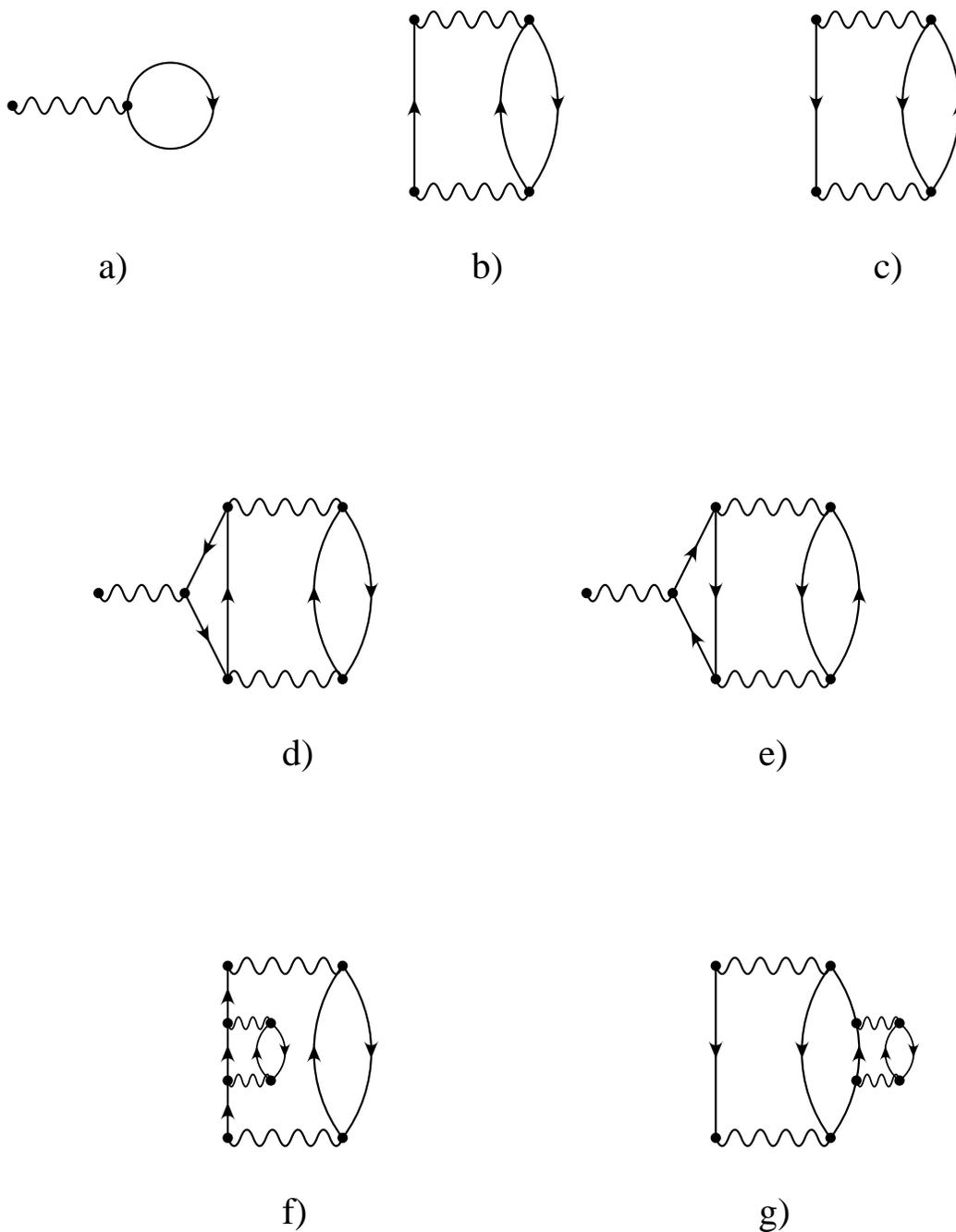


Abbildung 2.1.7: Im SCGF-Verfahren auftretende Beiträge zur Selbstenergie. Die Diagramme a) – c) zeigen die mit g^{HF} berechneten Startwerte der Selbstenergiebeiträge, während die Diagramme d) – g) Beispiele für Graphen sind, die durch das selbstkonsistente Verfahren generiert werden.

der oben links in der Matrix auftretenden HF–Ein–Teilchen–Energien bestimmt.

$$\begin{pmatrix}
 \varepsilon_\alpha^{HF} & 0 & \cdots & 0 & a_1^\alpha & a_2^\alpha & \cdots & a_k^\alpha & b_1^\alpha & b_2^\alpha & \cdots & b_l^\alpha \\
 0 & \varepsilon_\beta^{HF} & \cdots & 0 & a_1^\beta & a_2^\beta & \cdots & a_k^\beta & b_1^\beta & b_2^\beta & \cdots & b_l^\beta \\
 \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \\
 0 & 0 & \cdots & \varepsilon_\nu^{HF} & a_1^\nu & a_2^\nu & \cdots & a_k^\nu & b_1^\nu & b_2^\nu & \cdots & b_l^\nu \\
 a_1^\alpha & a_1^\beta & \cdots & a_1^\nu & E_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
 a_2^\alpha & a_2^\beta & \cdots & a_2^\nu & 0 & E_2 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
 \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
 a_k^\alpha & a_k^\beta & \cdots & a_k^\nu & 0 & 0 & \cdots & E_k & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
 b_1^\alpha & b_1^\beta & \cdots & b_1^\nu & 0 & 0 & \cdots & 0 & \tilde{E}_1 & 0 & \cdots & 0 \\
 b_2^\alpha & b_2^\beta & \cdots & b_2^\nu & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \tilde{E}_2 & \cdots & 0 \\
 \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
 b_l^\alpha & b_l^\beta & \cdots & b_l^\nu & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & \tilde{E}_l
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 X_0^{s,\alpha} \\
 X_0^{s,\beta} \\
 \vdots \\
 X_0^{s,\nu} \\
 Y_1^s \\
 Y_2^s \\
 \vdots \\
 Y_k^s \\
 Z_1^s \\
 Z_2^s \\
 \vdots \\
 Z_k^s
 \end{pmatrix}
 = \omega_s
 \begin{pmatrix}
 X_0^{s,\alpha} \\
 X_0^{s,\beta} \\
 \vdots \\
 X_0^{s,\nu} \\
 Y_1^s \\
 Y_2^s \\
 \vdots \\
 Y_k^s \\
 Z_1^s \\
 Z_2^s \\
 \vdots \\
 Z_k^s
 \end{pmatrix}
 \tag{2.1.40}$$

In Gleichung (2.1.40) stehen E_i und \tilde{E}_j für die im Modellraum möglichen 2T1L– und 2L1T–Energien, die durch die Ankopplung der Selbstenergie $\Sigma^{(2)}$ entstehen. Im ersten Iterationsschritt, also wenn die Selbstenergie mit dem HF–Propagator berechnet wird, kann man sie symbolisch schreiben als

$$E_i = \varepsilon_{T_1}^{HF} + \varepsilon_{T_2}^{HF} - \varepsilon_L^{HF} \tag{2.1.41}$$

$$\tilde{E}_j = \varepsilon_{L_1}^{HF} + \varepsilon_{L_2}^{HF} - \varepsilon_T^{HF}, \tag{2.1.42}$$

wobei L_1 , L_2 und L für Lochzustände und T_1 , T_2 und T für Teilchenzustände im Modellraum stehen. Die Größen a_i und b_j sind Wechselwirkungsmatrixelemente zwischen den Zuständen α , β , \dots und der entsprechenden 2T1L– (2L1T–) Konfiguration

$$a_i = \langle T_1 T_2 | \bar{V} | \alpha L \rangle \tag{2.1.43}$$

$$b_j = \langle L_1 L_2 | \bar{V} | \alpha T \rangle. \tag{2.1.44}$$

Im folgenden soll gezeigt werden, daß Gleichungen (2.1.38) und (2.1.39) identisch mit (2.1.40) sind. Die ersten Zeilen der Matrix in (2.1.40), in denen HF–Ein–Teilchen–Energien stehen, kann man umformen in

$$\varepsilon_p^{HF} X_0^{s,p} + \sum_{i=1}^k a_i^p Y_i^s + \sum_{j=1}^l b_j^p Z_j^s = \omega_s X_0^{s,p} \quad \text{für } p = \alpha \cdots \nu \tag{2.1.45}$$

Die übrigen Zeilen kann man schreiben als

$$\sum_{q=\alpha}^{\nu} a_i^q X_0^{s,q} + E_i Y_i^s = \omega_s Y_i^s \quad (2.1.46)$$

beziehungsweise

$$\sum_{q=\alpha}^{\nu} b_j^q X_0^{s,q} + \tilde{E}_j Z_j^s = \omega_s Z_j^s . \quad (2.1.47)$$

Die Gleichungen (2.1.46) und (2.1.47) löst man nun nach Y_i^s bzw. Z_j^s auf und erhält

$$Y_i^s = \sum_{q=\alpha}^{\nu} \frac{a_i^q X_0^{s,q}}{\omega_s - E_i} \quad (2.1.48)$$

sowie

$$Z_j^s = \sum_{q=\alpha}^{\nu} \frac{b_j^q X_0^{s,q}}{\omega_s - \tilde{E}_j} . \quad (2.1.49)$$

Letztere Beziehungen für Y_i^s und Z_j^s setzt man jetzt wieder, exemplarisch für $p = \alpha$, in Gleichung (2.1.45) ein und findet

$$\sum_{q=\alpha}^{\nu} \left[\varepsilon_{\alpha}^{HF} \delta_{q\alpha} + \sum_{i=1}^k \frac{a_i^{\alpha} a_i^q}{\omega_s - E_i} + \sum_{j=1}^l \frac{b_j^{\alpha} b_j^q}{\omega_s - \tilde{E}_j} \right] X_0^{s,q} = \omega_s X_0^{s,\alpha} . \quad (2.1.50)$$

Benützt man nun die Definitionen für E_i (\tilde{E}_j) sowie a_i (b_j) und vergleicht die Summen innerhalb der Klammern mit dem Ausdruck für die Selbstenergie zweiter Ordnung (2.1.34), erkennt man, je nachdem ob $s = n$ oder $s = m$ gilt, die Ausdrücke (2.1.38) bzw. (2.1.39) wieder¹², sofern man $X_0^{s,q}$ mit $\langle \psi_n^{N+1} | a_q^\dagger | \psi_0^N \rangle$ bzw. $\langle \psi_m^{N-1} | a_q | \psi_0^N \rangle$ identifiziert [Mue93a].

Die Lösung der Dyson-Gleichung, also die Lösung des Eigenwertproblems (2.1.40) ergibt nun eine nicht-triviale Multipol-Greensfunktion, die man in der Lehmann-Darstellung erhält

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = \sum_s X_0^{s,\alpha} X_0^{s,\beta} \left[\frac{\Theta(\omega_s - F)}{\omega - \omega_s + i\eta} + \frac{\Theta(F - \omega_s)}{\omega - \omega_s - i\eta} \right] . \quad (2.1.51)$$

Da die Ein-Teilchen-Zustände an die 2T1L- und 2L1T-Konfigurationen des Modellraums gekoppelt wurden, verteilt sich die Ein-Teilchen-Stärke hier auf viele Pole. Die Gesamtstärke des Zustands α unterhalb der Fermikante ergibt sich jetzt zu

$$n_{\alpha} = \sum_n \Theta(F - \omega_n) (X_0^{n,\alpha})^2 \quad (2.1.52)$$

und ist ungleich eins. Konsequenz davon ist, daß auch Teilchen-Zustände eine nicht verschwindende Besetzungswahrscheinlichkeit haben.

¹²bis auf den Faktor $\frac{1}{2}$, der von den Feynman-Regeln herrührt und durch geschicktes aufstellen der Matrix (2.1.40) berücksichtigt wird.

Renormalized Hartree–Fock

Das System der selbstkonsistent zu lösenden gekoppelten Gleichungen (2.1.32) bis (2.1.34) kann teilweise geschlossen werden, wenn man in einem nächsten Iterationsschritt die Selbstenergie erster Ordnung mit der erhaltenen Multipol–Greensfunktion (2.1.51) berechnet, die Selbstenergie zweiter Ordnung unverändert läßt, und iteriert. Dies stellt kein Problem dar. Man erhält dann anstatt der konventionellen HF–Ein–Teilchen–Energien

$$\varepsilon_{\alpha}^{RHF} = \langle \alpha | T | \alpha \rangle + \sum_{\beta} \langle \alpha \beta | \bar{V} | \alpha \beta \rangle n_{\beta}. \quad (2.1.53)$$

Diagrammatisch gesprochen führt das dazu, daß bei einmaligem Wiedereinsetzen der Multipol–Greensfunktion (2.1.51) auch Diagramme des Typs d) für Loch–Zustände und e) für Teilchen–Zustände aus Abbildung 2.1.7 berücksichtigt werden. Iteriert man dann mit unveränderter Selbstenergie zweiter Ordnung, ergeben sich auch kompliziertere Diagramme aus mehrfachen Aneinanderreihungen der Diagramme a), d) und e).

Der Effekt dieser Korrektur, die Renormalized Hartree–Fock¹³ genannt wird [Koe92, Bra67, Ami97] ist eine Entleerung der Loch–Zustände bzw. Bevölkering der Teilchen–Zustände.

Volle Selbstkonsistenz

Um zu vollständiger Selbstkonsistenz zu gelangen, muß man auch $\Sigma^{(2)}$ mit der erhaltenen Multipol–Greensfunktion (2.1.51) berechnen. Dies bedeutet, daß auch Diagramme des Typs f) und g) aus Abbildung 2.1.7 mitgenommen werden. Auf den ersten Blick scheint auch das kein Problem zu sein. Betrachtet man jedoch nochmals den Startwert für die Selbstenergie zweiter Ordnung (2.1.38), sieht man, daß anstatt den HF–Greensfunktionen jetzt die neu erhaltene Multipol–Greensfunktion einzusetzen ist. Für jede Greensfunktion hat man bei der Berechnung von $\Sigma^{(2)}$ also eine zusätzliche Summation über die Anzahl der Pole auszuführen. Anstatt eines Produkts von Θ –Funktionen für jedes $\gamma\delta\mu$ hat man nun eine Vielzahl von Termen, die 2T1L– oder 2L1T–Charakter haben. Nach Energieintegration erhält man

$$\begin{aligned} \Sigma_{\alpha\beta}^{(2)} = & \frac{1}{2} \sum_{\gamma\delta\mu\gamma'\delta'\mu'} \langle \alpha\mu | \bar{V} | \gamma'\delta' \rangle \langle \gamma\delta | \bar{V} | \beta\mu' \rangle \left(\sum_{s_1 s_2 s_3} X_0^{s_1, \gamma} X_0^{s_1, \gamma'} X_0^{s_2, \delta} X_0^{s_2, \delta'} X_0^{s_3, \mu} X_0^{s_3, \mu'} \right. \\ & \left. \times \left[\frac{\Theta(\omega_{s_1} - F) \Theta(\omega_{s_2} - F) \Theta(F - \omega_{s_3})}{\omega - (\omega_{s_1} + \omega_{s_2} - \omega_{s_3})} + \frac{\Theta(F - \omega_{s_1}) \Theta(F - \omega_{s_2}) \Theta(\omega_{s_3} - F)}{\omega - (\omega_{s_1} + \omega_{s_2} - \omega_{s_3})} \right] \right). \end{aligned} \quad (2.1.54)$$

¹³Oder Renormalized Brueckner–Hartree–Fock, wenn mit der \mathcal{G} –Matrix gerechnet wird.

Die Dyson–Gleichung (2.1.34) kann auch mit der neu berechneten Selbstenergie (2.1.54) wieder in ein Eigenwertproblem überführt werden. Allerdings steigt hierbei die Dimension der Matrix (2.1.40) explosionsartig an, da nun zu einem Matrixelement a_i eine Vielzahl von Konfiguration mit 2T1L– bzw. 2L1T–Charakter gehören und deshalb anstatt nur eines Matrixelements mit Index i viele Terme der Gestalt $a_i X_0^{s_1, \gamma} X_0^{s_2, \delta} X_0^{s_3, \mu}$ mit zugehörigem Diagonalelement $\omega_{s_1} + \omega_{s_2} - \omega_{s_3}$ in die Matrix eingetragen werden müssen.

Konsequenterweise führt dies dazu, daß die Zahl der Pole der resultierenden Greensfunktion ebenfalls mit jedem Iterationsschritt ansteigen würde und so schon nach wenigen Rechenschritten, die zu diagonalisierenden Matrix eine nicht mehr handhabbare Dimension erreichen würde.

Um dies zu verhindern bedient man sich des "BASIS GENERATED BY LANCZOS"– oder BAGEL–Verfahrens, das mit Erfolg zur Beschreibung endlicher Kerne [Mue88, Mue93a, Mue95a, Har95] und in Kernmaterie [Mue95b, Mue95c] angewandt wurde. Hierbei bedient man sich des Lanczos–Algorithmus [Lan50, Arn51] zur näherungsweise Lösung des Eigenwertproblems (2.1.40). Die Anwendung des Lanczos–Algorithmus ist gleichbedeutend damit, daß man nicht alle Eigenwerte– und Eigenvektoren einer Matrix berechnet, sondern sich auf eine bestimmte Anzahl beschränkt, die, innerhalb einer sinnvoll zu wählenden Toleranz, das tatsächliche Eigenwertspektrum der Matrix gut approximieren (siehe auch Abschnitt 2.2.2).

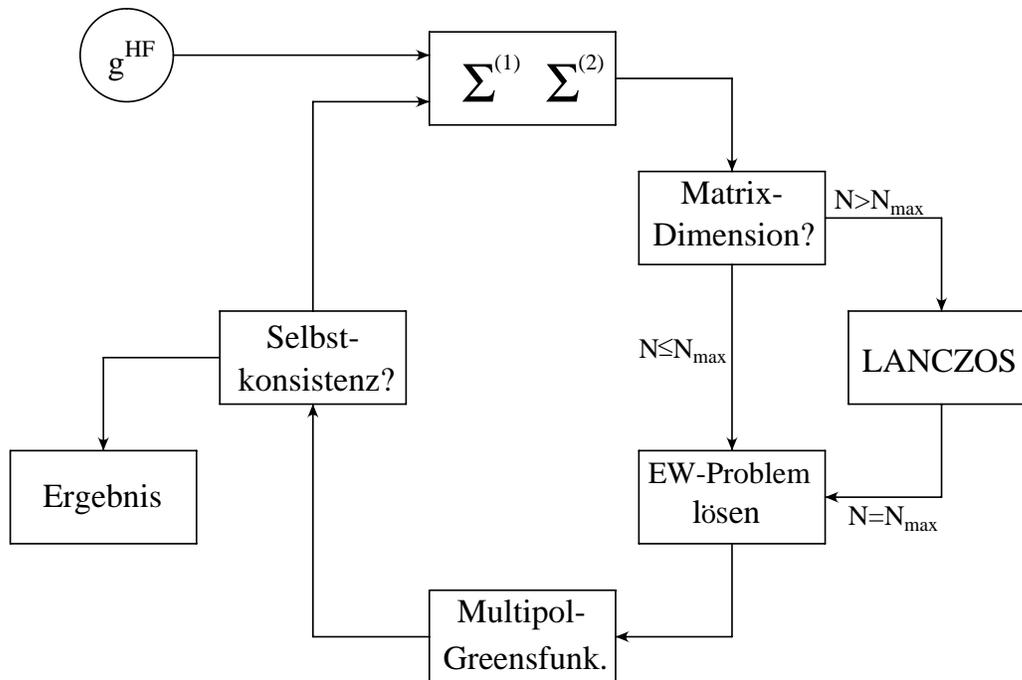


Abbildung 2.1.8: Selbstkonsistentes Iterationsschema des SCGF-Verfahrens.

In der Sprache der Greenschen Funktionen bedeutet dies, daß man sich auf eine Maximalanzahl von Polen in (2.1.51) beschränkt. Hat man eine Obergrenze für die Polanzahl festgelegt, muß man im Verlaufe der Iteration überprüfen, ob die Dimension der Matrix des zu lösenden Eigenwertproblems diese Obergrenze überschreitet, und gegebenenfalls mit Hilfe des Lanczos-Algorithmus genau die geforderte Anzahl von Eigenwerten berechnen. Die Anwendung des Lanczos-Verfahrens sorgt dafür, daß die Anzahl der Pole die gewählte Maximalanzahl nicht überschreitet, wodurch eine voll selbstkonsistente Lösung der gekoppelten Gleichungen (2.1.32) bis (2.1.34) möglich ist. Das Resultat ist dann eine Greensfunktion in BAGEL- (p, q) -Näherung, d. h. neben dem Quasiteilchen-Pol, der in der Nähe der HF-Ein-Teilchenenergie liegt, berücksichtigt man noch p Pole unterhalb und q Pole oberhalb der Fermienergie. Zur besseren Veranschaulichung ist der Iterationszyklus in Abbildung 2.1.8 grafisch dargestellt.

2.2 Adaptive Basisgenerierung

Ein N -Teilchen-System ist vollständig gelöst, wenn man entweder die exakten N -Teilchen-Greensfunktion oder die exakte N -Teilchen-Wellenfunktion angeben kann. Jedoch ist meistens der Konfigurationsraum so groß, daß weder das eine noch das andere möglich ist. Wie man die Ein-Teilchen-Greensfunktion näherungsweise und selbstkonsistent berechnen kann, wurde im vorigen Abschnitt ausgeführt. Im folgenden werden zwei Verfahren vorgestellt, mit denen es möglich ist, die N -Teilchen-Wellenfunktion sukzessive aus einer Anfangskonfiguration aufzubauen. Führt man diese Generierung von Zuständen lange genug durch, erhält man letztlich die exakte Wellenfunktion. Die eigentliche Idee dieser Vorgehensweise besteht jedoch in der Annahme, daß man schon dann eine gute Näherung für die Wellenfunktion erhält, wenn noch nicht alle Komponenten der exakten Wellenfunktion erzeugt wurden.

Eines dieser Verfahren ist die sogenannte "Coupled-Cluster-Method" (CCM), auch $\exp[S]$ -Verfahren genannt [Kue78, Bis78, Zab74]. Das zweite Verfahren beruht im wesentlichen wieder auf dem Lanczos-Algorithmus und wird am Ende dieses Abschnitts kurz zusammengefaßt.

2.2.1 Das $\exp[S]$ -Verfahren

Allgemeine Form der Wellenfunktion

Der Ansatz dieses Verfahrens besteht darin, beginnend mit einem Startzustand die Vielteilchenwellenfunktion zu generieren. Beim $\exp[S]$ -Verfahren werden auf diesem Startzustand systematisch die möglichen $1T1L$ - (Ein-Teilchen-Ein-Loch-), $2T2L$ -, \dots , $nTnL$ -

Anregungen aufgebaut. Das ist möglich, weil jede N -Teilchenwellenfunktion geschrieben werden kann, als [Coe58, Kue62]

$$|\Psi\rangle = e^S |\Phi\rangle , \quad (2.2.1)$$

wenn die Normierungsbedingungen

$$\langle\Phi|\Phi\rangle = 1$$

$$\langle\Phi|\Psi\rangle = 1 \quad (2.2.2)$$

erfüllt sind. Beziehung (2.2.2) ist möglich, wenn $\langle\Phi|\Psi\rangle \neq 0$ angenommen wird, was gleichbedeutend mit einem vernünftig gewählten, nicht etwa orthogonal auf der aktuellen Wellenfunktion stehenden $|\Phi\rangle$ ist. Der Startzustand $|\Phi\rangle$ ist eine Slaterdeterminante aus Ein-Teilchen-Zuständen, wie z. B. die HF-Wellenfunktion. Er läßt sich schreiben als

$$|\Phi\rangle = \prod_{\nu}^N a_{\nu}^{\dagger} |0\rangle . \quad (2.2.3)$$

Das Argument der Exponentialfunktion ist ein Operator, der seinerseits eine Summe von Operatoren ist,

$$S = \sum_{n=1}^N S_n , \quad (2.2.4)$$

wobei für die einzelnen Summanden

$$S_n = \frac{1}{(n!)^2} \sum_{\rho_1 \dots \rho_n} \sum_{\nu_1 \dots \nu_n} a_{\rho_1}^{\dagger} \dots a_{\rho_n}^{\dagger} \langle\rho_1 \dots \rho_n | S_n | \nu_1 \dots \nu_n \rangle a_{\nu_1} \dots a_{\nu_n} \quad (2.2.5)$$

$$\rho_i > F, \nu_i < F$$

gilt. Entwickelt man die Exponentialfunktion in (2.2.1), kann man sehen, daß der Wellenfunktion 1T1L-, 2T2L-, ..., Konfigurationen beigemischt sind. Es ergibt sich

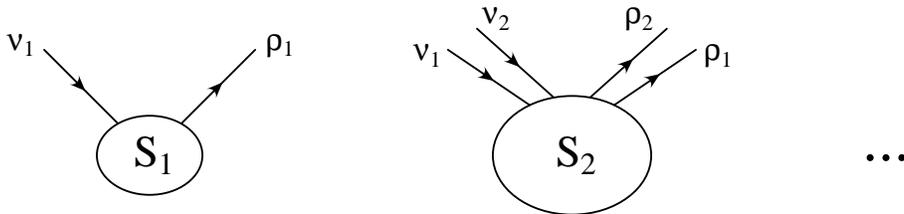


Abbildung 2.2.1: Grafische Darstellung der S -Amplituden

$$\begin{aligned}
|\Psi\rangle &= e^{(S_1+S_2+\dots)} |\Phi\rangle \\
&= \left[1 + (S_1 + S_2 + \dots) + \frac{1}{2} (S_1 + S_2 + \dots)^2 + \dots \right] |\Phi\rangle \\
&= |\Phi\rangle + \sum_{\rho\nu} \underbrace{s_{\rho_1\nu_1}^{(1)} a_{\rho_1}^\dagger a_{\nu_1}}_{1\text{T1L}} |\Phi\rangle + \sum_{\rho_1\rho_2\nu_1\nu_2} \underbrace{s_{\rho_1\rho_2\nu_1\nu_2}^{(2)} a_{\rho_1}^\dagger a_{\rho_2}^\dagger a_{\nu_2} a_{\nu_1}}_{2\text{T2L}} |\Phi\rangle + \dots, \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_{\rho_1\rho_2\nu_1\nu_2} \underbrace{s_{\rho_1\nu_1}^{(1)} s_{\rho_2\nu_2}^{(1)} a_{\rho_1}^\dagger a_{\nu_1} a_{\rho_2}^\dagger a_{\nu_2}}_{2\text{T2L}} |\Phi\rangle + \dots,
\end{aligned} \tag{2.2.6}$$

wobei $s_{\rho_1\nu_1}^{(1)}$ als Kurzform von $\langle \rho_1 | S_1 | \nu_1 \rangle$ usw. zu verstehen ist. Die Amplituden S_n können als sogenannte "Linked Diagrams" (Abbildung 2.2.1) dargestellt werden, was bedeutet, daß sie nicht aus Produkten von unabhängigen Funktionen mit weniger Variablen bestehen [Kue62, Hub57]. Demzufolge kann man sie als echte n -Teilchen-Korrelationen interpretieren.

Lösung durch Projektion

Will man die korrelierte Wellenfunktion $|\Psi\rangle$ und damit Observablen berechnen, ist die Schrödingergleichung

$$H |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle, \tag{2.2.7}$$

zu lösen, die man mit Hilfe des Ansatzes (2.2.1) für $|\Psi\rangle$ umformt in

$$H e^S |\Phi\rangle = E e^S |\Phi\rangle. \tag{2.2.8}$$

Um Gleichungen für die S_n zu erhalten multipliziert man Gleichung (2.2.8) der Reihe nach mit

$$\langle \Phi |, \tag{2.2.9}$$

$$\langle \Phi | a_{\nu_1}^\dagger a_{\rho_1}, \tag{2.2.10}$$

$$\langle \Phi | a_{\nu_1}^\dagger a_{\nu_2}^\dagger a_{\rho_2} a_{\rho_1}, \tag{2.2.11}$$

usw.

Durch die Projektion auf die 1T1L-Konfigurationen, filtert man aus der aktuellen Wellenfunktion die Komponenten heraus, die durch einmalige Anwendung des Operators $s_{\rho_1\nu_1}^{(1)} a_{\rho_1}^\dagger a_{\nu_1}$ entstanden sind. Ähnlich bedeutet die Projektion auf die 2T2L-Konfigurationen die Extraktion der Anteile der Wellenfunktion die durch zweimaliges Anwenden des Operators $s_{\rho_1\nu_1}^{(1)} a_{\rho_1}^\dagger a_{\nu_1}$ oder einmaliges Anwenden des Operators $s_{\rho_1\rho_2\nu_1\nu_2}^{(2)} a_{\rho_1}^\dagger a_{\rho_2}^\dagger a_{\nu_2} a_{\nu_1}$ entstanden sind. Letzteres läßt schon vermuten, daß die Gleichungen für die S -Amplituden nicht-linear und gekoppelt sind.

Zur Herleitung der projizierten Gleichungen multipliziert man zunächst (2.2.8) mit $\langle \Phi |$. Mit (2.2.1) und (2.2.2) erhält man nacheinander

$$\langle \Phi | H e^S | \Phi \rangle = \langle \Phi | E e^S | \Phi \rangle = E \langle \Phi | \Psi \rangle = E . \quad (2.2.12)$$

Nun multipliziert man mit (2.2.10) und ersetzt die Energie durch den eben gewonnenen Ausdruck (2.2.12) was auf

$$\langle \Phi | a_{\nu_1}^\dagger a_{\rho_1} H e^S | \Phi \rangle - \langle \Phi | a_{\nu_1}^\dagger a_{\rho_1} e^S | \Phi \rangle \langle \Phi | H e^S | \Phi \rangle = 0 \quad (2.2.13)$$

führt. Desgleichen verfährt man mit den 2T2L-Anregungen (2.2.11), mit dem Resultat

$$\langle \Phi | a_{\nu_1}^\dagger a_{\nu_2}^\dagger a_{\rho_2} a_{\rho_1} H e^S | \Phi \rangle - \langle \Phi | a_{\nu_1}^\dagger a_{\nu_2}^\dagger a_{\rho_2} a_{\rho_1} e^S | \Phi \rangle \langle \Phi | H e^S | \Phi \rangle = 0 . \quad (2.2.14)$$

Führt man diese Projektionen bis zu einer $nTnL$ -Konfiguration durch, die der Teilchenzahl des Systems entspricht ($n = N$), würden die dazugehörigen Gleichungen genau der Schrödingergleichung entsprechen und die Lösung des Gleichungssystems wäre exakt. Bei realistischen Rechnungen beschränkt man sich jedoch in der Regel auf ein $n \ll N$.

Im folgenden soll angedeutet werden, wie man aus den Gleichungen (2.2.13) und (2.2.14) Beziehungen für die S -Amplituden extrahieren kann. Dazu betrachtet man zunächst den in beiden Gleichungen auftauchenden Term

$$\langle \Phi | H e^S | \Phi \rangle \quad (2.2.15)$$

sowie

$$e^S | \Phi \rangle = | \Phi \rangle + S_1 | \Phi \rangle + S_2 | \Phi \rangle + \frac{1}{2} S_1^2 | \Phi \rangle + \dots \quad (2.2.16)$$

Der Ausdruck $\langle \Phi | H | \Phi \rangle$ ist als Erwartungswert bezüglich des Startzustands bekannt. Geht man von einem Zwei-Teilchen-Operator für die Wechselwirkung aus, kann der Hamiltonoperator als

$$H = \sum_{k_1 k_2} \langle k_1 | T | k_2 \rangle a_{k_1}^\dagger a_{k_2} + \frac{1}{4} \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} \langle k_1 k_2 | \bar{V} | k_3 k_4 \rangle a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger a_{k_4} a_{k_3} \quad (2.2.17)$$

geschrieben werden. Betrachtet man einen Summanden des in S_1 linearen Terms (2.2.6) und beschränkt sich zunächst auf den kinetischen Anteil des Hamiltonoperators, so kann man (2.2.15) mit (2.2.3) umschreiben in

$$\sum_{k_1 k_2} \langle k_1 | T | k_2 \rangle \langle 0 | a_1 \dots a_N a_{k_1}^\dagger a_{k_2} a_{\rho_i}^\dagger a_{\nu_j} a_N^\dagger \dots a_1^\dagger | 0 \rangle s_{\rho_i \nu_j}^{(1)} . \quad (2.2.18)$$

Um den Vakuumerwartungswert der Feldoperatoren zu berechnen bedient man sich des Wick'schen Theorems [Bau68, Rin80]. Da die Feldoperatoren $a_1 \dots a_N$ allesamt auf Teilchen unterhalb der Fermikante wirken, $a_{\rho_i}^\dagger$ aber per Definition ein Teilchen über der Fermikante erzeugt, kann $a_{\rho_i}^\dagger$ nur mit a_{k_2} kontrahiert werden und das Resultat ist einfach

$$\sum_{k_1 k_2} \langle k_1 | T | k_2 \rangle s_{\rho_i \nu_j}^{(1)} \delta_{k_1 \nu_j} \delta_{k_2 \rho_i} . \quad (2.2.19)$$

Aus dieser Überlegung wird auch klar, daß Vakuumerwartungswerte in denen nur der Ein-Teilchen-Operator der zur kinetischen Energie gehört, sowie zu S_1^2, S_2, \dots , gehörende Produkte aus zwei oder mehr Teilchen- und Locherzeugern auftauchen, Null sind.

Etwas schwieriger ist die Situation, wenn man den potentiellen Anteil des Hamiltonoperators betrachtet. Zwar kann man (2.2.15) wieder umschreiben in

$$\frac{1}{4} \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} \langle k_1 k_2 | \bar{V} | k_3 k_4 \rangle \langle 0 | a_1 \cdots a_N a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger a_{k_4} a_{k_3} a_{\rho_i}^\dagger a_{\nu_j} a_N^\dagger \cdots a_1^\dagger | 0 \rangle s_{\rho_i \nu_j}^{(1)}, \quad (2.2.20)$$

aber $a_{\rho_i}^\dagger$ kann nun mit a_{k_3} oder a_{k_4} kontrahiert werden, so daß man eine ganze Reihe von Termen mit unterschiedlichen Wechselwirkungsmatrixelementen proportional zu $s_{\rho_i \nu_j}^{(1)}$ erhält.

Übersichtlicher wird die Situation wieder, wenn man in (2.2.20) die zu S_1^2 bzw. S_2 gehörenden Feldoperatoren und Matrixelemente $s^{(1)} s^{(1)'}$ bzw. $s^{(2)}$ einträgt. Ähnlich wie oben müssen dann wieder die beiden Teilchenerzeuger $a_{\rho_i}^\dagger$ und $a_{\rho_j}^\dagger$ mit den Vernichtern a_{k_3} und a_{k_4} kontrahiert werden. Hieraus wiederum folgt, daß die Zwei-Teilchen-Operatoren, die zur potentiellen Energie gehören keine Verknüpfung mehr zu $S_1^3, S_1 S_2$ und S_3 herstellen können.

Die oben für den Ausdruck $\langle \Phi | H e^S | \Phi \rangle$ angestellten Überlegungen können jetzt auch auf den Term

$$\langle \Phi | a_{\nu_1}^\dagger a_{\rho_1} H e^S | \Phi \rangle \quad (2.2.21)$$

ausgeweitet werden. Die nun zusätzlich links von H auftretenden Feldoperatoren erhöhen nun im Vergleich zu (2.2.18) und (2.2.20) die Anzahl der möglichen Kontraktion im Vakuumerwartungswert der Feldoperatoren. Insbesondere ist für den zur kinetischen Energie gehörenden Term jetzt ein Link zu S_1^2 bzw. S_2 und für den zur potentiellen Energie gehörenden Term ein Link zu $S_1^3, S_1 S_2$ und S_3 möglich. Analoges gilt für die Gleichung die durch Multiplikation mit den 2T2L-Konfigurationen entstanden ist (2.2.14). Nur ist die Anzahl der möglichen Kontraktionen noch größer und es sind Verknüpfungen zu 4T4L-Konfigurationen möglich (S_1^4, \dots, S_4).

Bleiben noch die Terme $\langle \Phi | a_{\nu_1}^\dagger a_{\rho_1} e^S | \Phi \rangle$ und $\langle \Phi | a_{\nu_1}^\dagger a_{\nu_2}^\dagger a_{\rho_2} a_{\rho_1} e^S | \Phi \rangle$. Da in $|\Phi\rangle$ nur Zustände unterhalb der Fermikante besetzt sind, liefert der erste Term nur die zu $a_{\nu_1}^\dagger a_{\rho_1}$ gehörende Amplitude $s_{\rho_1 \nu_1}^{(1)}$ zurück. Ähnlich ergibt sich für den zweiten Term $s_{\rho_1 \nu_1}^{(1)} s_{\rho_2 \nu_2}^{(1)} \pm s_{\rho_1 \rho_2 \nu_1 \nu_2}^{(2)}$. Die allgemeinen Bestimmungsgleichungen für die S -Amplituden sind unübersichtlich und hier wenig hilfreich. Als Beispiel für die Struktur einer solchen Gleichung ist in (2.2.22) die Beziehung angegeben, die sich aus (2.2.13) ergibt.

$$\begin{aligned}
\langle \rho_1 | h | \nu_1 \rangle - \sum_{\nu} \langle \nu | h | \nu_1 \rangle s_{\rho_1 \nu}^{(1)} &+ \sum_{\nu \rho} \langle \nu | T | \rho \rangle s_{\rho_1 \rho \nu_1 \nu}^{(2)} + \frac{1}{2} \sum_{\nu \nu' \rho} \langle \nu \nu' | \bar{V} | \nu \rho \rangle s_{\rho_1 \rho \nu_1 \nu}^{(2)} \\
+ \frac{1}{2} \sum_{\nu \nu' \rho} \langle \nu \nu' | \bar{V} | \nu_1 \rho \rangle s_{\rho \rho_1 \nu \nu'}^{(2)} &+ \frac{1}{2} \sum_{\nu \nu' \rho \rho'} \langle \nu \nu' | \bar{V} | \rho \rho' \rangle \left(s_{\rho' \nu}^{(1)} s_{\rho \rho_1 \nu_1 \nu'}^{(2)} + s_{\rho' \nu_1}^{(1)} s_{\rho \rho_1 \nu_1 \nu'}^{(2)} \right) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\nu \nu' \rho \rho'} \langle \nu \nu' | \bar{V} | \rho \rho' \rangle s_{\rho_1 \rho \rho' \nu_1 \nu \nu'}^{(3)} = 0 \quad (2.2.22)
\end{aligned}$$

Zur Vereinfachung der Schreibweise wurde der Ausdruck

$$\begin{aligned}
\langle \alpha | h | \nu_1 \rangle &= \langle \alpha | T | \nu_1 \rangle + \sum_{\rho} \langle \alpha | T | \rho \rangle s_{\rho \nu_1}^{(1)} + \sum_{\nu} \langle \alpha \nu | \bar{V} | \nu_1 \nu \rangle + \sum_{\rho \nu} \langle \alpha \nu | \bar{V} | \rho \nu_1 \rangle s_{\rho \nu}^{(1)} \\
&+ \sum_{\rho \nu} \langle \alpha \nu | \bar{V} | \rho \nu \rangle s_{\rho \nu_1}^{(1)} + \sum_{\nu \rho \rho'} \langle \alpha \nu | \bar{V} | \rho \rho' \rangle \left(s_{\rho \nu_1}^{(1)} s_{\rho' \nu}^{(1)} + s_{\rho \rho' \nu_1 \nu}^{(2)} \right) \quad (2.2.23)
\end{aligned}$$

eingeführt, in dem α für einen beliebigen Zustand des Modellraums steht. Offensichtlich ist schon der explizite Ausdruck für die Projektion auf 1T1L-Konfigurationen (2.2.22) einigermaßen kompliziert. Deswegen tragen auch die Ausdrücke für die höheren Projektionen nicht zum Verständnis bei. Dies ist auch nicht erforderlich, da man an (2.2.22) schon die wesentlichen Eigenschaften der Gleichungen ablesen kann.

- Die Vakuumerwartungswerte von Feldoperatoren sind verschwunden und es tauchen nur noch Matrixelemente der kinetischen und potentiellen Energie, sowie die s -Amplituden auf.
- Die Gleichungen sind nichtlinear und gekoppelt.
- Die Gleichungen haben eine hierarchische Struktur. Die Beziehungen für die $s^{(n)}$ -Amplituden hängen von den $s^{(n+1)}$ - und $s^{(n+2)}$ -Amplituden ab.

Wenn man die s -Amplituden nicht bis zur höchst möglichen Ordnung ($n = N$) bestimmen will, erfordert der letzte Punkt, daß man die Hierarchie der Gleichungen aufbricht, indem man ab einem bestimmten n_j alle s -Amplituden mit $n > n_j$ gleich Null setzt. Ab welcher Ordnung man die Hierarchie abbrechen kann, ist ad hoc nicht vorhersagbar und muß anhand der Resultate überprüft werden.

Als Ergebnis einer $exp[S]$ -Rechnung erhält man die s -Amplituden bis zur gewählten Ordnung, die einem eine näherungsweise Berechnung der Wellenfunktion über (2.2.1) ermöglichen. Mit ihr können dann alle Observablen gemäß

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (2.2.24)$$

berechnet werden.

2.2.2 LANCZOS-Diagonalisierung

Bei einem makroskopischen Vielteilchensystem ist man in der Regel mit dem Problem konfrontiert, daß der Konfigurationsraum, in dem der Hamiltonoperator diagonalisiert werden soll, sehr groß ist. Eine Diagonalisierung des Hamiltonoperators nimmt dann sehr viel Zeit in Anspruch, wenn die zu diagonalisierende Matrix nicht sogar eine Dimension erreicht, die eine Speicherung der Matrix, selbst auf einem Großrechner, nicht mehr zuläßt.

Reduktion der Matrixdimension

Falls es möglich ist, die Gesamtmatrix mit Dimension N des Hamiltonoperators aufzustellen,

$$H = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1n} \\ h_{21} & h_{22} & & h_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ h_{n1} & \cdots & \cdots & h_{nn} \end{pmatrix}, \quad (2.2.25)$$

wählt man einen geeigneten Startvektor, z. B.

$$v_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.2.26)$$

und generiert durch $n - 1$ -maliges anwenden des Hamiltonians auf diesen Vektor eine Basis aus n Vektoren ($n < N$)

$$\mathcal{B} = \{v_0, H v_0, H^2 v_0, \dots, H^{n-1} v_0\}. \quad (2.2.27)$$

Die orthonormierten Basisvektoren bilden eine Transformationsmatrix V mit mehr Zeilen als Spalten mit deren Hilfe der Hamiltonian gemäß

$$\begin{pmatrix} V^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V \end{pmatrix} \quad (2.2.28)$$

transformiert wird. Das Resultat ist eine Matrix \tilde{H} der Dimension n , die kleiner ist, als die ursprüngliche Dimension von H . Eine Diagonalisierung von \tilde{H} ergibt eine Näherungslösung des Ursprungsproblems. Dieses Verfahren funktioniert insbesondere für die Berechnung der Grundzustandsenergie sehr gut.

BAGEL-Verfahren

Wenn man die Gesamtmatrix des Hamiltonoperators nicht aufstellen kann oder will, kann die Reduktion der Matrixdimension auch eleganter durchgeführt werden, indem man sukzessive Zustände des gesamten Konfigurationsraums erzeugt. Dazu bedient man sich aber nicht einfach der algebraischen Matrix–Vektor–Multiplikation, sondern betrachtet direkt die Wirkung des Hamiltonoperators auf einen physikalischen Startzustand $|\alpha_0\rangle$, der z. B. der HF-Grundzustand oder irgend ein sinnvoller Zustand des Konfigurationsraums sein kann. Wenn $|\alpha_0\rangle$ nicht Eigenzustand zu H ist, was eine notwendige Bedingung für die Durchführbarkeit des Verfahrens ist, erzeugt die Anwendung von H auf $|\alpha_0\rangle$ einen neuen Zustand

$$H |\alpha_0\rangle = |\beta_1\rangle . \quad (2.2.29)$$

Mit

$$|\alpha_1\rangle = |\beta_1\rangle - \langle\alpha_0|\beta_1\rangle |\alpha_0\rangle = H |\alpha_0\rangle - \langle\alpha_0|H|\alpha_0\rangle |\alpha_0\rangle \quad (2.2.30)$$

und geeigneten Normierungskonstanten d_0 und c_1 kann der Zustand $|\beta_1\rangle$ in

$$|\beta_1\rangle = H |\alpha_0\rangle = d_0 |\alpha_0\rangle + c_1 |\alpha_1\rangle \quad (2.2.31)$$

umgeschrieben werden, was bedeutet, daß er in eine Komponente in Richtung von $|\alpha_0\rangle$ und eine Komponente orthogonal dazu zerlegt wurde. Für $|\alpha_0\rangle$ wurde die Normierungskonstante mit d bezeichnet, da $d_0 |\alpha_0\rangle$ gerade der Diagonalanteil von $H |\alpha_0\rangle$ ist. Eine neuerliche Anwendung des Hamiltonoperators auf $|\alpha_1\rangle$ liefert dann einen zu $|\alpha_0\rangle$ und $|\alpha_1\rangle$ orthogonalen Zustand

$$|\alpha_2\rangle = H |\alpha_1\rangle - \langle\alpha_0|H|\alpha_1\rangle |\alpha_0\rangle - \langle\alpha_1|H|\alpha_1\rangle |\alpha_1\rangle . \quad (2.2.32)$$

Mit Beziehung (2.2.31) und reellen Koeffizienten d_0 und c_1 findet man

$$\langle\alpha_0|H|\alpha_1\rangle = \{d_0 \langle\alpha_0| + c_1 \langle\alpha_1|\} |\alpha_1\rangle = c_1 , \quad (2.2.33)$$

womit man zusammen mit den geeigneten Normierungskonstanten d_1 und c_2 Gleichung (2.2.32) umformuliert in

$$H |\alpha_1\rangle = c_1 |\alpha_0\rangle + d_1 |\alpha_1\rangle + c_2 |\alpha_2\rangle . \quad (2.2.34)$$

Diese Prozedur wird für jeden neu erzeugten Zustand wiederholt, so daß man einen Satz von BAGEL–Vektoren $|\alpha\rangle$ erzeugen kann, für die allgemein die Rekursionsformel

$$H |\alpha_i\rangle = c_i |\alpha_{i-1}\rangle + d_i |\alpha_i\rangle + c_{i+1} |\alpha_{i+1}\rangle \quad (2.2.35)$$

gilt [Lan50, Wil65]. Der Hamiltonoperator soll nun in der Basis der BAGEL–Vektoren diagonalisiert werden. Da die Rekursionsformel nur von zwei Außerdiagonalelementen abhängt und die Werte der Matrixelemente $\langle \alpha_j | H | \alpha_k \rangle$ durch die entsprechende Multiplikation der Rekursionsformel von links mit $\langle \alpha_j |$ schon so gut wie bestimmt sind, erhält man eine tridiagonale, symmetrische Matrix der Form

$$\begin{pmatrix} d_0 & c_1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ c_1 & d_1 & c_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & c_2 & d_2 & c_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & c_{n-2} & d_{n-2} & c_{n-1} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & c_{n-1} & d_{n-1} \end{pmatrix}, \quad (2.2.36)$$

wobei n die Anzahl der erzeugten BAGEL–Vektoren ist. Eine Diagonalisierung dieser tridiagonalen Matrix ergibt ein Näherungslösung für die Diagonalisierung des Hamiltonoperators im Raum aller Konfigurationen des Vielteilchensystems.

Der Vorteil dieser Vorgehensweise ist, daß man nie die Gesamtmatrix des Hamiltonoperators speichern muß, sondern immer nur höchstens drei der BAGEL–Vektoren gleichzeitig, aus deren Vorfaktoren sich dann auch sofort die entsprechenden Einträge der zu diagonalisierende tridiagonale Matrix ergeben. Will man hingegen eine Näherung für die Wellenfunktion des Systems in der ursprünglichen Basis, müssen für die Rücktransformation alle BAGEL–Vektoren bekannt sein. Dies ist für die Berechnung von Erwartungswerten, wie z. B. der Grundzustandsenergie, aber nicht nötig.

Zum Schluß sei noch angemerkt, daß sich das eben erklärte BAGEL–Verfahren mathematisch nicht von der oben besprochenen Reduktion der Matrixdimension unterscheidet. Technisch gesprochen besteht aber ein Unterschied darin, ob der ursprüngliche Hamiltonoperator schon in Matrixform vorliegt und die Diagonalisierung durch Reduktion beschleunigt werden soll, oder der Hamiltonoperator sowieso noch aufgestellt werden muß und eventuell die zu erwartende Dimension so groß ist, daß das BAGEL–Verfahren sinnvoller zu sein scheint. Darüberhinaus kann die Reduktion der Matrixdimension für jede beliebige Matrix durchgeführt werden, die in Form von numerischen Werten vorliegt. Hingegen muß im Fall des BAGEL–Verfahrens ein Operator (in diesem Fall H) und seine Wirkung auf die Zustände des Modellraums bekannt sein.

Kapitel 3

Modelle und Modellräume

Da bisher nur nüchtern der theoretische Apparat vorgestellt wurde, soll hier näher erläutert werden, an welchen physikalische Problemstellungen die verschiedenen Vielteilchenmethoden getestet werden. Insbesondere der Formalismus Greenscher Funktionen hat seinen Ursprung in der Kernphysik und wurde schon in vielen Variationen, auch unter Berücksichtigung relativistischer Effekte oder mesonischer Freiheitsgrade, auf endliche Kerne und Kernmaterie angewandt, weswegen er auch hier zunächst zur Beschreibung kernphysikalischer Probleme herangezogen wird.

Das $exp[S]$ -Verfahren hingegen wurde ursprünglich in der theoretischen Chemie zur Beschreibung komplizierter Vielelektronensysteme entwickelt, wird aber schon seit vielen Jahren auch zur Beschreibung von Atomkernen verwendet. Dies ist in der nichtrelativistischen Theorie möglich, da es abgesehen von der komplizierteren Wechselwirkung in der Kernphysik, keinen prinzipiellen Unterschied in der Behandlung des Fermions Elektron und des Fermions Nukleon gibt.

Der in dieser Arbeit beschrittene Weg findet seine Motivation im empirisch erfolgreichen Schalenmodell. So werden ausschließlich Modelle mit diskreten Zuständen untersucht und, sofern möglich, die Näherungsmethoden mit Grenzfällen des untersuchten Problems verglichen, die eine exakte Lösung zulassen.

3.1 Schalenmodell

3.1.1 Motivation

Die Entdeckung des Schalenmodells und die damit erstmals erfolgreiche mikroskopische Beschreibung von Kernen, kann als Geburtsstunde aller mikroskopischen Kernstruktur-

rechnungen angesehen werden. Nachdem die Wichtigkeit der Spin–Bahn–Kopplung in der Kernphysik erkannt wurde, konnte mit Hilfe der diskreten Schalenmodell–Zustände erstmals die intrinsische Struktur von Atomkernen plausibel erklärt werden. Die einfache Struktur des Schalenmodells rief wenig später auch die Konfigurations–Mischungs–Methoden ins Leben, die das Grundprinzip aller in dieser Arbeit verwendeten Verfahren sind.

Zur Beschreibung eines Atomkerns muß der typische Hamiltonian mit Zwei–Teilchen–Wechselwirkung

$$H = \sum_{k_1 k_2} \langle k_1 | T | k_2 \rangle a_{k_1}^\dagger a_{k_2} + \frac{1}{4} \sum_{k_1 k_2 k_3 k_4} \langle k_1 k_2 | \bar{V} | k_3 k_4 \rangle a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger a_{k_4} a_{k_3} \quad (3.1.1)$$

in einer Schalenmodell–Basis, wie sie in Abbildung 3.1.1 dargestellt ist, diagonalisiert werden. Für einen Kern wie ^{16}O , für den in HF–Näherung die Zustände bis einschließlich $0p_{\frac{1}{2}}$ besetzt sind, bedeutet eine Diagonalisierung der Restwechselwirkung im Schalenmodell, daß auch höhere Zustände teilweise besetzt sein können, was eine Konfigurations–Mischung darstellt.

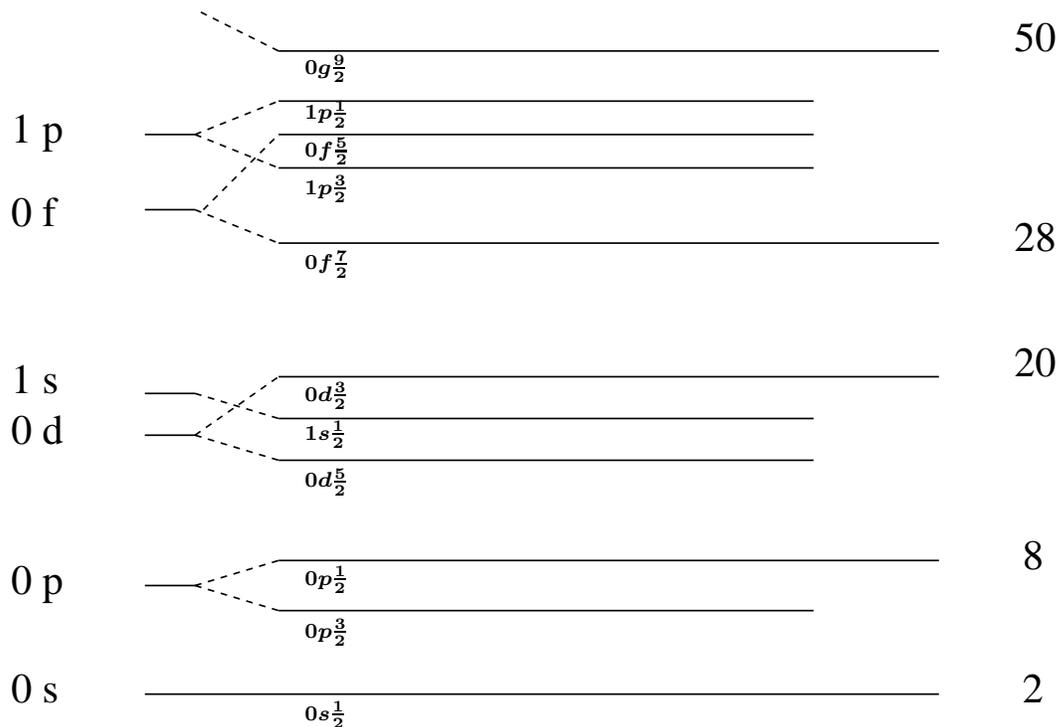


Abbildung 3.1.1: Diskrete Schalenmodell–Zustände mit Spin–Bahn–Kopplung. Rechts sind die magischen Zahlen der Schalenabschlüsse angegeben.

Die Anzahl der Zustände, die man bei einer solchen Konfigurations-Mischung berücksichtigt, definieren den Konfigurationsraum, der bei 16 Teilchen und nur wenigen Zuständen oberhalb der Fermienergie, schon eine nicht mehr handhabbare Größe erreicht. Deshalb ist es bei einer solchen Rechnung notwendig sich entweder auf eine Klasse von Anregungen (etwa 2T1L-Beimischungen im Formalismus Greenscher Funktionen oder maximal 2T2L-Anregungen beim $exp[S]$ -Verfahren) oder einen kleineren bzw. einfacheren Modellraum zu beschränken.

3.1.2 Sauerstoff 16

In dieser Arbeit wurde, aufbauend auf früheren Untersuchungen [Mue93a, Har95], Sauerstoff 16 mit dem Formalismus der Greenschen Funktionen und modernen, die Isospin-symmetrie der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung verletzenden Potentialen untersucht. Einzelheiten zu dieser Symmetrieverletzung werden in Kapitel 5 erörtert, da hier nur die Modellräume diskutiert werden sollen.

Für Sauerstoff liegt es nahe, in einer Schalenmodell-Basis wie der des dreidimensionalen Harmonischen Oszillators, zu arbeiten. Deswegen wurde ein beschränkter Konfigurationsraum angenommen, in dem Zustände bis zur $1p0f$ -Schale Berücksichtigung finden. In der Berechnung der Greensfunktion wurden gemäß Abschnitt 2.1.5 nur 2T1L- und 2L1T-Beiträge zur Selbstenergie zweiter Ordnung zugelassen. Die zu den diskreten Zuständen korrespondierenden 1T-Greensfunktionen können so, aufbauend auf den entsprechenden BHF-Greensfunktionen, berechnet und Observablen wie die Grundzustandsenergie, Besetzungszahlen und Energieverschiebungen zwischen Proton- und Neutron-Zuständen angegeben werden.

Da das Schalenmodell in der Literatur hinlänglich diskutiert wurde und keine den Modellraum betreffenden Schwierigkeiten auftreten, soll hier nicht weiter ins Detail gegangen werden.

3.2 Paarwechselwirkung

Trotz des Erfolgs des Schalenmodells zusammen mit dem Modell unabhängiger Teilchen, gibt es in der Kernphysik Phänomene, die nicht auf diese Weise erklärt werden können. Neben kollektiven Vibrationszuständen, die mit Hilfe einer Random-Phase-Approximation beschrieben werden können, gibt es auch nicht-kollektive Effekte, die nur im Superflüssigkeits- oder Paarungsmodell beschrieben werden können. Beispiele für solche Effekte sind

- die Energielücke im Ein–Teilchen–Anregungsspektrum von Kernen mit gerader Nukleonenzahl,
- der even–odd–Effekt, also die geringere Bindungsenergie pro Nukleon in einem Kern ungerader Nukleonenzahl im Vergleich zu einem geraden Kern,
- ein tiefliegendes 2^+ –Niveau mit Drehimpuls $I = 2$ in Kernen gerader Nukleonenzahl, das weder Rotations– noch Ein–Teilchen–Niveau ist, sondern eine Quadrupolschwingung.

Da alle Kerne mit gerader Nukleonenzahl den Grundzustandsdrehimpuls $I_0 = 0$ haben und bei fast allen ungeraden Kernen I_0 durch den Einteilchendrehimpuls des ungeraden Nukleons bestimmt wird, liegt die Vermutung nahe, daß die Bildung von zu $I_0 = 0$ gekoppelten Paaren innerhalb einer j –Schale energetisch bevorzugt ist. Im Grundzustand des Kerns werden deshalb alle Nukleonen abgepaart sein, bis auf ein möglicherweise vorhandenes ungerades. Bei geraden Kernen kann so die Energielücke im Anregungsspektrum als die Energie interpretiert werden, die nötig ist, um ein Paar aufzubrechen.

Aufgrund der erwähnten Phänomene, aber auch weil ein einfaches Modell für die Paarwechselwirkung existiert, ist es sinnvoll, die durch die Paarbildung hervorgerufenen Effekte näher zu untersuchen. Für den Fall einer reinen Paarkraft lautet der entsprechende Hamiltonoperator

$$H = \sum_k \varepsilon_k a_k^\dagger a_k - |G| \sum_{kk' > 0} a_k^\dagger a_{\bar{k}}^\dagger a_{\bar{k}'} a_{k'} . \quad (3.2.1)$$

Der erste Term ist ein diagonaler Ein–Teilchen–Anteil, wie z. B. die HF–Ein–Teilchen–Energien. Der zweite Term liefert einen Energiegewinn $|G|$, wenn durch die Umpositionierung

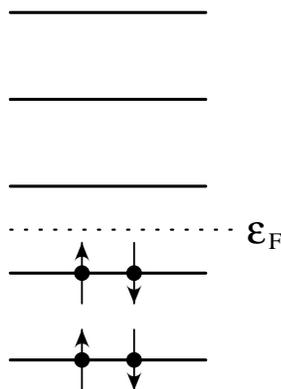


Abbildung 3.2.1: Modellraum für einen reinen Paarhamiltonoperator (Impulsraum). Dargestellt ist der HF–Grundzustand.

eines zu $I = 0$ gekoppelten Paares zwei Vielteilchenzustände ineinander überführt werden können. Dieser Paarhamiltonoperator kann in einem sehr einfachen diskreten Modellraum untersucht werden, der in Abbildung 3.2.1 dargestellt ist. Zusätzlich kann angenommen werden, daß die Ein-Teilchen-Zustände äquidistant sind. Wichtig ist, daß jeder diskrete Zustand nur mit einem Teilchenpaar besetzt werden kann. Ein Aufbrechen der Paare ist mit dem speziellen Paarhamiltonoperator (3.2.1) nicht möglich. Daraus folgt, daß die Dynamik des Systems auf eine Verschiebung von Paaren im Modellraum beschränkt ist. Der Effekt des Verschiebens von Paaren ist, daß man bei $|G| \neq 0$ eine nichtverschwindende Besetzungswahrscheinlichkeit für alle Zustände des Modellraums erhalten kann, da $|G|$ dafür sorgt, daß Ein-Teilchen-Zustände über der Fermikante energetisch abgesenkt werden. Die Größenordnung von $|G|$ muß dabei mit dem Levelabstand der diskreten Zustände vergleichbar sein, da die Grenzfälle $|G| = 0$ oder $|G| \rightarrow \infty$ nicht interessant sind.

Die Tatsache, daß nur Paare von Nukleonen bewegt werden können sorgt für einen relativ kleinen Konfigurationsraum, so daß eine exakte Lösung des Problems für eine nicht allzu große Teilchenzahl durch direkte Diagonalisierung des Hamiltonoperators möglich ist. Darüberhinaus hat man die überaus erfolgreiche BCS-Theorie [BCS57] an der Hand, die speziell für das Paarproblem entwickelt wurde.

Auch die in dieser Arbeit untersuchten Vielteilchenmethoden können gut am Paarhamiltonoperator getestet werden und die Existenz einer exakten Lösung durch direkte Diagonalisierung oder durch den auf gruppentheoretischen Überlegungen basierenden Richardson-Ansatz [Ric61, Che73, Ric77], ermöglicht eine sinnvolle Beurteilung der mit den diversen Näherungsmethoden erzielten Ergebnisse.

3.3 Das Hubbard-Modell

Das Hubbard-Modell ist ein einfacher Ansatz zur Beschreibung des Verhaltens von Elektronen in einem Festkörper [Yos96]. Befinden sich Atome in einem Kristallgitter, spüren die Valenzelektronen den Einfluß der Nachbaratome. Dadurch werden die Orbitale der Valenzelektronen im Vergleich zu denen freier Atome modifiziert was für den Zusammenhalt des Festkörpers verantwortlich ist. In Metallen und Halbleitern können sich diese Valenzelektronen im gesamten Kristallverbund bewegen und zu Leitungselektronen werden.

Im Hubbard-Modell werden die Atome auf Gitterpunkte reduziert und das dynamische Verhalten nur durch die an den Gitterpunkten lokalisierten Orbitale der Valenzelektronen beschrieben.

Bezeichnet man ein solches lokalisiertes Elektronenorbital mit $\phi_j(r)$, wobei j der Index eines Gitterpunktes ist, so kann man den Hamiltonoperator, der die Wechselwirkung der

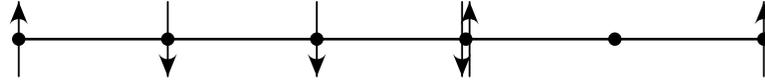


Abbildung 3.3.1: Modellraum für das eindimensionale Hubbard-Modell (Ortsraum). Dargestellt ist eine mögliche Konfiguration.

Valenzelektronen beschreibt, als

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} (a_{\uparrow i}^{\dagger} a_{\uparrow j} + a_{\downarrow i}^{\dagger} a_{\downarrow j}) + U \sum_i a_{\uparrow i}^{\dagger} a_{\uparrow i} a_{\downarrow i}^{\dagger} a_{\downarrow i} \quad (3.3.1)$$

angeben. Dieser Hamiltonoperator wird auch "Hubbard-Hamiltonian" genannt. Der Operator $a_{\uparrow i}^{\dagger}$ ($a_{\downarrow i}^{\dagger}$) erzeugt ein Elektron mit Spin up (Spin down) im Orbital $\phi_i(r)$ am Gitterpunkt i . Im Hubbard-Modell beschränkt man sich zusätzlich auf ein einziges Leitungsband, d. h. man nimmt an, daß es pro Gitterplatz nur zwei Orbitale gibt und zwar je eines für Spin up und Spin down. Das hat zur Folge, daß im Hubbard-Modellraum, der für das eindimensionale Hubbard-Modell in Abbildung 3.3.1 dargestellt ist, jeder Gitterplatz mit keinem, einem, oder zwei (zu $S = 0$ gekoppelten) Elektronen besetzt sein kann.

Der erste Term in (3.3.1) beschreibt das Hüpfen der Elektronen innerhalb des Gitters.

$$H_1 = \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} (a_{\uparrow i}^{\dagger} a_{\uparrow j} + a_{\downarrow i}^{\dagger} a_{\downarrow j}) . \quad (3.3.2)$$

H_1 verschiebt ein Elektron vom Gitterplatz j auf den Gitterplatz i mit der zugehörigen Stärke t_{ij} . Um eine numerische Rechnung durchführen zu können betrachtet man meistens ein endliches Gitter mit periodischen Randbedingungen. Dieses Gitter sollte, um einen Festkörper realistisch beschreiben zu können, dreidimensional sein. In der Regel untersucht man aus technischen Gründen aber ein- oder zweidimensionale Gitter. Der Summationsindex $\langle ij \rangle$ soll andeuten, daß das Hüpfen der Elektronen nur für bestimmte Abstände zwischen den beiden Gitterpunkten möglich ist. Im Allgemeinen beschränkt man sich auf nächste Nachbarn, also den Fall $i = j \pm 1$ (Nearest-Neighbour-Hopping). Eine solche Beschränkung stellt keine drastische Näherung dar, da es unmittelbar einleuchtet, daß nicht benachbarte Atomorbitale einen äußerst geringen Überlapp haben. Dieses "Nearest-Neighbour-Hopping" ist für ein zweidimensionales Gitter in Abbildung 3.3.2 dargestellt.

Aufgrund der periodischen Randbedingungen des Gitters, kann H_1 mit Hilfe einer Fouriertransformation diagonalisiert werden. In einem zweidimensionalen $N \times N$ -Gitter kann man den Operator

$$c_{\sigma \vec{n}}^{\dagger} = \frac{1}{N} \sum_{n_1 n_2} e^{i \frac{2\pi}{N} (n_1 j_1 + n_2 j_2)} a_{\sigma \vec{j}}^{\dagger} \quad (3.3.3)$$

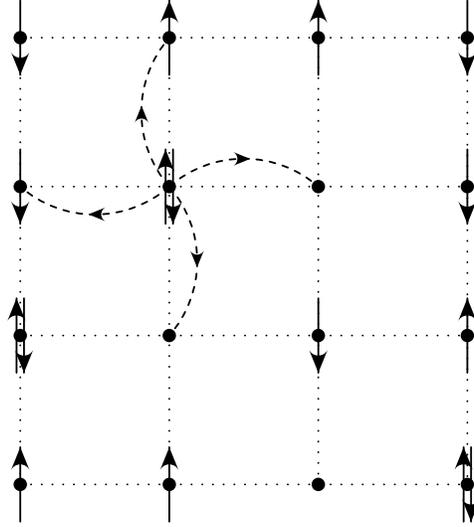


Abbildung 3.3.2: *Nearest-Neighbour-Hopping im zweidimensionalen Hubbard-Modell.*

definieren, wobei man eine Vektornotation für die Gitterplätze, $\vec{j} = (j_1, j_2)$, benützt hat und σ für den Spin (\uparrow oder \downarrow) steht. Mit $c_{\sigma\vec{n}}^\dagger$ hat H_1 im Impulsraum die einfache Gestalt

$$H_1 = \sum_{\sigma\vec{n}} \varepsilon_{\vec{n}} c_{\sigma\vec{n}}^\dagger c_{\sigma\vec{n}} , \quad (3.3.4)$$

wobei $\varepsilon_{\vec{n}}$ die Ein-Teilchen-Energie ist, die zu einem Zustand gehört, den der Operator $c_{\sigma\vec{n}}^\dagger$ erzeugt. Zur weiteren Vereinfachung wird häufig angenommen, daß t_{ij} gleich einer Konstante t ist, was in einem Gitter aus identischen Atomen auch sinnvoll erscheint. In diesem Fall erhält man für die Ein-Teilchen-Energien

$$\varepsilon_{\vec{n}} = 2t \left[\cos\left(\frac{2\pi}{N}n_1\right) + \cos\left(\frac{2\pi}{N}n_2\right) \right] . \quad (3.3.5)$$

Das Ein-Teilchen-Spektrum, also die Eigenwerte von H_1 , sind für den Fall $t = 1$ und ein 4×4 -Gitter in Abbildung 3.3.3 dargestellt.

Der zweite Term aus (3.3.1) beschreibt die Coulomb-Abstoßung zwischen zwei Elektronen, die sich auf dem selben Gitterplatz befinden.

$$H_2 = U \sum_i a_{\uparrow i}^\dagger a_{\uparrow i} a_{\downarrow i}^\dagger a_{\downarrow i} \quad (3.3.6)$$

Dabei ist zu beachten, daß das Pauliprinzip dafür sorgt, daß nur Elektronen mit entgegengesetztem Spin auf ein und demselben Gitterplatz sitzen können. Die elektromagnetische Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen, die sich nicht am selben Gitterpunkt befinden, wird vernachlässigt.

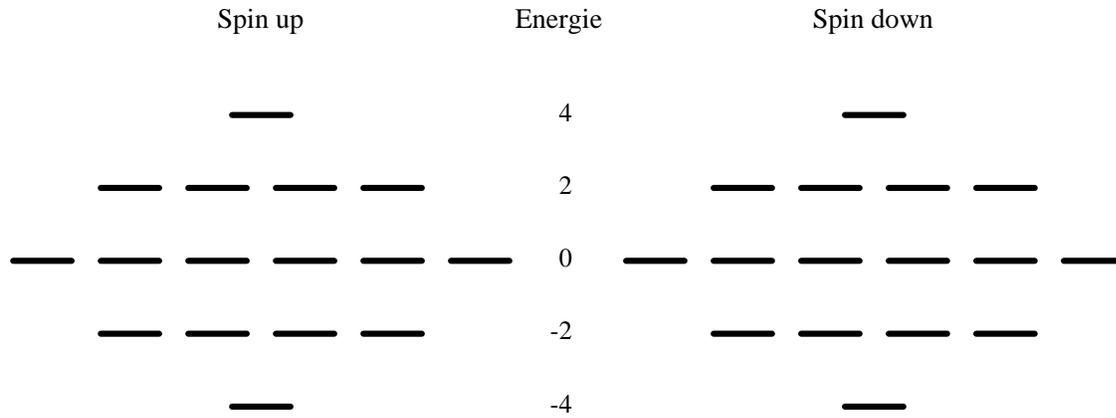


Abbildung 3.3.3: Ein-Teilchen-Spektrum des 4×4 Hubbard-Modells für $U = 0$.

Die beschriebenen Restriktionen auf ein Leitungsband, "Nearest-Neighbour-Hopping" mit konstantem t und Repulsion nur zwischen zwei auf dem selben Gitterplatz sitzenden Elektronen, wird auch als 'minimales Hubbard-Modell' bezeichnet und alle Untersuchungen in dieser Arbeit beschränken sich auf diesen Fall. Mit Hilfe des Operators $n_{\sigma i} = a_{\sigma i}^\dagger a_{\sigma i}$ ist der minimale Hubbard-Hamiltonoperator gegeben durch

$$H = t \sum_i \left(a_{\uparrow i}^\dagger a_{\uparrow i \pm 1} + a_{\downarrow i}^\dagger a_{\downarrow i \pm 1} \right) + U \sum_i n_{\uparrow i} n_{\downarrow i} . \quad (3.3.7)$$

Obwohl der minimale Hubbard-Hamiltonoperator relativ einfach aussieht, hat man mit allen Schwierigkeiten der Vielteilchentheorie zu kämpfen. So sieht man sich mit der Ununterscheidbarkeit der Teilchen und einem stark mit der Anzahl der Gitterpunkte anwachsenden Konfigurationsraum konfrontiert. Darüberhinaus kommutieren die Ein- und Zwei-Teilchenoperatoren des Hamiltonoperators nicht, so daß man es mit einem hochkorrelierten Grundzustand zu tun hat. In sehr kleinen Modellräumen kann das ein- und zweidimensionale minimale Hubbard-Modell exakt diagonalisiert werden. Solche kleinen Systeme sind aber weit davon entfernt, das Verhalten eines makroskopischen Festkörpers auch nur annähernd zu beschreiben. Für das eindimensionale Hubbard-Modell existiert ein von der Größe des Gitters unabhängige exakte Lösung, der sogenannte Bethe-Ansatz [Lie68, Yos96].

Kapitel 4

Technische Aspekte

In diesem Kapitel sollen nähere Angaben zu den verwendeten Potentialen und den resultierenden effektiven Wechselwirkungen gemacht werden. Darüberhinaus werden einige mathematische und numerische Details erläutert, die abgesehen von der zu Grunde liegenden Physik zur Realisierung von bestimmten Rechnungen notwendig waren. Zum einen handelt es sich hierbei um möglichst geschickt gewählte Arten, physikalische Vielteilchenzustände darzustellen. Zum anderen werden Methoden zur Optimierung von Computerprogrammen, die insbesondere bei der Realisierung von Rechnungen für das zweidimensionale Hubbard-Modell unerlässlich waren, erörtert.

4.1 G -Matrix

Um mit Hilfe des Formalismus der Greenschen Funktionen eine realistische Kernstrukturrechnung für Sauerstoff 16 durchführen zu können, sollen hier aufbauend auf Abschnitt 2.1.4 noch einige Details über die effektive Wechselwirkung angegeben werden. Effektive Wechselwirkungen werden eingesetzt, damit die stark repulsiven Komponenten der Nukleon-Nukleon-(NN)-Wechselwirkung bei kurzen Relativabständen nicht zu divergenten Matrixelementen führen. Die G -Matrix ist Lösung der Bethe-Goldstone-Gleichung

$$\mathcal{G}_{ab,cd}^\omega = \bar{V}_{ab,cd} + \frac{1}{2} \sum_{mn > \varepsilon_F} \bar{V}_{ab,mn} \frac{1}{\omega - \varepsilon_m - \varepsilon_n + i\eta} \mathcal{G}_{mn,cd}^\omega \quad (4.1.1)$$

und stellt eine solche effektive Wechselwirkung dar. \bar{V} ist hier die nackte Wechselwirkung und ab, \dots, mn sind Schalenmodellindizes. In Operatorform geschrieben ergibt sich (4.1.1) zu

$$\mathcal{G}(\omega) = \bar{V} + \bar{V} \frac{Q_{\text{mod}}}{\omega - Q_{\text{mod}} T Q_{\text{mod}}}, \quad (4.1.2)$$

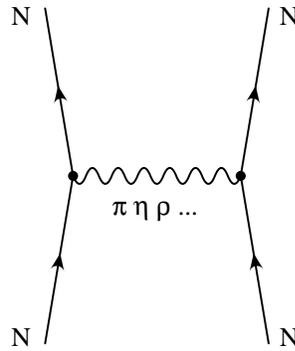


Abbildung 4.1.1: *Mesonaustausch von Nukleonen.*

wobei T der kinetische Energieoperator ist. Q_{mod} ist hier, im Gegensatz zu einer BHF-Rechnung, nicht nur der Paulioperator, sondern ein von der Wahl des Modellraums abhängiger Projektionsoperator. Da die Kernstrukturrechnung im Modellraum eine Beimischung von $2T1L$ - und $2L1T$ -Konfigurationen bis zur $1p0f$ -Schale zuläßt, sorgt der Projektionsoperator Q_{mod} dafür, daß diese explizit in die Kernstrukturrechnung einbezogenen Korrelationen nicht schon bei der Berechnung der G -Matrix berücksichtigt werden. Diese Doppelzählung wird vermieden, wenn man für den Projektionsoperator

$$Q_{\text{mod}} |mn\rangle = \begin{cases} 0 & \text{für } m \text{ oder } n \text{ aus } 0s \text{ oder } 0p \\ 0 & \text{für } m \text{ und } n \text{ aus } 1s0d \text{ oder } 1p0f \\ |mn\rangle & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.1.3)$$

wählt. Mit diesem Projektionsoperator kann nun mit jedem NN-Potential eine G -Matrix berechnet werden. In der Regel wird für die nackte NN-Wechselwirkung ein Boson-Austausch-Potential gewählt. Die Nukleonen wechselwirken dabei über den Austausch von Mesonen. Dieser Vorgang ist schematisch in Abbildung 4.1.1 dargestellt. Die Theorie der NN-Wechselwirkung durch Mesonaustausch [Mac89] hat eine lange Tradition und ermöglicht die Bereitstellung von Potentialen, die sowohl die wichtigsten Eigenschaften des Deuterons als auch die NN-Streuphasen hochgenau reproduzieren.

Hingegen wurden erst in den letzten Jahren realistische NN-Wechselwirkungen entwickelt, die in der Lage sind Proton-Proton- und Proton-Neutron-Daten simultan zu beschreiben. Diese neuen Potentiale berücksichtigen eine explizite Verletzung der Isospinsymmetrie in der NN-Wechselwirkung. Dies geschieht dadurch, daß beim Ein-Pion-Austausch der Massendifferenz zwischen π^0 und π^\pm Rechnung getragen wird und man nicht etwa eine gemittelte Pion-Masse annimmt. Darüberhinaus wird auch die unterschiedliche Masse von Neutron und Proton berücksichtigt, was zu unterschiedlichen Matrixelementen führt, je nachdem ob zwei Neutronen oder zwei Protonen ein Meson austauschen.

Innerhalb des Ein–Meson–Austauschmodells führt dies zu einem kleinen Anteil der NN–Wechselwirkung, der die Ladungssymmetrie verletzt.

Drei solcher modernen Potentiale wurden in der vorliegenden Arbeit zur Berechnung der Energieverschiebungen zwischen Neutron– und Proton–Ein–Loch–Zuständen bezogen auf ^{16}O und zur Berechnung der totalen Grundzustandsenergie verwendet [Har99]. Im einzelnen sind das die Potentiale CDBonn96 [Mac96], das hochgenaue CDBonn99 [Mac00] und das Argonne V_{18} –Potential [Wir95]. Die wichtigsten charakteristischen Größen dieser Potentiale sind im Anhang A angegeben.

4.2 Besetzungszahldarstellung

In kleineren Modellräumen können sowohl der Paarhamiltonoperator als auch der Hubbard–Hamiltonoperator exakt diagonalisiert werden. Obwohl die Sachverhalte in beiden Modellen verschieden sind, können in beiden Fällen die Zustände des Konfigurationsraums auf sehr ähnliche Art und Weise dargestellt werden. Dazu betrachtet man zunächst erneut den Modellraum für den Paarhamiltonoperator (3.2.1). Eigenschaft dieses Modellraums war, daß jeder diskrete HF–Zustand nur mit genau einem oder keinem Nukleonpaar besetzt werden kann. Die Vielteilchen–Zustände in der HF–Basis können deswegen mit Nullen und Einsen gekennzeichnet werden, je nachdem welche diskreten Zustände in der vorliegenden Konfiguration besetzt oder unbesetzt sind.

Denkt man der Einfachheit halber an einen Modellraum mit vier diskreten Zuständen, in den zwei Nukleonpaare auf alle möglichen Arten verteilt werden sollen, so ist leicht einzusehen, daß

$$|1100\rangle \quad |1001\rangle \quad |0110\rangle \quad |0101\rangle \quad |1010\rangle \quad |0011\rangle \quad (4.2.1)$$

eine sinnvolle Darstellung der sich ergebenden sechs Zustände ist. In dieser Darstellung ist es einfach die Matrix des Paarhamiltonoperators (3.2.1) aufzustellen und zu diagonalisieren. Auch die Anzahl der möglichen Konfigurationen ist leicht aus dem entsprechenden Binomialkoeffizienten zu bestimmen. Da für die reine Paarkraft immer zwei Nukleonen zusammengefaßt werden, kann man den Paarhamiltonoperator noch für eine relativ große Zahl von Teilchen exakt diagonalisieren.

Etwas anders liegt der Fall für das Hubbard–Modell. Wie erwähnt kann in diesem Fall jeder Gitterplatz mit einem oder zwei Fermionen besetzt werden. Da der Hubbard–Hamiltonoperator keinen Spinflip zuläßt, ist es sinnvoll, die Elektronen nach Spin up und Spin down zu unterteilen. Dies führt in analoger Weise zu einer zweizeiligen Besetzungszahldarstellung.

$$\begin{array}{c} \uparrow \\ \downarrow \end{array} \quad \left| \begin{array}{c} 1100 \\ 1100 \end{array} \right\rangle \quad \left| \begin{array}{c} 1010 \\ 1001 \end{array} \right\rangle \quad \left| \begin{array}{c} 0110 \\ 0101 \end{array} \right\rangle \quad \dots \quad (4.2.2)$$

Allerdings ist hier, bei gleicher Teilchenzahl, die Anzahl der Konfigurationen sehr viel größer als beim Paarhamiltonoperator, was eine exakte Diagonalisierung nur für einen kleineren Modellraum erlaubt.

Ergebnis einer exakten Diagonalisierung sind, neben der Grundzustandsenergie, Entwicklungskoeffizienten c_i mit deren Hilfe sich die exakte Vielteilchenwellenfunktion als

$$|\Psi\rangle = c_1 \begin{vmatrix} 1100 \\ 1100 \end{vmatrix} + c_2 \begin{vmatrix} 1010 \\ 1001 \end{vmatrix} + c_3 \begin{vmatrix} 0110 \\ 0101 \end{vmatrix} + \dots \quad (4.2.3)$$

schreiben läßt. Der Antisymmetrie der Wellenfunktion wird Rechnung getragen, indem man sich eine Reihenfolge definiert, in der die Fermionen aus dem Vakuum erzeugt werden,

$$\begin{vmatrix} 1100 \\ 1010 \end{vmatrix} = a_{2\uparrow}^\dagger a_{1\uparrow}^\dagger a_{3\downarrow}^\dagger a_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle = -a_{1\uparrow}^\dagger a_{2\uparrow}^\dagger a_{3\downarrow}^\dagger a_{1\downarrow}^\dagger |0\rangle, \quad (4.2.4)$$

hier also nach ansteigendem Teilchenindex und Spin down vor Spin up. Die zu wählende Konvention ist beliebig. Wichtig ist nur, daß eine einmal gewählte Reihenfolge im Verlauf der gesamten Rechnung beibehalten wird. Letzteres ist insbesondere beim Hubbard-Modell und periodischen Randbedingungen von großer Wichtigkeit, da der rechte Nachbar des N -ten Gitterplatzes in diesem Fall der erste Gitterplatz ist, und somit Matrixelemente des kinetischen Energieoperators mit einem zusätzlichen Phasenfaktor behaftet sein können.

Da die Wirkung eines Operators in zweiter Quantisierung, sei es der Hamiltonoperator oder der Operator e^S , auf einen solchen in Besetzungszahldarstellung gegebenen Zustand leicht zu bestimmen ist, eignet sich diese Darstellung auch für eine Diagonalisierung mit dem BAGEL-Verfahren oder eine $exp[S]$ -Rechnung.

4.3 Programmiertechniken

Eines der Ziele der Vielteilchentheorie ist es, eine möglichst große Anzahl von Teilchen sinnvoll zu beschreiben. Dies ist in der Festkörperphysik essentiell, da ein Kristall aus einer makroskopischen Anzahl von Atomen besteht. Aber auch mittelschwere bis schwere Kerne wie Eisen oder Blei, die verglichen mit einem Kristall noch aus einer überschaubaren Anzahl von Konstituenten aufgebaut sind, stellen den Physiker vor größte Schwierigkeiten, will er für ein solches System eine Kernstrukturrechnung durchführen.

Obwohl die Leistungsfähigkeit moderner Großrechner kontinuierlich steigt, wird es immer eine "kritische" Teilchenzahl geben, die eine optimale Nutzung der Rechnerkapazitäten erfordert. Obwohl man in vielen Fällen auf parallelisierte und speicheroptimierte Programmbibliotheken für Standardprozeduren (Matrix-Vektor-Operationen, iterative Löser

für Gleichungssysteme) zurückgreifen kann, ist man oft gezwungen selbst Programme zu entwickeln, mit denen die zur Verfügung stehenden Ressourcen bestmöglichst genutzt werden können.

Inwieweit eine solche Optimierung möglich ist, hängt stark von der Problemstellung ab und muß im Einzelnen geprüft werden. In dieser Arbeit wurde speziell für die Berechnung des Hubbard-Modells mit dem SCGF-Verfahren ein speicheroptimiertes und größtenteils parallelisiertes Programm entwickelt. Deshalb soll im folgenden anhand einiger Beispiele auf die nötigen Programmier Techniken eingegangen werden.

4.3.1 Speicheroptimierung

Zur selbstkonsistenten Lösung des SCGF-Verfahrens muß im Verlaufe der Iteration häufig die Matrix aufgestellt werden, die sich aus der Überführung der Dyson-Gleichung in ein Eigenwertproblem ergibt. Numerisch gesehen zerfällt die Matrix (2.1.40) in vier relevante Blöcke, die in (4.3.1) schematisch dargestellt sind.

$$\left(\begin{array}{cccc|cccc} \varepsilon_1 & 0 & \cdots & 0 & c_1^1 & c_2^1 & \cdots & c_n^1 \\ 0 & \varepsilon_2 & \cdots & 0 & c_1^2 & c_2^2 & \cdots & c_n^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \varepsilon_m & c_1^m & c_2^m & \cdots & c_n^m \\ \hline c_1^1 & c_1^2 & \cdots & c_1^m & E_1 & 0 & \cdots & 0 \\ c_2^1 & c_2^2 & \cdots & c_2^m & 0 & E_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_n^1 & c_n^2 & \cdots & c_n^m & 0 & 0 & \cdots & E_n \end{array} \right) \quad (4.3.1)$$

Während in (4.3.1) die Zahl der Ein-Teilchen-Energien ε_i im oberen linken Block der Matrix zu Beginn bekannt sind, ergeben sich die 2T1L- und 2L1T-Energien im Block unten rechts und die dazugehörigen gewichteten Matrixelemente c_j^i in den beiden übrigen Blöcken erst im Verlauf der Rechnung. Da sich die Gesamtdimension der Matrix im Verlauf der Iteration stark ändern kann, ist es wenig sinnvoll bei Programmstart einen geschätzten Speicherbedarf für alle Einträge der Matrix zu reservieren. Diese Vorgehensweise führt zwangsläufig dazu, daß man entweder zu wenig Speicher reserviert hat, was zum Programmabbruch führt, oder man Speicher verschwendet hat, den man dann für andere Daten nicht mehr verwenden kann. Deswegen sollte nur der tatsächliche Speicherbedarf zur Laufzeit alloziert werden. Dieser tatsächliche Speicherbedarf ist bei einer $N \times N$ -Matrix jedoch in vielen Fällen nicht $N^2 \times 8 \text{ Byte}$ ¹, wenn man bestimmte Eigenschaften der Matrix ausnützt. Insbesondere ist die hier relevante Matrix (4.3.1) symmetrisch und schwach besetzt. Die Symmetrie der Matrix erlaubt es, nur die Diagonale und alle darüber

¹Auf den meisten Rechnerarchitekturen wird eine doppeltgenaue reelle Zahl mit 8 Byte dargestellt.

liegenden Zahlen zu speichern (obere Dreiecksmatrix), was den Speicherbedarf auf $\frac{N(N+1)}{2}$ Zahlen reduziert. Sei A eine solche Dreiecksmatrix, so ergibt sich die ursprüngliche Matrix zu $C = A^T + A$, wenn man die Diagonaleinträge der Matrix A mit $\frac{1}{2}$ multipliziert hat, und man kann jede gewünschte Operation mit der Gesamtmatrix durchführen.

Da die Matrix schwach besetzt ist, d. h. viele ihrer Einträge Null sind, kann man nur die nichtverschwindenden Matrixeinträge und deren Zeilenposition speichern. Dies führt allerdings erst dann zu einer Speicherersparnis, wenn mehr als ein Drittel der Einträge verschwinden, da mit der Zeilenposition eine zusätzliche Größe gespeichert werden muß. Die Kompression einer Dreiecksmatrix soll anhand von Tabelle 4.3.1 verdeutlicht werden. Dort ist oben beispielhaft eine Matrix angegeben. Diese Matrix wird zeilenweise von links nach rechts durchlaufen und wann immer ein nicht vernachlässigbarer Zahlenwert auftaucht wird dieser (in $A[i]$) zusammen mit der Zeilenposition (in $Z[i]$) gespeichert. Zusätzlich wird, wenn das Ende einer Zeile erreicht ist, die aufaddierte Anzahl der nichtverschwindenden Einträge (in $N[i]$) gespeichert. Die einzutragenden Werte sind unten in der Tabelle für jede Zeile angegeben. Die Matrixeinträge, die zugehörigen Zeilenpositionen und die Anzahl der relevanten Einträge pro Zeile sind jetzt in eindimensionalen Feldern ge-

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 3 & 7 & 0 & 0 & -8 \\ & 2 & 0 & 0 & -9 & 0 & -2 & 0 \\ & & -3 & 0 & 0 & -2 & 0 & 4 \\ & & & -4 & 1 & 0 & 0 & 3 \\ & & & & \ddots & & & \vdots \end{pmatrix}$$

Matrixeintrag	$A[i]$	1	3	7	-8	2	-9	-2	-3	2	4	-4	...
Zeilenposition	$Z[i]$	1	4	5	8	2	5	7	3	6	8	4	...
Anzahl $\neq 0$	$N[j]$				4			7			11		
Zeile	j		1			2			3			4	

Tabelle 4.3.1: Zeilenweise Kompression einer schwach besetzten Dreiecksmatrix.

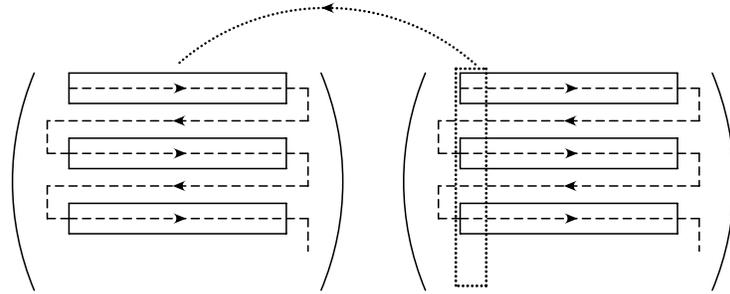


Abbildung 4.3.1: *Multiplikation von zwei zeilenweise komprimierten Matrizen.*

speichert. Eine solche Kompression ist analog für jede beliebige Matrix durchführbar und führt bei vielen verschwindenden Einträgen zu einer erheblichen Reduktion des Speicherbedarfs. Allerdings ist die Darstellung einer Matrix durch die drei eindimensionalen Felder komplizierter, was zur Folge hat, daß manche Rechenoperationen erschwert werden.

Will man z. B. zwei beliebige zeilenweise komprimierte Matrizen miteinander multiplizieren, braucht man von der rechts stehenden für jeden Rechenschritt eine ganze Spalte, die man sich Eintrag für Eintrag aus den komprimierten Zeilen herausuchen muß. Dieser Sachverhalt ist in Abbildung 4.3.1 dargestellt. Die Blöcke stellen die Matrixeinträge pro Zeile dar. Die Pfeile in und zwischen den Blöcken deuten an, in welcher Reihenfolge die Einträge der Matrix gespeichert wurden. Man erkennt, daß man aus jedem Block der rechts stehenden Matrix pro Rechenschritt nur einen Eintrag benötigt. Deswegen muß man jeden Block dieser Matrix nach einem nicht verschwindenden Eintrag an einer bestimmten Position durchsuchen.

Es ist daher günstiger, wenn bei einer Matrix–Matrix–Multiplikation die rechts stehende Matrix spaltenweise komprimiert ist. Dies ist in Abbildung 4.3.2 dargestellt. Es ist leicht einzusehen, daß man nun immer zwei Blöcke übereinanderlegen kann und eine

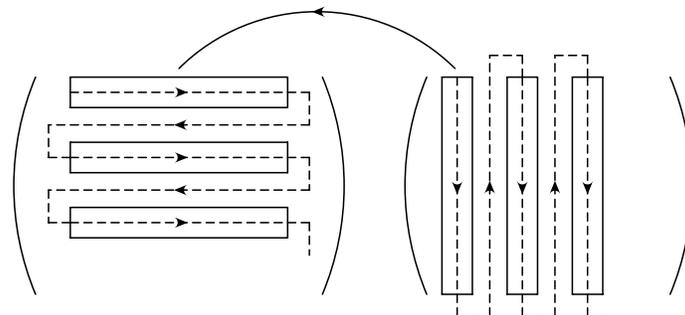


Abbildung 4.3.2: *Multiplikation einer zeilenweise komprimierten mit einer spaltenweise komprimierten Matrix.*

Multiplikation lediglich dann durchzuführen hat, wenn die Zeilenpositionen gleich sind, was gleichbedeutenden mit nichtverschwindenden Matrixeinträgen in beiden Matrizen ist. Natürlich ist es nicht immer möglich jede Matrix in der geschicktesten Kompressionsart abzuspeichern, jedoch ist es lohnend die abzuarbeitenden Rechenschritte auch unter diesem Gesichtspunkt zu betrachten.

Nützt man bei der speziellen Matrix (4.3.1) die Symmetrie aus indem man nur das obere Dreieck komprimiert abspeichert, handelt man sich damit eine gemischte Darstellung der Gesamtmatrix ein, da die Transponierte einer zeilenweise komprimierten Matrix folgerichtig spaltenweise komprimiert ist. Konsequenz davon ist, daß Speicherreduktion unter Umständen einen erhöhten Rechenaufwand zur Folge hat. Im vorliegenden Fall muß man das in Kauf nehmen, da die Dimension der speziellen Matrix so groß werden kann, daß man gezwungen ist, den Speicher bestmöglichst zu optimieren.

Deshalb soll zum Schluß noch anhand der Zahlenbeispiele in Tabelle 4.3.2 illustriert werden, mit welchen Größenordnungen man es bei Rechnungen für das zweidimensionalen Hubbard-Modell zu tun hat. Dort ist in der ersten Spalte die Gesamtzahl der Konfigurationen für das exakte Hubbard-Modell bzw. die Zahl der im SCGF-Verfahren initial auftauchenden 2T1L- und 2L1T-Konfigurationen angegeben, was gleichbedeutend mit der Dimension der jeweiligen Matrix ist. In der zweiten Spalte ist der Speicherbedarf der Gesamtmatrix ohne Speicheroptimierung angegeben. In den Spalten drei und vier ist der erforderliche Speicherbedarf bei Berücksichtigung der Symmetrie bzw. bei Berücksichtigung von Symmetrie und anschließender Kompression angegeben. Offensichtlich ist es unmöglich auch nach bestmöglicher Komprimierung die exakte Matrix überhaupt zu speichern geschweige denn irgendwelche Rechenoperationen mit ihr auszuführen. Bei einem zur Verfügung stehenden Hauptspeicher von 8 Gigabyte, über den der Rechner verfügt, auf dem sämtliche Untersuchungen durchgeführt wurden, stößt man auch beim SCGF-

	Konfigurationen	gesamt	Symmetrie	Sym. + Kompr.
exakte Matrix	8.23×10^{19}	5.42×10^{40} Byte	3.39×10^{39} Byte	1.65×10^{20} Byte
SCGF-Matrix	9.45×10^5	7.14×10^{12} Byte	4.46×10^{11} Byte	1.89×10^6 Byte

Tabelle 4.3.2: Vergleich des Speicherbedarfs der exakten und der SCGF-Matrix für unterschiedliche Kompressionsarten. Die Angaben beziehen sich auf das 6×6 -Hubbard-Modell bei halber Füllung.

Verfahren an die Grenzen der Ressourcen. Nur die bestmöglich komprimierte Matrix hat einen handhabbaren Speicherbedarf, was verdeutlichen soll, daß in diesem Fall die oben dargelegte Speicheroptimierung eine solche Rechnung überhaupt erst möglich macht.

4.3.2 Parallelisierung

Abgesehen von der Speicheroptimierung kann man auf einer Multiprozessor-Architektur die Performance eines Programms durch Parallelisierung weiter verbessern. Bei Operationen der linearen Algebra, der Integration einer Funktion über ein Intervall und vielen anderen mathematischen Problemstellungen ist es relativ einfach mehrere Prozessoren gleichzeitig zu nutzen. Die Laufzeit von Programmabschnitten, die parallelisiert werden können, ist dann im Idealfall umgekehrt proportional zur Zahl der Prozessoren. Aufgrund der erforderlichen Thread-Synchronisationen, der Datenkommunikation zwischen den auf verschiedenen Prozessoren laufenden Programmteilen und nicht zuletzt weil ein Großrechner in der Regel von einer Vielzahl von Benutzern in Anspruch genommen wird, ist es in der Realität unmöglich diese ideale Laufzeitverkürzung zu erreichen. Trotzdem kann man mit nicht allzu großem Aufwand eine beachtliche Verbesserung der Performance erzielen, weswegen auf einige Details dieser Programmier Techniken und die Hardware eingegangen werden soll.

Rechnerarchitekturen

Bei Rechnern mit vielen Prozessoren unterscheidet man zwischen der "Distributed Memory (DM)" und der "Shared Memory (SM)" Architektur. Während bei der DM Architektur ein Cluster von Prozessoren über Speicher verfügt, auf den nur die Mitglieder des Clusters zugreifen können, gibt es bei der SM Architektur einen Hauptspeicher, den alle Prozessoren benützen. Bei einer DM Architektur müssen daher die einzelnen Prozesse über Kommunikatoren Daten und Synchronisationsabfragen austauschen. Das gängigste Hilfsmittel zur parallelen Programmierung in einer DM Architektur ist das sogenannte "Message Passing Interface (MPI)", das die nötigen Kommunikatoren (und vieles mehr) zur Verfügung stellt.

Da es sich bei dem zur Verfügung stehenden Rechner um eine SM Architektur handelt (Tabelle 4.3.3) und die vorzunehmenden Parallelisierungen nicht sehr kompliziert sind, wurde jedoch nicht mit MPI gearbeitet, sondern eine auf Compilerdirektiven basierende Parallelisieretechnik gewählt. Wenn man keine Kommunikatoren einsetzt, die zu einem definierten Zeitpunkt ihre Daten an einen anderen Prozess schicken, sind die Speicherzugriffszeiten der einzelnen Prozesse zwar kürzer, jedoch kann es leicht passieren, daß die einzelnen Prozessoren gleichzeitig den gleichen Speicherbereich verändern, was dann

Prozessoren	16 (64-bit PA-RISC PA-8200)
Taktrate	200 MHz
Cache	2 MB Instruktionen, 2 MB Daten, write back, direct mapped
Hauptspeicher	8 GB
Peakleistung	12.8 GFlops/s
Bandbreite Mem/CPU	8 × 8 nicht blockierender Crossbar mit 16 × 960 MB/s
Latency	~ 500ns

Tabelle 4.3.3: *Hardwareprofil des verwendeten HP V-Class V2200 Rechners*

natürlich zu unsinnigen Ergebnissen führt. Deswegen muß man vor einer Parallelisierung sicherstellen, daß die Programmteile auf keinen Fall den selben Speicherbereich verändern und sie keine Anfangsdaten benötigen, die ein anderer Prozess erst noch errechnen muß. Dies insbesondere weil mit den Compilerdirektiven z. B. eine Schleife parallelisiert werden kann, ohne daß der Compiler überprüft, ob das wirklich fehlerfrei möglich ist.

Parallele Schleifen

Aufgrund der oben dargelegten Eigenschaften der Parallelisierung mit Compilerdirektiven, muß sorgfältig geprüft werden, ob eine Schleife parallelisierbar ist, oder nicht. Beispiele für nicht parallelisierbare Schleifen sind Schleifen in denen

- vor Beginn der Schleife die Zahl der Iterationsschritte nicht bekannt ist (While-Schleifen),
- Variablen konditional aufaddiert werden,
- Funktionen aufgerufen werden, die Variablen außerhalb der Schleife verändern.

Hingegen ist eine Schleife immer dann parallelisierbar, wenn sie in mehrere Unterschleifen aufgeteilt werden kann, wobei die Reihenfolge, in der die Unterschleifen abgearbeitet werden, beliebig ist. Standardbeispiel für eine parallelisierbare Schleife ist die äußere Schleife bei einer Matrix–Vektor–Multiplikation.

$$v_i = \sum_{j=1}^n a_{ij}u_j \quad (i = 1, \dots, n) \quad (4.3.2)$$

Der i -te Eintrag des neu berechneten Vektors \vec{v} hängt nur von der i -ten Zeile der Matrix a ab, so daß es gleichgültig ist, ob man die n Einträge des Vektors v der Reihe nach

berechnet oder nicht. Jeder der zur Verfügung stehenden Prozessoren kann so einen Teil der Vektoreinträge berechnen, da diese über den Index des Felds $v[i]$ in verschiedene Speicherbereiche geschrieben werden.

Natürlich können auch kompliziertere Schleifen parallelisiert werden, da die Vorgehensweise aber immer auf dem gleichen Prinzip beruht, soll hier nicht näher darauf eingegangen werden. Angemerkt sei noch, daß man bei ineinander verschachtelten Schleifen immer versuchen sollte, die äußerste Schleife zu parallelisieren, damit möglichst wenig Kommunikation erforderlich ist. Außerdem sollte man in diesem Fall nie mehr als eine der Schleifen parallelisieren. Wird eine der Schleifen auf die Anzahl der Prozessoren verteilt, ist die Leistung des Systems bereits optimal ausgelastet und eine weitere Parallelisierung würde Ressourcen anfordern, die es nicht gibt. Virtuelle Threads und hohe Kommunikationsverluste wären die Folge.

Parallele Tasks

Eine der Parallelisierung von Schleifen ähnliche, aber etwas universeller anwendbare Technik ist die taskparallele Programmierung. Auch hierbei wird ausgenutzt, daß Programmteile die nicht gegenseitig voneinander abhängen, gleichzeitig ausgeführt werden können. Die Parallelisierung von Schleifen ist im Prinzip nichts anderes als ein Spezialfall paralleler Tasks, deren Verwaltung der Compiler übernimmt. Während bei parallelen Schleifen wie der Matrix–Vektor–Multiplikation jeder Task dieselben Rechenschritte durchführt, können bei der taskparallelen Programmierung die einzelnen Prozesse völlig unterschiedliche Rechenoperationen durchführen.

So kann z. B. ein Task mit einem Parametersatz einen Least–Square–Fit durchführen und so zu einen Vektor \vec{v} aus bestmöglichen Koeffizienten gelangen, während ein anderer Task gleichzeitig eine Matrix A invertiert. Nach Beendigung der Tasks wäre dann das lineare Gleichungssystem $A \vec{u} = \vec{v}$ mit $\vec{u} = A^{-1} \vec{v}$ bereits gelöst. Im Gegensatz zu parallelen Schleifen, ist es so mit taskparalleler Programmierung möglich, gleichzeitig verschiedene Rechenoperationen ablaufen zu lassen. Bei dieser Vorgehensweise muß allerdings für jeden Task ein eigener Quellcode geschrieben werden, was die Programmierung etwas umständlicher macht. Auch ist darauf zu achten, daß jeder Task nur seine privaten Variablen verändert und daß globale Variablen nur als Input verwendet werden. Darüberhinaus ist es bei taskparalleler Programmierung schwieriger die einzelnen Aufgaben gleichmäßig auf die einzelnen Prozessoren zu verteilen. Der Vorteil der Parallelisierung kann fast völlig zunichte gemacht werden, wenn ein Task sehr viel länger zur Bewältigung seiner Rechenoperationen benötigt, als die anderen. Der weitere Programmablauf wird nämlich erst dann fortgesetzt, wenn alle Tasks beendet sind. Während man bei Schleifen durch einfaches dividieren der Gesamtiterationszahl durch die Anzahl der benützten Prozessoren

zu einer gleichmäßigen Verteilung gelangt, ist es manchmal nötig Laufzeitmessungen der Prozeduren in den unterschiedlichen Tasks durchzuführen, um eine asymmetrische Verteilung der Rechenzeiten auf die Einzelnen Prozessoren zu vermeiden. Bei sorgfältiger Vorgehensweise kann aber gerade bei der taskparallelen Programmierung, insbesondere wenn die einzelnen parallelen Blöcke jeweils viel Arbeit übernehmen können, eine beachtliche Laufzeitverkürzung des Gesamtprogramms erzielt werden.

Performance

Inwieweit ein Programm parallelisiert werden kann, hängt selbstverständlich von den durchzuführenden Rechenoperationen ab. Es wird nie möglich sein, ein Programm komplett zu parallelisieren, da die Ergebnisse der verschiedenen parallelen Blöcke schließlich irgendwann zusammengefügt werden müssen. So wird man sich immer auf einzelne Regionen des Programms beschränken, die gut parallelisiert werden können. Da, wie schon erwähnt, die parallelen Programmteile miteinander kommunizieren müssen, gibt eine Performanceanalyse am besten Aufschluß darüber, ob und inwieweit es sinnvoll ist das Programm zu parallelisieren. Einige Laufzeitmessungen für das zweidimensionale Hubbard-Modell für unterschiedliche maximale Polanzahlen und daraus resultierenden Dimensionen der SCGF-Matrix sind in Tabelle 4.3.4 zusammengestellt. Es zeigt sich, daß schon für die kleinste Matrixdimension ein Zeitgewinn durch Parallelisierung erzielt werden kann. Bei Laufzeiten von wenigen Minuten ist das allerdings nicht sonderlich relevant. In den ersten beiden Zeilen sind die Laufzeiten für vier bzw. acht Prozessoren praktisch gleich. In diesen Fällen genügt es, das Programm mit vier Prozessoren arbeiten zu lassen, da das Plus an Rechenkapazität durch die nötige Kommunikation zunichte gemacht wird. In

Modell	Polzahl	Dim. Mat.	1 CPU t [h]	4 CPU t [h]	8 CPU t [h]
4×4	32	37226	0.4	0.2	0.2
4×4	48	129749	4.2	1.9	2.0
6×6	72	393627	34.5	12.7	8.9

Tabelle 4.3.4: *Programmlaufzeiten in Abhängigkeit der Anzahl von Prozessoren für unterschiedliche maximale Polanzahlen und daraus resultierenden Matrixdimensionen. Alle Angaben beziehen sich auf das zweidimensionale Hubbard-Modell mit $U = 4$ und $t = 1$.*

der letzten Zeile ist auch zwischen vier und acht Prozessoren ein Performancegewinn zu erkennen. Dieser fällt aber nicht so groß aus wie der zwischen einem und vier Prozessoren. Ursache hierfür ist neben der erwähnten Kommunikation auch die Tatsache, daß nur die rechenintensivsten Programmteile für acht Prozessoren optimiert wurden. Trotzdem konnte die Laufzeit in diesem Fall fast um ein Viertel verringert werden. Für noch größere Dimensionen der SCGF-Matrix in der Größenordnung einer Million kann man mit acht oder auch 16 Prozessoren letztlich eine Laufzeitverkürzung von einigen Tagen gegenüber einem Prozessor erreichen, was den Zeitaufwand der Parallelisierung rechtfertigt.

Bleibt noch hinzuzufügen, daß es sich bei den in Tabelle 4.3.4 angegebenen Zeiten um Richtwerte handelt. Die Laufzeiten des Programms sind stark von der Auslastung des Rechners und damit im Endeffekt von der Zahl der Nutzer abhängig. In ungünstigen Fällen können die vom Programm angeforderten Ressourcen nicht zur Verfügung gestellt werden, was zu starken Schwankungen der gemessenen Laufzeiten führen kann.

Kapitel 5

Ergebnisse

Nachdem in den vorangegangenen Kapiteln die notwendige Theorie und einige Aspekte der Modelle und Modellräume besprochen, sowie einige programmiertechnischen Details beleuchtet wurden, sollen nun die erzielten Ergebnisse im Einzelnen dargelegt werden. Die Resultate gliedern sich hierbei nach dem untersuchten physikalischen Problem da ein Ziel dieser Arbeit darin besteht, die Vor- und Nachteile der unterschiedlichen Verfahren gegeneinander abzuwägen. Letzteres ist besonders beim Hubbard-Modell und der Paarwechselwirkung interessant, da es dort exakt lösbare Spezialfälle gibt. Bei der Untersuchung von Sauerstoff 16 hingegen ist eher von Interesse inwieweit mit Hilfe moderner Potentiale Energieverschiebungen zwischen Proton- und Neutronzuständen erklärt werden können.

5.1 Verletzung der Ladungssymmetrie in Sauerstoff

5.1.1 Nolen-Schiffer Anomalie und starke Wechselwirkung

Ein experimentell beobachtbares Phänomen der Kernphysik sind Energiedifferenzen zwischen den korrespondierenden Zuständen in Kernen mit gleichem Gesamtisospin aber verschiedener Isospinprojektion. Nimmt man an, daß die starke Wechselwirkung zwischen zwei Protonen identisch der Wechselwirkung zwischen zwei Neutronen ist, sollte man die Energieverschiebungen in solchen Spiegelkernen vollständig mit Hilfe der elektromagnetischen Wechselwirkung zwischen den Nukleonen erklären können. Im Wesentlichen also mittels der Coulomb-Repulsion zweier Protonen. Da man aus Experimenten genaue Daten über die Ladungsverteilung von Kernen hat, ist es möglich phänomenologische NN-Wechselwirkungen anzugeben (z. B. Skyrme forces), mit denen es möglich ist, die gemessenen Ladungsverteilungen zu reproduzieren. Wenn also die starke NN-Wechselwirkung

zwischen zwei Protonen gleich der zwischen zwei Neutronen ist, sollten man mit diesen phänomenologischen Wechselwirkungen in der Lage sein, die Coulomb-Verschiebung der Energien zu erklären. HF-Rechnungen für solche Wechselwirkungen unterschätzen aber die experimentellen Werte der Energiedifferenzen um typischerweise sieben Prozent. Die Tatsache, daß es offenbar nicht möglich ist solche Energieverschiebungen nur mit der Coulomb-Repulsion zwischen den Protonen zu beschreiben, ist auch unter dem Namen Nolen-Schiffer-Anomalie bekannt [Nol69].

Die Existenz dieser Anomalie legt also eine explizite Brechung der Isospinsymmetrie in der starken Wechselwirkung nahe. Unter einer Verletzung der Isospinsymmetrie in der starken Wechselwirkung versteht man die Tatsache, daß sich die Proton-Proton-, Neutron-Proton- und Neutron-Neutron-Wechselwirkungen auch dann noch voneinander unterscheiden, wenn alle elektromagnetischen Effekte herausgerechnet wurden. Ein Spezialfall dieser Isospinsymmetrieverletzung ist die Verletzung der Ladungssymmetrie mit der nur der Unterschied zwischen Proton-Proton- (pp) und Neutron-Neutron- (nn)-Wechselwirkungen gemeint ist. Die Hauptursache für die Brechung der Isospinsymmetrie liegt in der Massendifferenz zwischen geladenem und neutralem Pion während die Verletzung der Ladungssymmetrie zum Großteil auf die Massendifferenz zwischen Neutron und Proton zurückzuführen ist.

Wie schon bei der Diskussion der G -Matrix (Abschnitt 4.1) erwähnt wurde, sind in den letzten Jahren eine Reihe von realistischen NN-Wechselwirkungen entwickelt worden, die in der Lage sind experimentelle pp - und pn -Daten sehr genau zu beschreiben [Sto94, Wir95, Mac96]. Neben der Berücksichtigung der Massendifferenzen zwischen geladenem und neutralem Pion sowie Proton und Neutron werden in solchen Wechselwirkungen noch zusätzliche, die Ladungssymmetrie verletzende Terme miteinbezogen. Diese Terme werden benötigt, um die empirischen Unterschiede der Streulängen und effektiven Reichweiten für pp - und nn -Streuung im 1S_0 -Zustand richtig zu beschreiben. In dieser Arbeit wurde mit drei solchen modernen NN-Wechselwirkungen versucht, die Nolen-Schiffer-Anomalie in Sauerstoff 16 zu erklären. Weitere Details zu den Potentialen CDBonn96, CDBonn99 und Argonne V_{18} finden sich im Anhang A.

5.1.2 Berechnung der Coulomb-Verschiebung

Am Beispiel des Kerns ^{16}O sollen die Einflüsse von Korrelationen und die Auswirkungen der Ladungssymmetrieverletzung der Potentiale auf die Coulomb-Verschiebung der Energie untersucht werden. Eine Möglichkeit dies zu tun, wäre eine selbstkonsistente BHF-Rechnung durchzuführen um dann die Coulomb-Energieverschiebungen aus den Ein-Teilchen-Energien von Protonen und Neutronen zu extrahieren. Diese Vorgehensart erweist sich aber als ungünstig, da solche BHF-Rechnungen die Radien der Ladungs-

dichteverteilung unterschätzen. Das hat zur Folge, daß der führende Coulomb–Beitrag zur Energieverschiebung überschätzt wird. Außerdem sind BHF–Rechnungen besser zur Beschreibung kurzreichweitiger Korrelationen geeignet und nicht in der Lage, eine realistische Verteilung der Ein–Teilchen–Stärke vorauszusagen, die aus langreichweitigen Korrelationen resultiert.

Da eine selbstkonsistente BHF–Rechnung also einige Nachteile hat, wird hier eine andere Herangehensweise bevorzugt. Zunächst wählt man Ein–Teilchen–Wellenfunktionen aus HF–Rechnungen, die eine gute Vorhersage der empirischen Ladungsverteilung zulassen. Diese Wellenfunktionen werden dann zur Berechnung des führenden Coulomb–Beitrags benützt. Außerdem können mit ihnen Korrekturen wie die Einflüsse der endlichen Protonengröße, die elektromagnetische Spin–Bahn–Wechselwirkung, Auswirkungen der Massendifferenz zwischen Proton und Neutron auf die kinetische Energie, sowie Vakuumpolarisationseffekte berücksichtigt werden. Die Beiträge aufgrund der eben erwähnten Effekte werden hier nicht berechnet, sondern sind einer Arbeit von H. Sato [Sat76] entnommen.

Die Einbeziehung von Korrelationen erfolgt in zwei Schritten. Um die kurzreichweitigen Korrelationen zu berücksichtigen, wird zunächst die G –Matrix berechnet (vergleiche Abschnitt 4.1). Dabei muß die Bethe–Goldstone–Gleichung (4.1.1) für die zu untersuchende NN–Wechselwirkung gelöst werden. Mit Hilfe dieser G –Matrix können nun die Ein–Teilchen–Energien zunächst in einer modellraumspezifischen BHF–Näherung angegeben werden. Diese Näherung beinhaltet hier nur kurzreichweitige Korrelationen, die aus Konfigurationen außerhalb des bis zur $1p0f$ –Schale reichenden Modellraums stammen (siehe 3.1). Im folgenden ist mit BHF immer die mit dem modellraumspezifischen Projektionsoperator durchgeführte Rechnung gemeint.

In einem zweiten Schritt werden dann die langreichweitigen Korrelationen durch die Beimischung der im Modellraum möglichen niederenergetischen $2T1L$ – und $2L1T$ –Konfigurationen berücksichtigt. Es wird also die Dyson–Gleichung

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = g_{\alpha}^{BHF}(\omega)\delta_{\alpha\beta} + \sum_{\gamma} g_{\alpha}^{BHF}(\omega)\Sigma_{\alpha\gamma}^{(2)}G_{\gamma\beta}(\omega) \quad (5.1.1)$$

mit den Selbstenergieeinschüben zweiter Ordnung in G (Abbildung 2.1.6) gelöst. g_{α}^{BHF} ist dabei die Ein–Teilchen–Greensfunktion in BHF–Näherung. Das Verfahren zur Lösung von (5.1.1) wurde ausführlich in Kapitel 2.1 erläutert. Es ist allerdings hinzuzufügen, daß hier nicht selbstkonsistent gerechnet wurde, sondern das aus der Dyson–Gleichung ableitbare Eigenwertproblem nur einmal gelöst wurde.

5.1.3 Bindungsenergie und Ein–Teilchen–Eigenschaften

Als Resultat einer Lösung der Dyson–Gleichung (5.1.1) erhält man die Ein–Teilchen–Greensfunktion in der Lehmann–Darstellung. Die Kenntnis dieser Greensfunktion ermög-

	CDBonn96		CDBonn99		Argonne V ₁₈	
	<i>pn</i>	ISB	<i>pn</i>	ISB	<i>pn</i>	ISB
$\varepsilon_{p_{3/2}}^{\text{BHF}}$ [MeV]	-17.37	-17.23	-17.39	-17.05	-15.89	-15.58
$\varepsilon_{p_{1/2}}^{\text{BHF}}$ [MeV]	-13.68	-13.49	-13.71	-13.36	-12.43	-12.12
$\varepsilon_{d_{5/2}}^{\text{BHF}}$ [MeV]	0.39	0.99	0.36	0.99	1.34	2.07
E^{BHF}/A [MeV]	-4.80	-4.72	-4.81	-4.65	-3.97	-3.82
$\varepsilon_{p_{3/2}}^{\text{QP}}$ [MeV]	-17.65	-17.52	-17.68	-17.32	-16.14	-15.82
$\varepsilon_{p_{1/2}}^{\text{QP}}$ [MeV]	-14.23	-14.03	-14.26	-13.88	-12.88	-12.54
$\varepsilon_{d_{5/2}}^{\text{QP}}$ [MeV]	-0.57	0.05	-0.60	0.03	0.44	1.16
$S_{p_{3/2}}$	0.8071	0.8089	0.8070	0.8087	0.7867	0.7852
$S_{p_{1/2}}$	0.7937	0.7960	0.7936	0.7956	0.7721	0.7745
$S_{d_{5/2}}$	0.8460	0.8474	0.8460	0.8472	0.8238	0.8261
E/A [MeV]	-6.89	-6.70	-6.90	-6.70	-5.94	-5.76

Tabelle 5.1.1: Ein-Teilchen-Eigenschaften von Protonen und Bindungsenergie pro Nukleon in ^{16}O für drei verschiedene Potentiale.

licht die Berechnung der Bindungsenergie mit Hilfe der Koltun-Summenregel (2.1.17) und die Angabe einiger Ein-Teilchen-Eigenschaften. Einige Ergebnisse sind in Tabelle 5.1.1 aufgelistet. Angegebene Ein-Teilchen-Energien beziehen sich auf Protonen. Um den Einfluß der Isospinsymmetrieverletzung (**I**sospin **S**ymmetrie **B**reaking) hervorzuheben, sind für jedes Potential zwei Spalten mit Resultaten angegeben. Die erste, mit *pn* bezeichnete Spalte enthält hierbei die Ergebnisse, die gewonnen werden, wenn man alle auftretenden *pp*- und *nn*-Wechselwirkungen durch die entsprechende *pn*-Wechselwirkung ersetzt, die Isospinsymmetrie also nicht verletzt ist. In der mit ISB bezeichnete Spalte hingegen sind Werte aufgelistet, die sich ergeben, wenn die Verletzung der Isospinsymmetrie explizit berücksichtigt wird.

Als erstes sei angemerkt, daß die Einbeziehung der langreichweitigen Korrelationen im Vergleich zu BHF für jedes betrachtete Potential etwa 2 MeV mehr Bindungsenergie pro

Nukleon vorhersagt. Gemessen am experimentellen Wert von ca. 8 MeV pro Nukleon ist das eine deutliche Verbesserung gegenüber BHF. Allerdings ist hinzuzufügen, daß etwa 1.5 dieser 2 MeV auf die Beimischung niederenergetischer Teilchen–Teilchen–Zustände des Modellraums zurückzuführen sind. Diese Teilchen–Teilchen–Zustände würden in einer BHF–Rechnung in der man anstatt des modellraumspezifischen Projektionsoperators Q_{mod} (4.1.3) den Paulioperator verwendet, ebenfalls berücksichtigt werden. Die verbleibenden 0.5 MeV sind auf Loch–Loch–Streuterme zurückzuführen, die in einer BHF–Rechnung nicht berücksichtigt werden.

Auch für die Quasiteilchen–Energien ($\varepsilon_{\alpha}^{\text{QP}}$) ist der Einfluß der langreichweitigen Korrelationen sehr wichtig. Es stellt sich jedoch heraus, daß die Korrekturen aufgrund der niederenergetischen Teilchen–Teilchen– beziehungsweise Loch–Loch–Beiträge dazu neigen, sich gegenseitig großteils aufzuheben. Für das Argonne V_{18} beispielsweise reduziert die Einbeziehung der 2T1L–Konfigurationen die Quasiteilchenenergie des $p_{1/2}$ –Zustands von -12.12 MeV auf -15.38 MeV. Erlaubt man aber auch eine 2L1T–Beimischung in der Definition der Selbstenergie, erhält man nur noch eine Quasiteilchenenergie von -12.54 MeV, was wieder in der Nähe des ursprünglichen BHF–Werts angesiedelt ist. Ein ähnliches Verhalten ist bei allen drei Potentialen auch für andere Zustände zu beobachten.

Im Vergleich zum Argonne V_{18} –Potential ergibt sich für die Bonn–Potentiale CDBonn96 und CDBonn99 eine um etwa 0.9 MeV höhere Bindungsenergie pro Nukleon. Dieses Ergebnis sollte man mit BHF–Rechnungen für Kernmaterie bei Sättigungsdichte vergleichen, die eine Energiedifferenz von 1.2 MeV zwischen dem Argonne– und den Bonn–Potentialen voraussagen [Mue99]. Diese Energiedifferenzen kann man der Tatsache zuschreiben, daß das Argonne–Potential etwas ”härter” ist als die Bonn–Potentiale [Eng97, Mue99]. Stärkere Repulsion führt zu mehr Korrelation und damit zu einer ausgeprägteren Delokalisierung der Ein–Teilchen–Stärke, wie man an den in Tabelle 5.1.1 aufgeführten Spektroskopischen Faktoren S sehen kann. Ihre Abweichung vom BHF–Wert eins ist für das Argonne–Potential stärker ausgeprägt als bei den Bonn–Potentialen.

Schließlich ist noch zu beobachten, daß eine Berücksichtigung der ISB–Terme in der NN–Wechselwirkung im Vergleich zur Isospinsymmetrie erhaltenden Version des Potentials (pn) jeweils einen kleinen aber nicht vernachlässigbaren Einfluß auf die berechnete Bindungsenergie pro Nukleon hat. Die Streulängen für pp – und pn –Streuung implizieren eine NN–Wechselwirkung, die für pn etwas attraktiver ist als für pp . Dieser kleine Unterschied führt bei allen Wechselwirkungen zu einer Energiedifferenz von ca. 0.2 MeV pro Nukleon.

5.1.4 Korrelationen und Coulomb–Verschiebung

Neben den Ein–Teilchen–Eigenschaften und der Bindungsenergie ist von besonderem Interesse, inwieweit es mit dem Formalismus der Greenschen Funktionen sowie den moder-

		$C^{(1)}$	δ_{SR}	δ_{LR}	δ_{CSB}	C^{Tot}	Exp.
$p_{3/2}^{-1}$	CDBonn96	3205	-44	46	36	3240	3395
	CDBonn99		-44	46	86	3290	
	AV ₁₈		-71	47	108	3285	
$p_{1/2}^{-1}$	CDBonn96	3235	-52	37	54	3271	3542
	CDBonn99		-52	37	91	3320	
	AV ₁₈		-79	39	103	3297	
$d_{5/2}$	CDBonn96	3135	154	-15	49	3326	3542
	CDBonn99		154	-15	72	3350	
	AV ₁₈		187	-18	92	3401	
$1s_{1/2}$	CDBonn96	2905	159	-45	58	3081	3166
	CDBonn99		160	-46	93	3117	
	AV ₁₈		198	-47	112	3174	

Tabelle 5.1.2: *Coulomb-Verschiebung der Energie für Ein-Loch- ($p_{3/2}^{-1}$ und $p_{1/2}^{-1}$) und Ein-Teilchen-Zustände ($d_{5/2}$ und $1s_{1/2}$) bezogen auf ^{16}O in keV.*

nen NN-Wechselwirkungen gelingt, die Nolen-Schiffer-Anomalie zu erklären. Die Resultate für einige Ein-Teilchen- bzw. Ein-Loch-Zustände sind in Tabelle 5.1.2 aufgeführt. In der mit $C^{(1)}$ überschriebenen Spalte sind die Ergebnisse von Sato [Sat76] aufgelistet. Diese beinhalten den führenden Coulomb-Beitrag, die Korrekturen aufgrund der endlichen Protonengröße, die elektromagnetische Spin-Bahn-Wechselwirkung, sowie Vakuumpolarisationseffekte und die auf die Massendifferenzen zwischen Neutron und Proton zurückführbaren Korrekturen der kinetischen Energie. Wie erwähnt wurden diese Beiträge aus Ein-Teilchen-Wellenfunktionen bestimmt, die aus HF-Rechnungen mit phänomenologischen Kernkräften gewonnen wurden. In der zweiten und dritten Spalte der Tabelle sind Korrekturen zur Coulomb-Verschiebung der Energien angegeben. Diese Korrekturen sind in Beiträge aufgrund kurzreichweitiger Korrelationen (δ_{SR}) bzw. langreichweitiger Korrelationen (δ_{LR}) aufgeteilt. Der Wert von δ_{SR} wurde dabei gemäß

$$\delta_{\text{SR}} = \varepsilon_i^{\text{BHF}}(\text{Proton}) - \varepsilon_i^{\text{BHF}}(\text{Neutron}) - \delta_{\text{mean field}} \quad (5.1.2)$$

ermittelt. In diesem Fall wurde die BHF-Rechnung mit der die Isospinsymmetrie erhaltenden Version des jeweiligen Potentials durchgeführt. In ähnlicher Weise wird δ_{LR} aus den Quasiteilchenenergien ermittelt, wobei die BHF-Effekte, die schon in δ_{SR} enthalten sind, abgezogen werden. Die Korrekturterme δ_{SR} und δ_{LR} stammen aus irreduzible Diagramm zweiter und höherer Ordnung in denen wenigstens eine Wechselwirkungslinie die Coulomb-Wechselwirkung repräsentiert.

Es ist festzustellen, daß die Effekte der Korrelationen nicht sehr stark sind. Die lang- und kurzreichweitigen Korrelationen neigen dazu, sich gegenseitig aufzuheben. Dies ist insbesondere für die Ein-Loch-Zustände $p_{3/2}^{-1}$ und $p_{1/2}^{-1}$ der Fall. Für die Ein-Teilchen-Zustände $d_{5/2}$ und $1s_{1/2}$ liefern die kurzreichweitigen Korrelationen den dominanten Anteil zu einer Gesamtenergieverschiebung von 100 keV. Diese Energieverschiebung fällt für das Argonne-Potential wegen der dort stärkeren Korrelationen etwas größer aus. Die Beiträge zur Coulomb-Energieverschiebung aufgrund der die Ladungssymmetrie verletzenden (**C**harge **S**ymmetry **B**reaking) Terme der NN-Potentiale sind in Tabelle 5.1.2 in der vierten Spalte zu finden und mit δ_{CSB} gekennzeichnet. Da das CDBonn96 nur im 1S_0 -Zustand CSB-Terme berücksichtigt, um die empirischen pp - und nn -Streulängen zu reproduzieren, fällt die Korrektur δ_{CSB} in diesem Fall am kleinsten aus. Im CDBonn99 hingegen wird die aus Meson-Austauschmodellen herleitbare CSB auch in Partialwellen mit $L > 0$ berücksichtigt, was die Korrektur δ_{CSB} im Vergleich zum CDBonn96 ungefähr verdoppelt. Das Argonne V_{18} berücksichtigt CSB-Terme ebenfalls für Partialwellen mit $L > 0$ was ein relativ großes δ_{CSB} zur Folge hat. Allerdings werden im Argonne V_{18} die CSB-Terme für $L > 0$ vom 1S_0 -Zustand aus extrapoliert und nicht aus einer mikroskopischen Theorie abgeleitet.

Es ist festzuhalten, daß die Potentiale, die CSB-Terme in allen relevanten Partialwellen berücksichtigen einen Beitrag von 100 keV zur Coulomb-Energieverschiebung liefern, während das CDBonn96 nur einen Beitrag von 50 keV voraussagt. Das zeigt wie wichtig es ist auch in Partialwellen mit $L > 0$ die Verletzung der Ladungssymmetrie sorgfältig zu behandeln. Leider gelingt es trotzdem nicht, die Nolen-Schiffer-Anomalie vollständig zu erklären. Die totale Energieverschiebung C^{Tot} , die mit dem Formalismus Greenscher Funktionen und den Potentialen Argonne V_{18} bzw. CDBonn99 vorhergesagt werden kann, differiert noch um ungefähr 100 keV vom experimentellen Wert. Allerdings ist das, im Vergleich zu Rechnungen mit Potentialen, die keine Isospinsymmetrieverletzung zulassen, immerhin eine Verbesserung von 50%.

Für die verbleibende Differenz gibt es eine Vielzahl möglicher Erklärungen. Zunächst ist zu berücksichtigen, daß eine Kernstrukturrechnung immer mit Ungenauigkeiten behaftet ist. Modellräume unterschiedlicher Größe oder eine andere Wahl der Selbstenergie kann die Ergebnisse deutlich beeinflussen. Als Anhaltspunkt für den Einfluß solcher Ungenauigkeiten seien unterschiedliche Ergebnisse für die Coulomb-Energieverschiebung aus der

Arbeit von H. Sato [Sat76] und einer Veröffentlichung von T. Suzuki [Suz92] angeführt. Im Falle des Ein-Loch-Zustands $p_{1/2}^{-1}$ liegt das Ergebnis von Suzuki um 167 keV höher als das von Sato. Für den Ein-Teilchen-Zustand $d_{5/2}$ unterscheiden sich die Resultate um 138 keV. Ungenauigkeiten dieser Größenordnung können also durchaus eine Erklärung für die Diskrepanz zwischen experimentellen und in dieser Arbeit berechneten Werten sein.

Eine andere Möglichkeit ist, daß die in den Potentialen CDBonn99 und Argonne V₁₈ berücksichtigten CSB-Kräfte zu schwach sind. Aufgrund der erzielten Resultate könnte man vermuten, daß doppelt so starke CSB-Kräfte vonnöten wären. Es ist jedoch nicht so einfach möglich die CSB-Kräfte zu erhöhen, da jedes sinnvolle, die Ladungssymmetrie verletzende Potential in der Lage sein muß, die empirische Differenz $\Delta a_{\text{CSB}} = 1.5 \pm 0.5$ der 1S_0 - pp - und $-nn$ -Streulängen vorherzusagen. Die im CDBonn99 berücksichtigten CSB-Terme, die sorgfältig aus der Massendifferenz von Proton und Neutron und den resultierenden Korrekturen in der Beschreibung des Meson-Austauschs hergeleitet wurden, liefern den richtigen Wert für Δa_{CSB} , so daß keinen Spielraum für zusätzliche CSB-Kräfte bleibt.

Schließlich bleibt noch die Möglichkeit die Effekte der Ladungssymmetrieverletzung aus einer $\rho^0 - \omega$ -Mischung abzuleiten. Es wurde lange Zeit angenommen, daß eine $\rho^0 - \omega$ -Mischung die Hauptursache aller die Ladungssymmetrie verletzenden Phänomene in der Theorie der NN-Wechselwirkungen darstellt [Mil90]. Einige Arbeiten [Gol92, Kre93, Pie93] lassen aber Zweifel an der Richtigkeit dieser Annahme aufkommen, zumal es auch Autoren gibt [Li98], die zu dem Schluß kommen, daß sich die empirisch bekannte Ladungssymmetrieverletzung in der NN-Wechselwirkung vollständig aus der Massendifferenz zwischen Proton und Neutron erklären läßt. Auch wenn eine $\rho^0 - \omega$ -Mischung als Ursache für eine Ladungssymmetrieverletzung angenommen wird, bleibt festzustellen, daß sich dadurch der CSB-Beitrag aus der 1S_0 -Partialwelle kaum verändert dürfte, da der empirische Wert für Δa_{CSB} immer reproduziert werden muß, ganz gleich welcher mikroskopische Mechanismus für das Auftauchen einer Ladungssymmetrieverletzung zugrunde gelegt wird. Allerdings hat die durch die Massenaufspaltung der Nukleonen hervorgerufenen Ladungssymmetrieverletzung skalaren Charakter wohingegen ein $\rho^0 - \omega$ -Austausch vektoriellen Charakter hat. Da nun die durch Partialwellen mit $L > 0$ hervorgerufenen CSB-Effekte etwa die Hälfte des Gesamteffekts ausmachen, ist es durchaus möglich, daß eine durch $\rho^0 - \omega$ -Mischung hervorgerufene Ladungssymmetrieverletzung zu einer merklichen Veränderung der resultierenden Wechselwirkungsmatrixelemente für höhere Partialwellen führt.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß die Ergebnisse für Bindungsenergie und Ein-Teilchen-Eigenschaften vernünftig sind. Die Resultate liegen im Rahmen der Vorhersagen von vergleichbaren Rechnungen, die keine die Isospinsymmetrie verletzenden Potentiale verwenden. Obwohl alle drei Potentiale dieselben Streuphasen vorhersagen, besteht zwi-

schen den Rechnungen mit dem CDBonn99 bzw. Argonne V_{18} Potential ein Unterschied von 1 MeV pro Nukleon in der Bindungsenergie von ^{16}O . Die Ursache für diese Diskrepanz könnte die unterschiedlichen Behandlung des Pion–Austausch in diesen Potentialen sein. Während das Argonne V_{18} den Pion–Austausch lokal beschreibt führt die nichtrelativistische Reduktion des Pion–Austauschs im CDBonn99 zu nicht–lokalen Termen. Die in den Potentialen CDBonn99 und Argonne V_{18} enthaltenen CSB–Kräfte ermöglichen eine teilweise Erklärung der Nolen–Schiffer–Anomalie. Gegenüber Potentialen, die keine Verletzung der Isospinsymmetrie zulassen, konnte mit den hier verwendeten Potentialen die Differenz zwischen Theorie und Experiment halbiert werden.

5.2 Paarwechselwirkung

Das Phänomen der Paarwechselwirkung kann in vielen Bereichen der Physik beobachtet werden. Die Wichtigkeit der Paarkräfte im Zusammenhang mit dem Verhalten von Kernen, die aus einer geraden Anzahl von Nukleonen aufgebaut sind, wurde schon in Kapitel 3.2 erwähnt. Bei der Beschreibung eines Kerns hat man in der Regel aber mit mehreren Effekten zu kämpfen. Eine Herangehensweise besteht demnach darin, sowohl Teilchen–Loch–Anregungen über eine HF–Rechnung, als auch Teilchen–Teilchen–Korrelationen aufgrund von Paarwechselwirkungen zu berücksichtigen. Dieser Ansatz wird in der Hartree–Fock–Bogoliubov Theorie gewählt [Rin80]. Zur Beschreibung von Nukleonenpaaren in einer energetisch entarteten j –Schale eignet sich das Seniority–Verfahren [Bau68]. Darüberhinaus gibt es noch eine Vielzahl von Ansätzen, z. B. auch die Annahme einer nicht konstanten Paarkraft, auf die aber hier nicht näher eingegangen werden soll. Vielmehr soll im folgenden der Spezialfall einer reinen Paarkraft näher untersucht werden. Der Hamiltonoperator für diesen Fall lautet

$$H = \sum_k \varepsilon_k^0 a_k^\dagger a_k - |G| \sum_{kk' > 0} a_k^\dagger a_k^\dagger a_{\bar{k}'} a_{k'} . \quad (5.2.1)$$

An dieser Stelle sei nochmals erwähnt (vergleiche 3.2), daß der Ein–Teilchen–Anteil diagonal ist und die Dynamik des Systems auf ein Verschieben der zum Drehimpuls $I = 0$ gekoppelten Paare im Modellraum beschränkt ist.

5.2.1 Die BCS–Theorie

Auch wenn das BCS–Verfahren, das ursprünglich von Bardeen, Cooper und Schrieffer [BCS57] zur Beschreibung des Grundzustands eines Supraleiters entwickelt wurde, in vielen Lehrbüchern der Kernphysik zu finden ist, soll es hier nochmals kurz skizziert werden. Zum einen, weil das BCS–Verfahren eine gute Näherungslösung für das Paarproblem

liefert und zum anderen weil ein enger Zusammenhang zwischen der BCS-Lösung des Paarhamiltonian und der HF-Lösung des Hubbard-Modells besteht (siehe 5.3).

In der BCS-Theorie geht man davon aus, daß der Grundzustand des Systems aus reinen Paarkonfigurationen aufgebaut ist. Für den Grundzustand setzt man

$$|\text{BCS}\rangle = \prod_{k>0} (u_k + v_k a_k^\dagger a_k^\dagger) |0\rangle \quad (5.2.2)$$

an, wobei u_k und v_k Variationsparameter sind, für die $u_k^2 + v_k^2 = 1$ gilt. Berechnet man den Erwartungswert des Paarhamiltonoperators bezüglich diesem Grundzustand, erhält man

$$\langle H \rangle = 2 \sum_{k>0} \varepsilon_k v_k^2 - |G| \left[\sum_{k>0} u_k v_k \right]^2. \quad (5.2.3)$$

Hier wurde $\varepsilon_k = \varepsilon_k^0 - \lambda$ gesetzt, wobei ε_k^0 die ursprüngliche Ein-Teilchen-Energie und λ ein Lagrangeparameter zur Festlegung der richtigen Teilchenzahl ist. Die Variation dieses Erwartungswerts,

$$\frac{\partial}{\partial v_k} \langle H \rangle - \frac{v_k}{u_k} \frac{\partial}{\partial u_k} \langle H \rangle = 0, \quad (5.2.4)$$

führt auf die Gleichung

$$(v_k^2 - u_k^2) |G| \sum_{k>0} u_k v_k + 2\varepsilon_k u_k v_k = 0. \quad (5.2.5)$$

Mit Hilfe der Größe

$$\Delta = |G| \sum_{k>0} u_k v_k \quad (5.2.6)$$

kann man nach den Variationsparametern auflösen

$$\left. \begin{array}{l} u_k^2 \\ v_k^2 \end{array} \right\} = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\varepsilon_k}{\sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta^2}} \right). \quad (5.2.7)$$

Mit (5.2.6) und (5.2.7) erhält man die sogenannte Gap-Gleichung

$$\Delta = \frac{1}{2} \sum_{k>0} \frac{|G|}{\sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta^2}} \Delta \quad (5.2.8)$$

aus der Δ , u_k und v_k iterativ bestimmt werden können.

5.2.2 BCS und exakte Lösung im Vergleich

Eine exakte Diagonalisierung des Paarhamiltonoperators und eine Lösung der Gap-Gleichung (5.2.8) ermöglichen die Angabe der Besetzungszahlen der einzelnen Ein-Teilchen-Zustände und die Berechnung der Grundzustandsenergie. In Tabelle 5.2.1 sind diese Größen für verschiedene Paarwechselwirkungsstärken $|G|$ angegeben. Bei der Betrachtung der Ergebnisse fällt als erstes das triviale Ergebnis für $|G| = 0.1$ auf. Ursache dafür ist, daß die Gap-Gleichung keine Lösung mit $\Delta \neq 0$ garantiert. Dividiert man die Gap-Gleichung (5.2.8) auf beiden Seiten durch Δ , so erhält man

$$1 = \frac{1}{2} \sum_{k>0} \frac{|G|}{\sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta^2}} = f(\Delta) . \quad (5.2.9)$$

Eine Lösung ist jetzt nur noch möglich, wenn $f(\Delta)$ nicht auf Funktionswerte kleiner 1 beschränkt ist. Für kleine Wechselwirkungsstärken $|G|$ kann dieser Fall aber eintreten, so daß die BCS-Theorie kein nicht-triviales Ergebnis liefert. Desweiteren fällt auf, daß die Differenzen in den vorhergesagten Grundzustandsenergien mit wachsenden Paar-

		$ G = 0.1$		$ G = 0.2$		$ G = 0.3$		$ G = 0.5$	
		BCS	exakt	BCS	exakt	BCS	exakt	BCS	exakt
k	ε_k^0	$\langle n_k \rangle$							
1	-1.0	1.0000	0.9970	0.9917	0.9833	0.9522	0.9543	0.8494	0.8740
2	-0.5	1.0000	0.9940	0.9779	0.9675	0.8931	0.9161	0.7528	0.7997
3	0.0	1.0000	0.9812	0.8674	0.9095	0.6952	0.8023	0.5959	0.6506
4	0.5	0.0000	0.0188	0.1326	0.0905	0.3048	0.1977	0.4041	0.3494
5	1.0	0.0000	0.0060	0.0221	0.0325	0.1069	0.0839	0.2472	0.2003
6	1.5	0.0000	0.0030	0.0083	0.0167	0.0478	0.0457	0.1506	0.1260
E_0		-3.0000	-3.3441	-3.5679	-3.8087	-3.9825	-4.4308	-5.3220	-6.0946

Tabelle 5.2.1: Vergleich der exakten und der BCS-Ergebnisse für den Paarhamiltonoperator für verschiedene Wechselwirkungsstärken und 3 Nukleonenaare in 6 Schalen. Angaben für $|G|$, ε_k und E_0 in MeV.

kräften zunehmen. Hat man bei $|G| = 0.2$ noch einen Fehler von 7%, so wächst dieser für $|G| = 0.5$ auf 15% an. Ähnlich stellt sich der Sachverhalt auch für die Besetzungszahlen dar, wobei auffällt, daß die Umschichtung der Ein-Teilchen-Stärke in der Nähe der Fermienergie, hier also für die Ein-Teilchen-Zustände 3 und 4, von der BCS-Rechnung für alle Wechselwirkungsstärken deutlich überschätzt wird. Hingegen wird die Umverteilung der Ein-Teilchen-Stärke der übrigen Zustände mit wachsenden $|G|$ zunächst unterschätzt, dann überschätzt. Trotzdem kann man in Anbetracht der Einfachheit des Ansatzes und im Vergleich zu anderen kernphysikalischen Näherungsmethoden (etwa HF für endliche Kerne) sagen, daß BCS eine gute Näherung des Paarproblems liefert.

Da das BCS-Verfahren schon oft angewendet und getestet wurde [All72] und im folgenden die BCS-Lösungen mit den anderen Näherungsmethoden verglichen werden, sollen an dieser Stelle keine weiteren Daten für andere Konfigurationen angegeben werden. Außerdem ändern sich die Eigenschaften der BCS-Lösung auch für andere Paar- oder Schalenanzahlen nicht nennenswert, so daß eine weitere, nur auf BCS fokussierte Diskussion unnötig ist.

5.2.3 Lösung mit Lanczos

Mit Hilfe der in Kapitel 4.2 vorgestellten Besetzungszahldarstellung ist es relativ einfach, den Paarhamiltonoperator sukzessive auf einen Startzustand anzuwenden, um eine neue Basis zu generieren (BAGEL-Verfahren). Als Startzustand wird hier der Zustand gewählt, in dem die energetisch tiefsten Ein-Teilchen-Zustände besetzt sind. Je nachdem, wie oft man den Hamiltonoperator auf den Startzustand anwendet, erhält man einen unterschiedlich großen Basissatz und daraus Näherungen unterschiedlicher Güte.

In Tabelle 5.2.2 sind Ergebnisse für die Besetzungszahlen und die Grundzustandsenergie für einen Basissatz aus 3, 7 und 15 Lanczos-Vektoren, sowie das exakte Ergebnis und die Vorhersagen der BCS-Theorie für 4 Paare in 8 Schalen angegeben. Die Dimension der exakten Matrix beträgt in diesem Fall 70. Das Generieren eines Basisvektors bedeutet ein- oder mehrmaliges Anwenden des Hamiltonoperators auf den Startzustand $|11110000\rangle$ und resultiert in einem Vektor der Länge 70. Die Dimension der am Schluß zu diagonalisierenden tridiagonalen Matrix ist gleich der Anzahl der erzeugten Lanczos-Vektoren. Anhand der Tabelle erkennt man, daß schon bei nur drei Basisvektoren eine durchaus akzeptable Näherung erzielt wird, deren Qualität mit BCS vergleichbar ist, was umso erstaunlicher ist, wenn man bedenkt, daß der Rechenaufwand in beiden Fällen etwa gleich groß ist. Hier wird die Ausschmierung in der Nähe der Fermikante, die zwischen den Ein-Teilchen-Zuständen 4 und 5 liegt, von der Lanczos-Diagonalisierung etwa gleich stark unterschätzt, wie sie von BCS überschätzt wird. Dies ist darauf zurückzuführen, daß bei nur zweimaliger Anwendung des Hamiltonoperators auf den Startzustand die erzeugten

		$N_{\mathcal{B}}$ 3	$N_{\mathcal{B}}$ 7	$N_{\mathcal{B}}$ 15	exakt $N_{\mathcal{B}} = 70$	BCS
k	ε_k^0	$\langle n_k \rangle$	$\langle n_k \rangle$	$\langle n_k \rangle$	$\langle n_k \rangle$	$\langle n_k \rangle$
1	-1.5	0.9468	0.9582	0.9575	0.9575	0.9562
2	-1.0	0.9264	0.9335	0.9334	0.9334	0.9234
3	-0.5	0.9013	0.8778	0.8822	0.8822	0.8454
4	0.0	0.8716	0.7514	0.7472	0.7472	0.6517
5	0.5	0.1284	0.2486	0.2528	0.2528	0.3483
6	1.0	0.0987	0.1221	0.1178	0.1178	0.1546
7	1.5	0.0736	0.0665	0.0666	0.0666	0.0766
8	2.0	0.0532	0.0418	0.0425	0.0425	0.0438
E_0		-7.9593	-8.0675	-8.0682	-8.0682	-7.4709

Tabelle 5.2.2: Besetzungszahlen und Grundzustandsenergie für 4 Paare in 8 Schalen, $|G| = 0.3$ MeV und unterschiedliche Anzahlen von generierten Lanczos-Vektoren. Zum Vergleich ist auch die BCS-Lösung angegeben. Angaben für ε_k und E_0 in MeV.

Zustände allenfalls 2T2L-Charakter haben können. Zustände, die einen besonders hohen Anteil an der Besetzung oberhalb der Fermikante haben, sind also noch nicht erzeugt worden.

Mit wachsendem $N_{\mathcal{B}}$ ist die mathematisch beweisbare Konvergenz der Lanczos-Diagonalisierung gegen die exakte Diagonalisierung deutlich zu erkennen. Bei 15 Basisvektoren besteht bereits kein Unterschied mehr zwischen der exakten und der Lanczos-Diagonalisierung. Dies ist allerdings nur für die Grundzustandsenergie richtig und trifft für die Anregungsenergien nicht mehr zu. Da in diesem Fall das Lanczos-Verfahren nur 14 der maximal möglichen 69 Anregungszustände liefert, ist das selbstredend auch nicht zu erwarten. Im Gegensatz zum BCS-Verfahren, das nur die Grundzustandseigenschaften liefert, kann die Lanczos-Diagonalisierung aber immerhin näherungsweise Aussagen über die Anregungszustände und -energien machen.

Ein Nachteil der Lanczos-Diagonalisierung, der allerdings erst bei noch größeren Dimen-

		$N_{\mathcal{B}}$ 3	$N_{\mathcal{B}}$ 7	$N_{\mathcal{B}}$ 15	exakt $N_{\mathcal{B}} = 252$	BCS
k	ε_k^0	$\langle n_k \rangle$	$\langle n_k \rangle$	$\langle n_k \rangle$	$\langle n_k \rangle$	$\langle n_k \rangle$
1	-2.0	0.9513	0.9599	0.9593	0.9593	0.9584
2	-1.5	0.9369	0.9415	0.9418	0.9418	0.9362
3	-0.5	0.9195	0.9065	0.9106	0.9106	0.8934
4	0.0	0.8994	0.8394	0.8480	0.8481	0.8037
5	0.5	0.8763	0.7126	0.7007	0.7007	0.6235
6	1.0	0.1237	0.2874	0.2993	0.2993	0.3765
7	1.5	0.1006	0.1606	0.1520	0.1519	0.1963
8	2.0	0.0805	0.0935	0.0894	0.0894	0.1066
9	2.5	0.0631	0.0585	0.0582	0.0582	0.0638
10	3.0	0.0487	0.0401	0.0407	0.0407	0.0416
	E_0	-12.5478	-12.7762	-12.7793	-12.7793	-12.0335

Tabelle 5.2.3: *Besetzungszahlen und Grundzustandsenergie für 5 Paare in 10 Schalen, $|G| = 0.3$ MeV und unterschiedliche Anzahlen von generierten Lanczos-Vektoren. Zum Vergleich ist auch die BCS-Lösung angegeben. Angaben für ε_k und E_0 in MeV.*

sionen der exakten Matrix relevant wird, ist die Tatsache, daß man zur Berechnung der Besetzungszahlen gezwungen ist, alle erzeugten Lanczos-Vektoren zu speichern. Dies ist nötig, weil die Eigenvektoren der tridiagonalen Matrix mit den Lanczos-Vektoren in die ursprüngliche Basis zurücktransformiert werden müssen. Bei BCS hingegen erhält man die Besetzungszahlen direkt aus den Quadraten der Variationsparameter v_k .

Weitere Ergebnisse dieser Art sind in Tabelle 5.2.3 für 5 Nukleonenpaare in 10 Schalen angegeben. Wegen des größeren Konfigurationsraums fällt hier die Abweichung der Näherung mit $N_{\mathcal{B}} = 3$ drastischer aus. Trotzdem genügen auch hier 15 Lanczos-Vektoren um das exakte Resultat zu reproduzieren und das obwohl die Dimension der exakten Matrix mit 252 deutlich größer ist als im vorherigen Fall.

Die Resultate für andere Konfigurationen oder Wechselwirkungsstärken unterscheiden sich nicht prinzipiell von den hier beispielhaft angeführten, weswegen auf die Angabe anderer Daten verzichtet wird. Weiter ist anzufügen, daß es nicht verwunderlich ist, daß die Lanczos–Diagonalisierung ein gutes Ergebnis liefert. Wegen der garantierten Konvergenz ist einzig die Frage interessant, mit wievielen Lanczos–Vektoren man auskommt, wenn man das exakte Resultat reproduzieren will. Offensichtlich ist das im Fall des Paarhamiltonoperator mit einer recht geringen Anzahl von Lanczos–Vektoren möglich.

Leider kann man in der Regel jedoch nicht vorhersagen, wieviele Lanczos–Vektoren benötigt werden, um das exakte Resultat zu reproduzieren. Deswegen sollte man sukzessive mehr und mehr Lanczos–Vektoren generieren, bis die ermittelte Grundzustandsenergie sich im Rahmen einer sinnvollen Genauigkeit nicht mehr ändert. Im Idealfall genügt es 10% der maximal möglichen Anzahl von Basisvektoren zu erzeugen. Somit sind Systeme zugänglich, die nicht mehr exakt diagonalisiert werden können. Da aber in der Vielteilchentheorie die Dimension des Konfigurationsraums mit wachsender Teilchenzahl stark zunimmt, ist auch die Anwendbarkeit der Lanczos–Diagonalisierung begrenzt.

5.2.4 Paarkraft und $\exp[S]$ –Verfahren

Da der Paarhamiltonoperator kein Aufbrechen der Nukleonenpaare zuläßt, sind hier für das $\exp[S]$ –Verfahren nur die s –Amplituden relevant, die zu $2T2L$ –, $4T4L$ –, ..., Anregungen gehören. Dies vereinfacht die Struktur der gekoppelten Gleichungen für die s –Amplituden, die man durch Anwenden des Operators e^S auf den Startzustand $|\Phi\rangle$ und anschließende Projektion erhält. Da die Gleichungen nichtlinear und von der Struktur

$$\begin{aligned} f_1(s_1, \dots, s_n) &= 0 \\ &\vdots \\ f_n(s_1, \dots, s_n) &= 0 \end{aligned} \tag{5.2.10}$$

sind, müssen sie mit einem Newton–Verfahren bearbeitet werden. Bei Gleichungen dieser Form, gibt es keine eindeutige Vorhersage über den Lösungsraum. Numerisch gesehen ist nicht garantiert, daß man eine Lösung findet oder daß eine gefundene Lösung auch die physikalisch sinnvolle ist. Dies kann im Zweifelsfall erst anhand der Observablen, die mit der neu bestimmten korrelierten Wellenfunktion $|\Psi\rangle$ berechnet werden können, entschieden werden. Kriterien für eine sinnvolle Grundzustandslösung sind:

1. Die erzielte Gesamtenergie $\langle \Psi | H | \Psi \rangle$ muß kleiner sein als der Wert von $\langle \Phi | H | \Phi \rangle$.
2. Zustände, die zu hohen Ein–Teilchen–Energien gehören sollten nicht stärker besetzt sein als die, die zu niedrigen Ein–Teilchen–Energien gehören.

Bei der numerischen Lösung eines solchen gekoppelten, nichtlinearen Gleichungssystems, gibt man in der Regel einen Startwert für die s_i vor. Der Algorithmus berechnet dann zunächst die Funktionswerte f_j an der vorgegebenen Stelle, variiert dann gezielt die einzelnen s_i und prüft, ob die damit neu berechneten Funktionswerte betragsmäßig näher an Null herangerückt sind. Für eine bestimmte Anzahl von Iterationen wird dann geprüft, ob Konvergenz erzielt werden kann. Falls dies nicht gelingt, muß ein neuer Satz von Startwerten angegeben werden. Ein möglichst geschickt gewählter Startwert verkürzt so die Rechenzeit. Bei kleinen Paarkräfte ($|\mathcal{G}| \leq 0.2$) ist es am günstigsten, zunächst alle s_i Null zu setzen. Letzteres ist gleichbedeutend damit, zunächst nur den konstanten Term der Entwicklung von $e^S = \sum_k S^k/k!$ zu betrachten. Im Verlauf der Iteration werden dann nach und nach höhere Terme der Entwicklung ungleich Null beigemischt, mit denen es gelingt die Funktionswerte f_j so lange zu minimieren, bis das Gleichungssystem gelöst ist. Abgesehen vom numerischen Faktum ist diese Vorgehensweise auch relativ plausibel. Hat man jedoch größere Paarkräfte ist dies nicht mehr richtig, da die in s nichtlinearen Komponenten der Wellenfunktion wichtiger werden. In diesem Fall führen Startwerte zwischen 0.5 und 1 eher zum Erfolg. Schlimmstenfalls muß man das Iterationsverfahren mehrfach durchlaufen, wobei man als Startwerte für die s -Amplituden Zufallszahlen zwischen -4 und 4 wählt, um aus den sich ergebenden Lösungen die richtige auszuwählen.

Im Folgenden sollen Ergebnisse für eine Beschreibung des Paarproblems mit dem $exp[S]$ -Verfahren angegeben und diskutiert werden. Insbesondere wurde die S_2 - und die S_4 -Näherung untersucht. In S_2 -Näherung werden alle S_i mit $i > 2$ und in S_4 -Näherung alle S_i mit $i > 4$ Null gesetzt.

In Tabelle 5.2.4 sind die Resultate für die S_2 - und die S_4 -Näherung neben der exakten Lösung und den BCS-Resultaten für zwei verschiedene Wechselwirkungsstärken und 2 Nukleonenpaare in 6 Schalen angegeben. Hier wurden nur zwei Paare auf die Schalen verteilt, um zu zeigen, daß in diesem Fall die S_4 -Näherung mit dem exakten Resultat übereinstimmt. Dies muß per Definition der Fall sein, da die höchste mögliche Anregung eine 4T4L-Anregung ist, was genau der S_4 -Amplitude entspricht. Unabhängig von der Wechselwirkungsstärke sind hier demnach S_4 -Näherung und exakten Lösung identisch.

Im Gegensatz dazu fällt auf, daß die Qualität der S_2 -Näherung stark von der Paarkraft $|G|$ abhängt. Während die von der S_2 -Näherung vorhergesagten Grundzustandsenergien sowohl für $|G| = 0.25$ als auch für $|G| = 0.45$ noch besser als die BCS-Vorhersage sind und das exakte Resultat recht ordentlich approximieren, weichen die Vorhersagen für die Besetzungszahlen bei der größeren Wechselwirkungsstärke doch erheblich von den exakten Resultaten ab und sind schlechter als die BCS-Besetzungszahlen. Offensichtlich werden die Beiträge der Wellenfunktion $e^S |\Phi\rangle$ in denen in S_2 quadratische Terme auftauchen mit zunehmendem $|G|$ überschätzt. Dies ist aber nicht unbedingt verwunderlich, da durch die Projektionstechnik nur die Komponenten der Wellenfunktion die zu $|\Phi\rangle$ bzw. den 2T2L-

		$ G = 0.25$				$ G = 0.45$			
		BCS	S2	S4	exakt	BCS	S2	S4	exakt
k	ε_k^0	$\langle n_k \rangle$							
1	-0.5	0.9415	0.9317	0.9413	0.9413	0.7576	0.6591	0.8080	0.8080
2	0.0	0.7555	0.8364	0.8506	0.8506	0.5615	0.5034	0.6429	0.6429
3	0.5	0.2156	0.1357	0.1229	0.1229	0.3335	0.3865	0.2702	0.2702
4	1.0	0.0538	0.0525	0.0464	0.0464	0.1806	0.2247	0.1397	0.1397
5	1.5	0.0219	0.0272	0.0241	0.0241	0.1029	0.1366	0.0838	0.0838
6	2.0	0.0117	0.0165	0.0147	0.0147	0.0638	0.0896	0.0554	0.0554
E_0		-1.4873	-1.8086	-1.8137	-1.8137	-2.4116	-2.8135	-3.0475	-3.0475

Tabelle 5.2.4: Vergleich der exakten Ergebnisse mit den Ergebnissen aus der S_2 - und S_4 -Näherung sowie den BCS-Resultaten für den Paarhamiltonoperator für verschiedene Wechselwirkungsstärken und 2 Nukleonenaare in 6 Schalen. Angaben für $|G|$, ε_k^0 und E_0 in MeV.

Anregungen gehören korrekt behandelt werden, während Terme die zu 4T4L-Anregungen gehören aus zweimaliger Anwendung des Operators S_2 generiert werden, ohne daß auf die 4T4L-Komponenten der Wellenfunktion projiziert wurde. Da in S_2 -Näherung die 4T4L-Komponenten also nicht korrekt behandelt werden und insbesondere da es bei 4 Schalen über der Fermikante viele mögliche Produkte aus zwei S_2 -Operatoren gibt, ist verständlich, daß mit wachsendem $|G|$ diese Komponenten der Wellenfunktion überschätzt werden. Diese in S_2 -Näherung überschätzten Komponenten der Wellenfunktion werden dann in S_4 -Näherung durch die dann durchgeführte Projektion auf die 4T4L-Beiträge wieder korrigiert, so daß das exakte Resultat reproduziert wird.

Hat man ein System mit mehr als zwei Paaren, ist selbstverständlich auch die S_4 -Näherung nicht mehr mit dem exakten Resultat identisch. Beispiele hierfür sind in den Tabellen 5.2.5 und 5.2.6 aufgeführt. In der ersten der beiden Tabellen sind die Resultate für 3 Paare in 7 Schalen zu finden. Die beiden $exp[S]$ -Näherungen werden wieder mit den BCS- und den exakten Resultaten verglichen. Auch hier ist zu konstatieren, daß die S_2 -Näherung für die kleinere Wechselwirkungsstärke die exakte Lösung besser approximiert als für die

		$ G = 0.2$				$ G = 0.35$			
		BCS	S2	S4	exakt	BCS	S2	S4	exakt
k	ε_k^0	$\langle n_k \rangle$							
1	-1.0	0.9882	0.9771	0.9796	0.9795	0.9050	0.8387	0.9212	0.9175
2	-0.5	0.9690	0.9557	0.9607	0.9607	0.8159	0.7358	0.8624	0.8575
3	0.0	0.8330	0.8844	0.8941	0.8940	0.6208	0.5606	0.7160	0.7100
4	0.5	0.1616	0.1088	0.0993	0.0994	0.3488	0.4073	0.2591	0.2648
5	1.0	0.0305	0.0405	0.0362	0.0362	0.1690	0.2317	0.1242	0.1283
6	1.5	0.0117	0.0208	0.0187	0.0187	0.0884	0.1377	0.0713	0.0740
7	2.0	0.0061	0.0126	0.0114	0.0114	0.0521	0.0883	0.0460	0.0477
E_0		-3.5714	-3.8552	-3.8580	-3.8581	-4.4049	-4.7387	-5.0076	-5.0182

Tabelle 5.2.5: Vergleich der exakten Ergebnisse mit den Ergebnissen aus der S_2 - und S_4 -Näherung sowie den BCS-Resultaten für den Paarhamiltonoperator für verschiedene Wechselwirkungsstärken und 3 Nukleonenaare in 7 Schalen. Angaben für $|G|$, ε_k^0 und E_0 in MeV.

größere. Allerdings ist die Diskrepanz nicht ganz so drastisch wie das in Tabelle 5.2.4 der Fall war. Dies ist unter anderem darauf zurückzuführen, daß man hier eine Schale mehr unterhalb der Fermienergie hat. Abgesehen von den wieder nah an der exakten Lösung liegenden Energien ist für die größere Paarkraft auch hier das Ergebnis für die Besetzungszahlen schlechter als die Vorhersagen der BCS-Theorie. Für die kleinere Paarkraft hingegen sind die Besetzungszahlen in BCS- und in S_2 -Näherung etwa von gleicher Güte.

Betrachtet man die Resultate für die S_4 -Näherung, fällt auf, daß diese für beide Wechselwirkungsstärken genauer sind als die Vorhersagen von BCS und das obwohl jetzt die S_4 -Näherung natürlich nicht mehr identisch der exakten Lösung ist, da die höchstmögliche Anregung eine 6T6L-Anregung ist, was gleichbedeutend mit der S_6 -Näherung wäre. Da für die kleinere Wechselwirkungsstärke schon die S_2 -Näherung sehr gut ist, ist nicht verwunderlich, daß dann die S_4 -Näherung fast perfekt mit der exakten Lösung übereinstimmt. Bei der großen Paarkraft hingegen ist die Verbesserung von der S_2 - zur S_4 -Nähe-

		$ G = 0.2$				$ G = 0.3$			
		BCS	S2	S4	exakt	BCS	S2	S4	exakt
k	ε_k^0	$\langle n_k \rangle$							
1	-1.5	0.9916	0.9837	0.9859	0.9858	0.9562	0.9221	0.9595	0.9575
2	-1.0	0.9839	0.9733	0.9771	0.9770	0.9234	0.8770	0.9364	0.9334
3	-0.5	0.9588	0.9487	0.9562	0.9560	0.8454	0.7880	0.8870	0.8822
4	0.0	0.8050	0.8677	0.8836	0.8833	0.6517	0.6118	0.7539	0.7472
5	0.5	0.1950	0.1323	0.1164	0.1167	0.3483	0.3882	0.2461	0.2528
6	1.0	0.0412	0.0513	0.0438	0.0440	0.1546	0.2120	0.1131	0.1178
7	1.5	0.0161	0.0267	0.0229	0.0230	0.0766	0.1230	0.0636	0.0666
8	2.0	0.0084	0.0163	0.0141	0.0142	0.0438	0.0779	0.0405	0.0425
E_0		-6.7815	-7.1152	-7.1206	-7.1208	-7.4709	-7.8420	-8.0571	-8.0682

Tabelle 5.2.6: Vergleich der exakten Ergebnisse mit den Ergebnissen aus der S_2 - und S_4 -Näherung sowie den BCS-Resultaten für den Paarhamiltonoperator für verschiedene Wechselwirkungsstärken und 4 Nukleonenaare in 8 Schalen. Angaben für $|G|$, ε_k^0 und E_0 in MeV.

rung aber enorm, so daß auch hier eine sehr gute Übereinstimmung (ca. 1% Abweichung) zur exakten Lösung erzielt werden kann.

Ganz ähnlich stellt sich auch der Sachverhalt in Tabelle 5.2.6 dar. Hier wurde die symmetrische Füllung 4 Paare in 8 Schalen untersucht. Das oben erläuterte Verhalten der S_2 -Näherung in Abhängigkeit der Wechselwirkungsstärke findet sich auch hier wieder. Allerdings ist die S_2 -Näherung für die kleinere Paarkraft aufgrund der symmetrischen Füllung hier deutlich besser als zuvor. Bemerkenswert ist, daß die S_4 -Näherung auch für 4 Paare die exakte Lösung sehr gut approximiert obwohl die exakte Lösung der S_8 -Näherung entsprechen würde. Dies ist insbesondere für $|G| = 0.2$ der Fall. Aber auch die S_4 -Näherung für $|G| = 0.3$ ist bei einer Abweichung von 1 – 3% der Besetzungszahlen von der exakten Lösung ausgezeichnet. Für beide Paarkräfte ist auch hier die S_4 -Näherung dem BCS-Verfahren überlegen.

Auch für andere untersuchte Konfigurationen zeigen die mit dem $exp[S]$ -Verfahren erzielten Ergebnisse ein ähnliches Verhalten. Allerdings bleibt hinzuzufügen, daß mit steigender Anzahl von Schalen bzw. Paaren, anders als bei BCS, der Rechenaufwand überproportional ansteigt. Da die $exp[S]$ -Gleichungen mit Hilfe des Projektionsverfahrens gelöst werden, gibt es mit steigender Teilchenzahl immer mehr relevante Komponenten der Wellenfunktion, die berücksichtigt werden müssen und demzufolge immer mehr unbekannte s -Amplituden. Hinzu kommt, daß ein nichtlineares Gleichungssystem bei einer großen Zahl von Unbekannten naturgemäß schwieriger zu lösen ist, als ein lineares. Betrachtet man z. B. das System 10 Paare in 20 Schalen, so besteht der S_2 -Operator aus 100 Termen und der S_4 -Operator aus 2025 Termen. Man hätte also ein nichtlineares Gleichungssystem mit 2125 Unbekannten zu lösen, was zweifellos kein einfaches Unterfangen darstellt. Will man dieses System hingegen mit BCS beschreiben, so hat man lediglich je 20 Unbekannte v_k und u_k . Darüberhinaus ist die Güte der Näherung, zumindest für das hier untersuchte Paarproblem, von der Stärke der Wechselwirkung abhängig. Dies war bei den oben diskutierten Ergebnissen insbesondere bei der S_2 -Näherung zu beobachten und es ist nicht auszuschließen, daß dies bei größeren Konfigurationsräumen auch für die S_4 -Näherung gilt. Bei großen Paarkräften kann durchaus der Fall eintreten, daß z. B. eine Lösung der S_2 -Näherung zu unsinnigen Besetzungszahlen führt, so daß mindestens die S_4 -Näherung herangezogen werden muß, um ein vernünftiges Ergebnis zu erzielen. Ein ähnlicher Fall könnte bei großen Konfigurationsräumen und großen Wechselwirkungsstärken auch für die S_4 -Näherung eintreten.

Trotz dieser Vorbehalte ist es aber sicher sinnvoll, das $exp[S]$ -Verfahren zu untersuchen. Schließlich will man ja gerade eine Verbesserung gegenüber BCS erzielen. Daß eine solche Verbesserung mit einer Erhöhung des Rechenaufwands einhergeht ist nicht verwunderlich. Außerdem ist ein System mit vielen Freiheitsgraden natürlich auch komplizierter, so daß nicht zu erwarten ist, daß bei gleichem Rechenaufwand ein kleines und ein großes Vielteilchensystem gleich gut beschrieben werden können. Letztendlich ist man immer gezwungen für ein konkretes Problem eine möglichst geeignete Näherung zu finden. Für das Paarproblem und eine überschaubare Anzahl von Schalen ist die $exp[S]$ -Methode aber offensichtlich eine gute und geeignete Näherung.

5.3 Hubbard-Modell

Um das Verhalten von Elektronen zu beschreiben besteht ein vielfach untersuchter Ansatz im minimalen Hubbard-Modell, wie in Kapitel 3.3 erläutert wurde. Zur Erinnerung sei hier nochmals der Hamiltonoperator (in Ortsdarstellung) angegeben.

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} \left(a_{\uparrow i}^{\dagger} a_{\uparrow j} + a_{\downarrow i}^{\dagger} a_{\downarrow j} \right) + U \sum_i a_{\uparrow i}^{\dagger} a_{\uparrow i} a_{\downarrow i}^{\dagger} a_{\downarrow i} . \quad (5.3.1)$$

Der Summationsindex $\langle ij \rangle$ steht für Nearest-Neighbour-Hopping und bezieht sich, je nachdem ob das ein- oder zweidimensionale Hubbard-Modell untersucht wird, auf die zwei oder vier nächsten Nachbarplätze eines jeden Gitterpunkts. Das Hubbard-Modell hat, trotz des vergleichsweise einfach anmutenden Hamiltonoperators, einen hochkorrelierten Grundzustand und stellt ein kompliziertes Vielteilchenproblem dar, das nur für Spezialfälle exakt diagonalisiert werden kann.

5.3.1 Das HF-Verfahren für das Hubbard-Modell

Das Prinzip einer HF-Rechnung besteht darin, einen Zwei-Teilchen-Operator durch einen Ein-Teilchen-Operator zu approximieren. Wie dies geschieht, ist von Fall zu Fall unterschiedlich. Der zweite Term des Hubbard-Hamiltonians,

$$H_2 = U \sum_i a_{\uparrow i}^\dagger a_{\uparrow i} a_{\downarrow i}^\dagger a_{\downarrow i} = U \sum_i n_{\uparrow i} n_{\downarrow i} , \quad (5.3.2)$$

enthält den hier relevanten Zwei-Teilchen-Operator. Um diesen Operator durch einen Ein-Teilchen-Operator zu approximieren, benützt man zunächst die Identität [Dag94]

$$n_{\sigma i} = \langle n_{\sigma i} \rangle + (n_{\sigma i} - \langle n_{\sigma i} \rangle) \quad (5.3.3)$$

und nimmt dann an, daß der Term in Klammern 'klein' ist. Nun setzt man die Beziehung (5.3.3) für Spin up und Spin down in H_2 ein, vernachlässigt den in $(n_{\sigma i} - \langle n_{\sigma i} \rangle)$ quadratischen Term und erhält

$$U \sum_i n_{\uparrow i} n_{\downarrow i} \simeq U \sum_i \langle n_{\uparrow i} \rangle n_{\downarrow i} + \langle n_{\downarrow i} \rangle n_{\uparrow i} - \langle n_{\downarrow i} \rangle \langle n_{\uparrow i} \rangle . \quad (5.3.4)$$

Der Zwei-Teilchen-Operator H_2 ist so zu einer Summe zweier Ein-Teilchen-Operatoren geworden. Um nun eine HF-Rechnung durchzuführen, muß man einen geeigneten Startwert für $\langle n_{\sigma i} \rangle$ wählen. Bei gleichviel Elektronen wie Gitterplätzen scheint die Annahme

$$\langle n_{\uparrow i} \rangle = \langle n_{\downarrow i} \rangle = 0.5 \quad (5.3.5)$$

vernünftig zu sein. Bei einer genauen Analyse des Rechenaufwands und der erzielten Ergebnisse, stellt sich jedoch heraus, daß antiferromagnetisch angeordnete Elektronen näher an der Realität liegen. Dieser Sachverhalt ist für das ein- und zweidimensionale Hubbard-Modell in den Abbildungen 5.3.1 und 5.3.2 dargestellt. Eine perfekte antiferromagnetische Anordnung ist im eindimensionalen Hubbard-Modell nur bei einer geraden Anzahl von Gitterpunkten bei halber Füllung und im zweidimensionalen Hubbard-Modell nur bei einem quadratischen Gitter mit geradzahlgiger Kantenlänge und ebenfalls halber Füllung möglich. Mathematisch kann dieser Sachverhalt mit den beiden Gleichungen

$$\langle n_{\uparrow i} \rangle - \langle n_{\downarrow i} \rangle = (-1)^{\vec{i}} m \quad (5.3.6)$$

$$\langle n_{\uparrow i} \rangle + \langle n_{\downarrow i} \rangle = 1$$

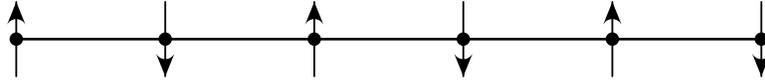


Abbildung 5.3.1: Antiferromagnetisch angeordnete Elektronenspins im eindimensionalen Hubbard-Modell.

beschrieben werden. Hierbei ist m ein Variationsparameter, der im Verlaufe der HF-Rechnung bestimmt wird, und den man als eine Art Magnetisierung auffassen kann, da er im Prinzip die Ungleichbesetzung der beiden Spinzustände angibt. Setzt man $m = 1$ erhält man die perfekt antiferromagnetische Anordnung, wie sie in den Abbildungen auf dieser Seite dargestellt ist. Löst man die Gleichungen (5.3.6) nach den Erwartungswerten $\langle n_{\sigma i} \rangle$ auf, ergibt sich

$$\langle n_{\uparrow i} \rangle = \frac{1}{2} \left[1 + (-1)^i m \right] \quad (5.3.7)$$

$$\langle n_{\downarrow i} \rangle = \frac{1}{2} \left[1 - (-1)^i m \right]$$

Setzt man die Beziehungen (5.3.7) in (5.3.4) ein, erhält man

$$U \sum_i n_{\uparrow i} n_{\downarrow i} \simeq \frac{Um}{2} \sum_i (-1)^i (n_{\downarrow i} - n_{\uparrow i}) + \frac{UN}{4} m^2. \quad (5.3.8)$$

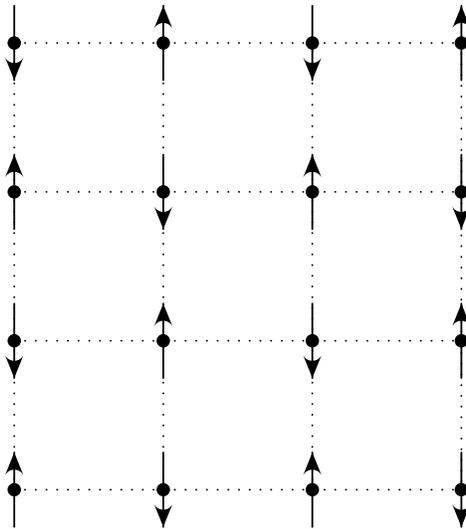


Abbildung 5.3.2: Antiferromagnetisch angeordnete Elektronenspins im zweidimensionalen Hubbard-Modell.

In Ortsdarstellung hat man jetzt also einen nur aus Ein-Teilchen-Operatoren bestehenden Potentialterm, der von m abhängt. Nun nützt man aus, daß $(-1)^{\vec{i}} = e^{i(\vec{i}\vec{Q})}$ gilt, wobei im eindimensionalen Fall $Q = \pi$ und im zweidimensionalen Fall $\vec{Q} = (\pi, \pi)$ zu wählen ist, und führt ein Fouriertransformation von (5.3.8) auf dem Gitter aus. Insgesamt erhält man so für den Hamiltonoperator (5.3.1) in Impulsdarstellung

$$H = \sum_{\sigma k} \varepsilon(k) c_{\sigma k}^{\dagger} c_{\sigma k} - \frac{U}{2} m \sum_k \left[c_{\uparrow k+Q}^{\dagger} c_{\uparrow k} - c_{\downarrow k+Q}^{\dagger} c_{\downarrow k} \right] + \frac{UN}{4} m^2. \quad (5.3.9)$$

Da man im Hubbard-Modell mit periodischen Randbedingungen arbeitet, kann man den letzten Ausdruck als eine Summe über die reduzierte Brillouin-Zone (halbe Periode) und mit Hilfe einer 2×2 -Matrix, die jeweils die Zustände $|k\rangle$ und $|k+Q\rangle$ verknüpft, umschreiben in

$$H = \sum_{\sigma, k \in \mathcal{B}} \begin{pmatrix} c_{\sigma k}^{\dagger} & c_{\sigma k+Q}^{\dagger} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon(k) & \frac{Um}{2} \\ \frac{Um}{2} & \varepsilon(k+Q) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\sigma k} \\ c_{\sigma k+Q} \end{pmatrix} + \frac{UN}{4} m^2. \quad (5.3.10)$$

Für jedes k aus der reduzierten Brillouin-Zone hat man also nur eine 2×2 -Matrix zu diagonalisieren. Da außerdem $\varepsilon(k) = -\varepsilon(k+Q)$ gilt, erhält man für die Eigenwerte und Entwicklungskoeffizienten der 2×2 -Matrizen einfach

$$E_k = \pm \sqrt{\varepsilon_k^2 + \frac{U^2 m^2}{4}} \quad (5.3.11)$$

$$\nu_{k\pm}^2 = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\varepsilon_k}{E_k} \right].$$

Wie gesagt, ist m ein Parameter, der im Verlaufe der Rechnung bestimmt werden muß. Neben einer iterativen Lösung ist es auch möglich m mit dem Variationsprinzip zu bestimmen. Nach einer Diagonalisierung von (5.3.10) gilt für den Grundzustandserwartungswert von H (für einen der beiden Spins)

$$\langle H \rangle = - \sum_k \sqrt{\varepsilon_k^2 + \frac{U^2 m^2}{4}} + \frac{UN}{4} m^2. \quad (5.3.12)$$

Führt man die Variation bezüglich m aus,

$$\frac{\partial}{\partial m} \langle H \rangle = 0, \quad (5.3.13)$$

erhält man aus (5.3.12)

$$\frac{1}{2} \sum_k \frac{U^2 m/2}{\sqrt{\varepsilon_k^2 + \frac{U^2 m^2}{4}}} - \frac{UN}{2} m = 0. \quad (5.3.14)$$

Setzt man nun noch $Um/2 = \Delta$ und $U/N = |G|$, erhält man

$$\Delta = \frac{1}{2} \sum_k \frac{|G|}{\sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta^2}} \Delta, \quad (5.3.15)$$

also wieder die schon im Rahmen der BCS-Theorie (Abschnitt 5.2.1) diskutierte Gap-Gleichung.

Für halbe Füllung und periodische Randbedingungen führt das HF-Verfahren für das Hubbard-Modell also offensichtlich zur selben Gleichung wie der BCS-Ansatz für den Paarhamiltonian. Betrachtet man aber den Hamiltonoperator des Hubbard-Modells (5.3.1) unter der Annahme eines negativen (attraktiven) Werts für U , ist das nicht mehr sonderlich erstaunlich, da man dann ein Plus an Bindungsenergie erhält, wenn sich zwei Elektronen mit entgegengesetztem Spin auf demselben Gitterplatz befinden, was letztlich die wesentliche Eigenschaft des Paarhamiltonoperators war. Trotzdem ist es bemerkenswert, daß man aus zwei auf den ersten Blick unterschiedlichen Ansätzen, also Variation nach v_k bzw. u_k bei BCS gegenüber einem antiferromagnetischen Startzustand und linearisierter Zwei-Teilchen-Wechselwirkung beim Hubbard-Modell, auf dasselbe Ergebnis kommt.

5.3.2 Diskussion der HF-Resultate

Die Durchführung einer HF-Rechnung für das Hubbard-Modell kann auf unterschiedliche Arten bewerkstelligt werden. In der Impulsdarstellung ist eine Lösung der Gap-Gleichung am besten geeignet. Will man die Rechnung jedoch in der Ortsdarstellung ausführen, bietet es sich an einen Startwert für die Magnetisierung ($0 < m \leq 1$) zu wählen und zu iterieren, bis sich die Magnetisierung nicht mehr ändert. In Tabelle 5.3.1 sind einige Ergebnisse für das eindimensionale Hubbard-Modell im Ortsraum aufgeführt.

Als erstes fällt auf, daß der antiferromagnetische Startzustand für beide Wechselwirkungsstärken teilweise überlebt hat. Es bildet sich eine asymmetrische Besetzung jedes Gitterpunktes aus, wobei die Besetzungszahlen von Gitterpunkt zu Gitterpunkt alternieren. Die Grundzustandsenergie liegt deutlich unter dem exakten Resultat und wird mit zunehmendem U etwas schlechter. Trotzdem ist das HF-Verfahren in Anbetracht seiner Einfachheit hier eine recht gute Näherung. Allerdings erkennt man sofort, daß die erhaltene Lösung nicht translationsinvariant ist. In der Tat erhält man genau eine um einen Gitterpunkt verschobene Lösung für die Besetzungszahlen, wenn man im Startzustand Spin up und Spin down vertauscht. Eine solche Lösung ist in Abbildung 5.3.3 grafisch dargestellt. Bei periodischen Randbedingungen sollte eine vernünftige Lösung selbstverständlich translationsinvariant sein. Eine sinnvolle Lösung ist hier eine Linearkombination der in Abbildung 5.3.3 dargestellten mit der um einen Gitterpunkt verschobenen Lösung. Mit Hilfe der Besetzungszahlen in Tabelle 5.3.1 kann man sich überzeugen, daß man

	$U/t = 3$				$U/t = 4$			
	HF		exakt		HF		exakt	
i	$\langle n_{\uparrow i} \rangle$	$\langle n_{\downarrow i} \rangle$	$\langle n_{\uparrow i} \rangle$	$\langle n_{\downarrow i} \rangle$	$\langle n_{\uparrow i} \rangle$	$\langle n_{\downarrow i} \rangle$	$\langle n_{\uparrow i} \rangle$	$\langle n_{\downarrow i} \rangle$
0	0.2231	0.7769	0.5000	0.5000	0.1211	0.8789	0.5000	0.5000
1	0.7769	0.2231	0.5000	0.5000	0.8789	0.1211	0.5000	0.5000
2	0.2231	0.7769	0.5000	0.5000	0.1211	0.8789	0.5000	0.5000
3	0.7769	0.2231	0.5000	0.5000	0.8789	0.1211	0.5000	0.5000
4	0.2231	0.7769	0.5000	0.5000	0.1211	0.8789	0.5000	0.5000
5	0.7769	0.2231	0.5000	0.5000	0.8789	0.1211	0.5000	0.5000
E_0	-3.6513		-4.4334		-2.8363		-3.6687	

Tabelle 5.3.1: Vergleich von HF und exaktem Ergebnis für das eindimensionale Hubbard-Modell im Ortsraum. Angaben für E_0 in eV.

bei gleicher Gewichtung beider Lösungen genau die exakte Besetzungszahl von 0.5 für jeden Gitterpunkt erhält. Auch für andere geradzahlige Gitter mit halber oder anderer Füllung sind die Ergebnisse für die Besetzungszahlen äquivalent zu den hier beispielhaft angeführten. Bei halber Füllung erhält man für die Besetzungszahlen immer 0.5. Bei anderer Füllung dementsprechend n/N , wobei n die Anzahl der Spin up oder Spin down Elektronen und N die Gitterlänge ist. Bei ungeradzahligen Gittern erzeugt die antiferro-

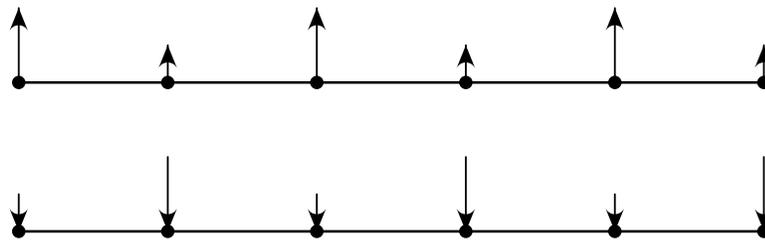


Abbildung 5.3.3: Eine mögliche, nicht translationsinvariante Lösung des HF-Verfahrens für das eindimensionale Hubbard-Modell. Die Länge der Pfeile repräsentiert die Besetzungszahl am entsprechenden Gitterpunkt.

magnetische Anordnung der Elektronen Defektstellen, da dann, unter Berücksichtigung der Periodizität, notgedrungen irgendwo im Gitter zwei Elektronen mit gleichem Spin auf benachbarten Plätzen sitzen müssen. Dies führt dazu, daß es nicht mehr so einfach gelingt, eine translationsinvariante Lösung zu finden, da diese Defektstelle überlebt und die resultierenden Besetzungszahlen nicht mehr alternierend sind. Für diesen Fall ist auch die oben hergeleitete Gap-Gleichung nicht mehr korrekt, da für die Ein-Teilchen-Energien

$$\varepsilon(k) = -2t \cos(k) \quad \text{mit} \quad k = \frac{2\pi}{N} n_k \quad (5.3.16)$$

gilt, ist $2\pi n_k$ geradzahliges Vielfaches von π für alle n_k während mit $Q = \pi$

$$k + Q = \frac{2\pi n_k + N\pi}{N} \quad (5.3.17)$$

ist und der Zähler des rechten Terms bei ungeradzahligem N ein ungeradzahliges Vielfaches von π ist, so daß $\varepsilon(k) \neq -\varepsilon(k + Q)$ ist. In Impulsdarstellung darf die oben hergeleitete Gap-Gleichung also nur für geradzahlige Gitter herangezogen werden. Eine Iteration des linearisierten Hamiltonoperators in Ortsdarstellung ist hingegen auch für ungeradzahlige Gitter möglich, allerdings scheint in diesem Fall der imperfekte antiferromagnetische Startzustand nicht unbedingt ideal zu sein.

Da sowohl die HF-Rechnung als auch die exakte Diagonalisierung des Hubbard-Hamiltonians im Ortsraum zu einer Gleichverteilung der Besetzungszahlen führt, kann die Angabe der Resultate im Impulsraum weitere Aufschlüsse geben. Aus diesem Grund sind in Tabelle 5.3.2 die Ergebnisse für dieselbe Konfiguration und dieselben Wechselwirkungsstärken in der Impulsdarstellung angegeben. Die Erwartungswerte der Besetzungszahlen $\langle n_{\sigma k} \rangle$ sind jetzt nicht mehr entartet, sondern man sieht eine deutliche Impulsabhängigkeit. Da hier die kinetische Energie diagonal ist, macht es jetzt auch Sinn, die zu den Zuständen $|k\rangle$ gehörenden Ein-Teilchen-Energien ε_k anzugeben. Es zeigt sich, daß die entsprechenden Besetzungszahlen vernünftig sind, da z. B. der energetisch tiefste diskrete Ein-Teilchen-Zustand auch am stärksten besetzt ist. Allerdings erkennt man jetzt deutliche Abweichungen zwischen den exakten und den HF-Besetzungszahlen, die im Ortsraum, zumindest nachdem man die Linearkombination der beiden möglichen Lösungen gebildet hat, nicht zu sehen waren. Diese Tatsache ist auf unterschiedliche Nebendiagonalelemente der Ortsraum-Dichtematrizen, die sich aus der HF-Rechnung bzw. der exakten Diagonalisierung ergeben, zurückzuführen. Neben der direkten Lösung der Gap-Gleichung im Impulsraum ist es selbstverständlich auch möglich die im Ortsraum berechneten Besetzungszahlen mit einer Fouriertransformation in den Impulsraum zu überführen, wobei die Resultate selbstredend identisch sein müssen. Mit Hilfe der periodischen Randbedingungen und unter Ausnützung von $e^{i\Phi} = \cos(\Phi) + i \sin(\Phi)$, sowie der Tatsache, daß der Sinus eine ungerade Funktion ist, erhält man

$$\langle n_{\sigma k} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{ij} \cos[k(i-j)] \rho_{\sigma ij} , \quad (5.3.18)$$

		$U/t = 3$				$U/t = 4$			
		HF		exakt		HF		exakt	
$k \left[\frac{2\pi}{6} \right]$	ε_k	$\langle n_{\uparrow k} \rangle$	$\langle n_{\downarrow k} \rangle$	$\langle n_{\uparrow k} \rangle$	$\langle n_{\downarrow k} \rangle$	$\langle n_{\uparrow k} \rangle$	$\langle n_{\downarrow k} \rangle$	$\langle n_{\uparrow k} \rangle$	$\langle n_{\downarrow k} \rangle$
0	-2.0	0.9618	0.9618	0.9549	0.9549	0.8985	0.8985	0.9229	0.9229
1	-1.0	0.8846	0.8846	0.9247	0.9247	0.7754	0.7754	0.8689	0.8689
2	1.0	0.1154	0.1154	0.0753	0.0753	0.2246	0.2246	0.1311	0.1311
3	2.0	0.0382	0.0382	0.0451	0.0451	0.1015	0.1015	0.0771	0.0771
4	1.0	0.1154	0.1154	0.0753	0.0753	0.2246	0.2246	0.1311	0.1311
5	-1.0	0.8846	0.8846	0.9247	0.9247	0.7754	0.7754	0.8689	0.8689
E_0		-3.6513		-4.4334		-2.8363		-3.6687	

Tabelle 5.3.2: Vergleich von HF und exaktem Ergebnis für das eindimensionale Hubbard–Modell im Impulsraum. Angaben für ε_k und E_0 in eV.

wobei $\rho_{\sigma ij}$ die Dichtematrix im Ortsraum ist. Da die Besetzungszahlen in der Ortsdarstellung, also die Diagonalelemente der Dichtematrix, für die exakte und die HF–Lösung identisch waren, muß der Unterschied der Besetzungszahlen in der Impulsdarstellung von den Nebendiagonalelementen von $\rho_{\sigma ij}$ herrühren. Für $U/t = 4$ wird die Bevölkerung der Ein–Teilchen–Niveaus mit positiven Energien überschätzt, während die Entvölkerung unterhalb der Fermienergie überschätzt wird. Für $U/t = 3$ ist das Bild nicht so einheitlich, da die Besetzungszahlen teils über– und teils unterschätzt werden. Die Qualität der HF–Näherung hängt offensichtlich von U/t ab. Bei 6 Gitterplätzen liefert HF für $U/t < 2$ die trivialen Besetzungszahlen 0 und 1 aus den schon bei der Diskussion der Gap–Gleichung angeführten Gründen (Kapitel 5.2.2).

Bleibt noch anzumerken, daß für die beiden Grenzfälle $U/t \rightarrow 0$ und $U/t \rightarrow \infty$ die HF–Lösung mit der exakten Lösung übereinstimmt, wovon man sich leicht überzeugt indem man in der Beziehung

$$\langle n_{\sigma k} \rangle = \nu_k^2 = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\varepsilon_k}{\sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta^2}} \right] \quad (5.3.19)$$

die Werte $\Delta = 0$ und $\Delta \rightarrow \infty$ einsetzt und für die Besetzungszahlen die erwarteten Werte

1 oder 0 und 0.5 erhält.

Weitere HF-Ergebnisse für andere Konfigurationen sollen hier nicht gegeben werden, da diese im Zusammenhang der mit dem SCGF-Verfahren erzielten Ergebnisse noch diskutiert werden. Auch für das zweidimensionale Hubbard-Modell sind die Ergebnisse der HF-Rechnung mit den hier für das eindimensionale angeführten vergleichbar. Eine Angabe der Resultate für das zweidimensionale Hubbard-Modell ist hier nicht sinnvoll, da wegen der Forderung nach geradzahliger Kantenlänge nur das 2×2 -Hubbard-Modell noch exakt diagonalisiert werden kann. Die Dimension der exakten Matrix für das 4×4 -Hubbard-Modell beträgt schon 1.7×10^8 . Auch die HF-Ergebnisse werden im Zusammenhang mit dem SCGF-Verfahren noch diskutiert (Kapitel 5.3.4) und sind außerdem in der Literatur zu finden [Dag94, Geb97].

5.3.3 Lösung mit Lanczos

Zumindest für das eindimensionale Hubbard-Modell bis zu einer Gittergröße von ~ 12 stellt das Lanczos-Verfahren eine sehr effektive Methode zur quasiexakten Diagonalisierung des Hubbard-Hamiltonian dar. Unter quasiexakter Diagonalisierung ist hier die in der Grundzustandsenergie konvergente Lanczos-Diagonalisierung zu verstehen, da diese alle Grundzustandseigenschaften perfekt reproduziert. Wählt man als Startzustand eine Linearkombination der beiden möglichen antiferromagnetischen Zustände

$$|\alpha_{\text{start}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \begin{array}{c} 1010 \dots \\ 0101 \dots \end{array} \right\rangle + \left| \begin{array}{c} 0101 \dots \\ 1010 \dots \end{array} \right\rangle \right), \quad (5.3.20)$$

so erreicht man sehr schnell Konvergenz. In Tabelle 5.3.3 sind Ergebnisse für eine Lanczos Diagonalisierung im Vergleich zum exakten Resultat dargestellt. Schon bei nur 6 generierten Lanczos-Vektoren erhält man eine sehr gute Näherung für Energie und Besetzungszahlen. Bei 12 Lanczos-Vektoren sind die Abweichungen bereits minimal. Konvergenz tritt bei einem Basissatz der Größe 18 auf. Auch die Lanczos-Lösung mit nur 6 Vektoren ist dem HF-Verfahren deutlich überlegen, da letzteres insbesondere die Grundzustandsenergie deutlich unterschätzt.

Betrachtet man die Ergebnisse, so stellt man fest, daß das Lanczos-Verfahren auf das Hubbard-Modell angewandt, noch schneller konvergiert, als das bei der Paarwechselwirkung der Fall war. Wenn man bedenkt, daß die Dimension der exakten Matrixdarstellung des Hamiltonoperators für das eindimensionale Hubbard-Modell mit 8 Gitterplätzen und halber Füllung 4900 beträgt ist es überraschen, daß schon nach 18 Lanczos-Schritten Konvergenz eintritt. Der Grund für dieses erfreuliche Verhalten ist wieder in der antiferromagnetischen Struktur des Startvektors zu suchen. Schon bei der Diskussion der HF-Lösung für das Hubbard-Modell wurde eine antiferromagnetische Anordnung der Elektronen als initiale Besetzung gewählt, um schnellere Konvergenz zu erzielen. Je nachdem ob man

		$N_{\mathcal{B}}$ 6	$N_{\mathcal{B}}$ 12	$N_{\mathcal{B}}$ 18	exakt $N_{\mathcal{B}} = 4900$	HF
$k \left[\frac{2\pi}{8} \right]$	ε_k	$\langle n_{\uparrow k} \rangle$	$\langle n_{\uparrow k} \rangle$			
0	-2.00	0.9083	0.9137	0.9140	0.9140	0.8959
1	-1.41	0.8743	0.8819	0.8826	0.8826	0.8379
2	0.00	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000
3	1.41	0.1257	0.1180	0.1174	0.1174	0.1621
4	2.00	0.0917	0.0861	0.0860	0.0860	0.1041
5	1.41	0.1257	0.1180	0.1174	0.1174	0.1621
6	0.00	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000
7	-1.41	0.8743	0.8819	0.8826	0.8826	0.8379
E_0		-4.3313	-4.6031	-4.6035	-4.6035	-3.7486

Tabelle 5.3.3: Besetzungszahlen und Grundzustandsenergie für das eindimensionale Hubbard–Modell, 8 Gitterplätze, halbe Füllung, $U/t = 4$ und unterschiedliche Anzahlen von generierten Lanczos–Vektoren. Zum Vergleich ist auch die HF–Lösung angegeben. Angaben für ε_k und E_0 in eV.

den ersten Gitterplatz überwiegend mit Spin up oder mit Spin down besetzt, erhielt man die zwei um einen Gitterpunkt verschobenen, alternierende Lösungen, die in Abbildung 5.3.3 dargestellt sind. Im Umkehrschluß wurde beim Lanczos–Verfahren die Linearkombination dieser beiden antiferromagnetischen Zustände als Startzustand gewählt, was in einer deutlich schnelleren Konvergenz resultiert, verglichen mit einem anderen Startvektor wie etwa nur einem der beiden antiferromagnetischen Zustände oder einem anderen beliebigen Zustand.

Aus dieser Tatsache läßt sich schließen, daß die antiferromagnetische Anordnung der Elektronen offensichtlich eine sehr wichtige Komponente der exakten Lösung darstellt. Abgesehen von den deutlichen Hinweisen auf diese Eigenschaft der Lösung, die man anhand der Ergebnisse für das HF–Verfahren und das Lanczos–Verfahren erhalten hat, ist dieses Verhalten darüberhinaus aus den folgenden Gründen auch sehr plausibel.

1. Bei perfekt antiferromagnetisch angeordneten Elektronen sind keine Plätze doppelt besetzt. Es gibt keine Repulsion.
2. Da der Energiegewinn aus dem Nearest–Neighbour–Hopping resultiert, ist es besonders günstig, wenn es allen Elektronen möglich ist, sich nach links und nach rechts zu bewegen. Diese beidseitige Bewegung ist nur dann möglich, wenn jeder Nachbar eines Elektrons den zu seinem entgegengesetzten Spin hat.

Es ist also einleuchtend diesen energetisch ausgezeichneten Startzustand für das Lanczos–Verfahren zu wählen, um auf ihm aufbauend im Verlaufe der Iteration die anderen relevanten Komponenten der Wellenfunktion zu generieren. Hilfreich ist hierbei auch, daß dieser symmetrisierte Startzustand schon translationsinvariant ist, so daß diese Symmetrie nicht erst im Verlaufe der Iteration hergestellt werden muß. Wählt man einen anderen, nicht translationsinvarianten Startzustand, sind folgerichtig für ein Erreichen von Konvergenz deutlich mehr Iterationsschritte erforderlich.

Ohne besondere numerische Vorgehensweisen wie Kompression, Parallelisierung und ausnutzen von Symmetrieeigenschaften ist es relativ problemlos möglich, den Hamiltonoperator für das eindimensionale Hubbard–Modell bis zu einer Gittergröße von 8 exakt zu diagonalisieren. Das Lanczos–Verfahren hingegen ermöglicht die quasiexakte Diagonalisierung bis zu einer Gittergröße von 12, ebenfalls ohne daß besondere numerische Vorgehensweisen gewählt werden müssen. In Abbildung 5.3.4 ist das Verhalten des tiefsten Energieeigenwerts in Abhängigkeit der Anzahl der generierten Lanczos–Vektoren für das eindimensionale Hubbard–Modell für 12 Gitterplätze und halbe Füllung abgebildet. Es ist deutlich zu erkennen, daß sich der tiefste Energieeigenwert ab ~ 15 generierten Lanczos–Vektoren nicht mehr ändert (numerische Konvergenz mit einer Genauigkeit von 10^{-4} wird allerdings erst bei 20 Lanczos–Vektoren erreicht). Man benützt das Erreichen eines konstanten Werts für den tiefsten Energieeigenwert im Verlaufe der Lanczos–Iteration also als Konvergenzkriterium, für eine quasiexakte Diagonalisierung. Das Lanczos–Verfahren ermöglicht so bis zu einer Gittergröße von 12 den Vergleich der exakten Grundzustandseigenschaften mit den Ergebnissen anderer Näherungen, wie etwa dem im nächsten Abschnitt folgenden SCGF–Verfahren. Da dort die exakten Resultate bis $N = 12$ angegeben sind, werden sie hier nicht diskutiert.

Abschließend sei noch bemerkt, daß eine Verfeinerung der Programmiertechnik des Lanczos–Verfahrens eine quasiexakte Diagonalisierung auch für größere Cluster ermöglicht. In der Literatur finden sich viele Arbeiten, die das Lanczos–Verfahren perfektioniert haben um die zugängliche Gittergröße zu erhöhen. Die wohl wichtigsten Arbeiten auf diesem Gebiet stammen von Dagotto oder Feng [Dag92a, Dag92b, Dag94, Fen92], denen es erstmals gelang, das Lanczos–Verfahren erfolgreich für das 4×4 –Hubbard–Modell anzuwenden und die exakte Grundzustandsenergie sowie die Spektralfunktionen für verschiedenen Füllungen zu bestimmen. Der Hilbertraum für das 4×4 –Hubbard–Modell hat die Dimension

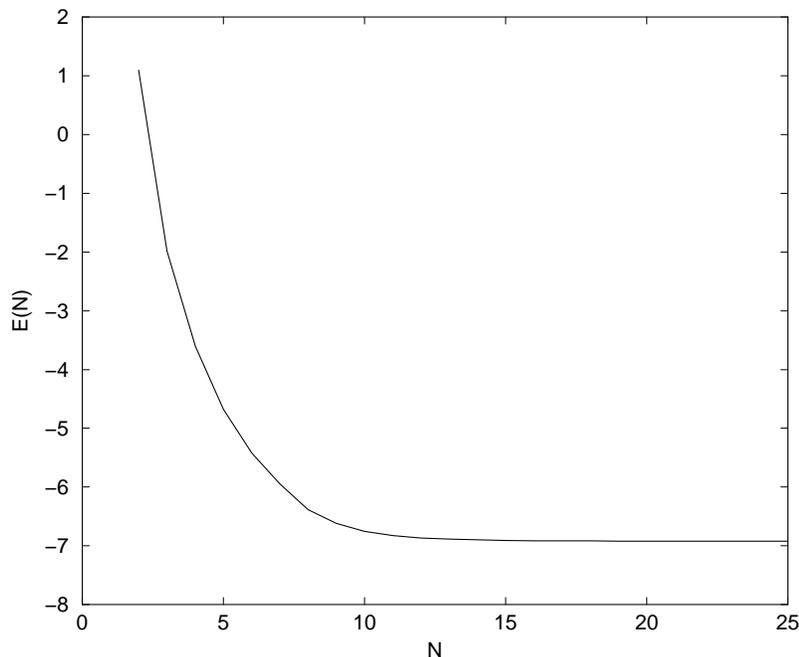


Abbildung 5.3.4: Konvergenz der Grundzustandsenergie bei einer Lanczos–Diagonalisierung für das eindimensionale Hubbard–Modell, 12 Gitterplätze und halbe Füllung. Aufgetragen ist der tiefste Energieeigenwert in Abhängigkeit der Anzahl der generierten Lanczos–Vektoren.

1.7×10^8 . Durch Ausnutzung aller Symmetrien und geschickte Programmierung konnten die Autoren sich auf einen Unterraum der Dimension 1.35×10^6 beschränken. Bis heute gilt das Gitter der Größe 16 als Obergrenze für die Durchführbarkeit einer Lanczos–Rechnung, was sich erst mit Hilfe immens verbesserter Großrechner ändern dürfte.

Da mit den in dieser Arbeit verwendeten, nicht optimierten Programmen lediglich das uninteressante 2×2 –Hubbard–Modell untersucht werden könnte und nichtquadratische oder Gitter mit ungerader Kantenlänge aus den im Rahmen der Diskussion der HF–Rechnung angegebenen Gründen ungeeignet sind, sollen hier keine Lanczos–Lösungen für das zweidimensionale Hubbard–Modell angegeben werden.

5.3.4 Eindimensionales Hubbard–Modell und SCGF–Verfahren

Hier sollen zunächst einige grundsätzliche Eigenschaften des SCGF–Verfahrens bei einer Anwendung auf das Hubbard–Modell erläutert werden, bevor die einzelnen Ergebnisse wie Besetzungszahlen, Grundzustandsenergie und spektroskopische Information diskutiert werden.

Konvergenzverhalten

Die im Verlaufe der SCGF-Iteration verwendete Reduktion der sich ergebenden Matrix mit Hilfe des Lanczos-Verfahrens (siehe z. B. Abbildung 2.1.8 und Kapitel 2.2.2), sorgt dafür, daß man sich während einer Rechnung immer auf eine bestimmte maximale Polanzahl für die Greensfunktion beschränkt. Diese Vorgehensweise ist unerlässlich, da sonst die Anzahl der Pole und somit die Dimension der zu diagonalisierenden Matrix explodieren, und das Verfahren divergent werden würde. Deswegen sollte man die Rechnung für ein bestimmtes Gitter bei festem U/t für verschiedenen Maximalanzahlen von Polen durchführen um eine globale Konvergenzaussage machen zu können. In Tabelle 5.3.4 sind die Ergebnisse für das eindimensionale Hubbard-Modell für verschiedene Maximalanzahlen von Polen aufgelistet. Die Angabe (p, q) bezieht sich dabei auf die entsprechende BAGEL-Näherung. So bedeutet die BAGEL-(1, 2)-Näherung, daß für jedes Teilchen neben dem Quasiteilchen-Pol ein weiterer Pol unter und zwei weitere Pole über der Fermienergie berücksichtigt werden. Da sich die Angaben in untenstehender Tabelle auf ein Gitter der Länge 6 beziehen, erhöht sich die Gesamtdimension der mit dem Lanczos-Verfahren reduzierten Matrix demzufolge jeweils um 6. Würde man die Dimension von Schritt zu Schritt um weniger als 6 erhöhen wäre dies gleichbedeutend damit, daß nicht für jedes k

(p, q) N_{tot}	(0, 1) 12	(1, 1) 18	(1, 2) 24	(2, 2) 30	(2, 3) 36	(3, 3) 42
ε_k	$\langle n_{\uparrow k} \rangle$					
-2.0	0.8902	0.8984	0.8977	0.8983	0.8984	0.8983
-1.0	0.7708	0.7840	0.7849	0.7853	0.7862	0.7858
1.0	0.2100	0.2160	0.2127	0.2147	0.2135	0.2142
2.0	0.0931	0.1016	0.1005	0.1017	0.1014	0.1017
1.0	0.2100	0.2160	0.2127	0.2147	0.2135	0.2142
-1.0	0.7708	0.7840	0.7849	0.7853	0.7862	0.7858
E_0	-3.3010	-3.3274	-3.3576	-3.3294	-3.3287	-3.3277

Tabelle 5.3.4: Besetzungszahlen und Grundzustandsenergie für das eindimensionale Hubbard-Modell in Abhängigkeit der Maximalanzahl von Polen in der Ein-Teilchen-Greensfunktion für 6 Gitterplätze, $U/t = 4$ und halbe Füllung. Angaben für ε_k und E_0 in eV.

die gleiche Anzahl von Polen erlaubt wird, was ein wenig aussagekräftiges Ergebnis liefern würde.

Betrachtet man nun die Besetzungszahlen und die Grundzustandsenergie, erkennt man, daß die Änderung der Größen mit wachsender Dimension bzw. Polanzahl minimal sind. Lediglich zwischen der BAGEL-(0, 1)- und der BAGEL-(1, 1)-Näherung ist ein deutlicherer Unterschied zu erkennen, was auf das Fehlen der zusätzlichen Pole unterhalb der Fermikante zurückzuführen ist (keine 2L1T-Konfigurationen berücksichtigt). Sobald man aber auch Pole mit 2L1T-Charakter zuläßt, ist das Resultat sehr stabil. Insbesondere zwischen den (in 2T1L und 2L1T symmetrischen) (1, 1)-, (2, 2)- und (3, 3)-Näherungen besteht kaum ein Unterschied, so daß man schon die (1, 1)-Näherung als nahezu konvergent ansehen kann. Da die (3, 3)-Näherung bei 6 Gitterplätzen schon die Reduktion einer Matrix der Dimension 30 000 beinhaltet, ist es erfreulich, daß man sich schon mit der bedeutend weniger aufwendigen (1, 1)-Näherung zufrieden geben kann. Da der Rechenaufwand und somit die Dimension der zu reduzierenden Matrix stark mit der Gittergröße ansteigt, ist dies für größere oder quadratische Gitter umso wichtiger, da man z. B. beim 6×6 -Hubbard-Modell nicht mehr in der Lage ist, mehr als die (1, 1)-Näherung zu bestimmen. Da das Konvergenzerhalten auch für andere, noch handhabbare Gitter dem in Tabelle 5.3.4 dargestellten entspricht, ist im folgenden mit einem SCGF-Resultat immer die (1, 1)-Näherung gemeint.

U/t -Abhängigkeit der Lösung

Wie erwähnt hängt die Qualität der HF-Näherung von U/t ab. Eine Analyse der SCGF-Resultate für verschiedene U/t zeigt, daß auch die Qualität der SCGF-Näherung von U/t abhängig ist. Deswegen ist in Abbildung 5.3.5 die Differenz zwischen der exakten Grundzustandsenergie und der mit HF bzw. SCGF erzielten Grundzustandsenergie grafisch dargestellt. Zunächst ist zu sehen, daß für $U/t \rightarrow 0$ sowohl HF als auch SCGF mit der exakten Energie übereinstimmen (die Differenz $E_0 - E_N$ also Null ist). Dies muß auch so sein, da sich in diesem Fall die Gesamtenergie auf die kinetische Energie reduziert.

Mit wachsendem U/t wächst dann die Differenz zwischen HF-Energie und exakter Energie stärker an als die entsprechende mit der SCGF-Energie gebildete Differenz. Bis $U/t \simeq 6$ unterschätzen beide Näherungsverfahren die exakte Energie, die Energiedifferenz ist negativ was bedeutet, daß die exakte Energie tiefer ist als die HF- oder SCGF-Energie. Außerdem ist zu erkennen, daß bei $U/t \simeq 3.5$ bis 4 eine maximale Unterschätzung beider Verfahren erreicht wird während für $U/t > 4$ der Fehler wieder geringer wird. Bemerkenswert ist, daß bei $U/t \simeq 6$ das SCGF-Verfahren die Nulllinie schneidet und für $U/t > 6$ die exakte Grundzustandsenergie überschätzt. Dies stellt jedoch keinen systematischen Fehler dar, da das SCGF-Verfahren kein Variationsverfahren ist und somit eine Überschätzung

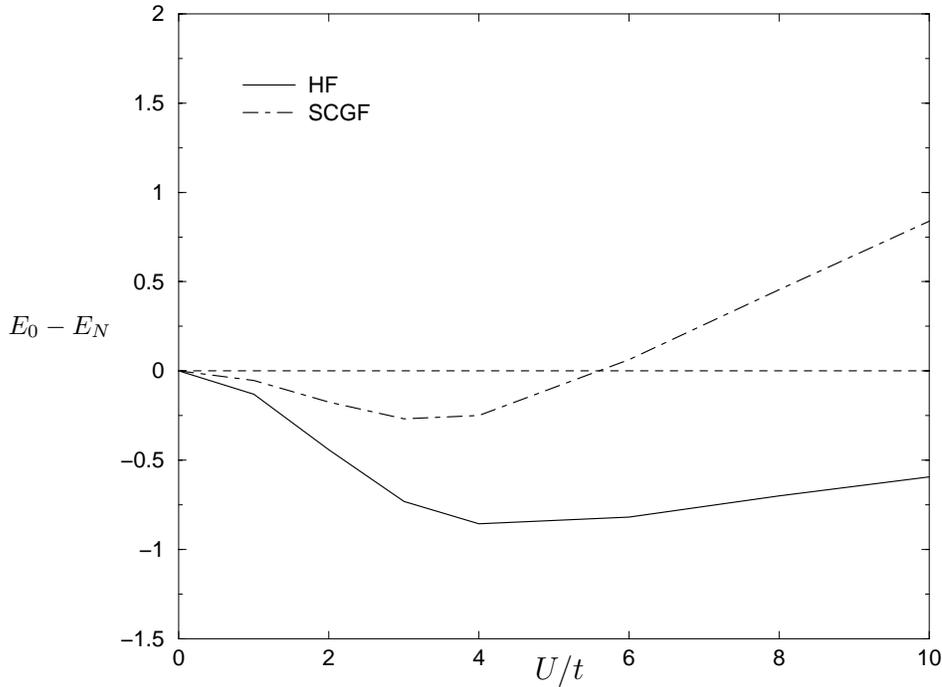


Abbildung 5.3.5: Grundzustandsenergiedifferenzen zwischen der exakten Lösung (E_0) und der HF- bzw. SCGF-Näherung (E_N) in Abhängigkeit von U/t für 8 Gitterplätze bei halber Füllung.

der Energie nicht ausgeschlossen werden kann. Für dieses etwas überraschende Verhalten der SCGF-Energie gibt es die folgenden Ursachen:

1. Ein Effekt der Fragmentierung der Ein-Teilchen-Stärke im Verlauf einer SCGF-Rechnung ist eine Absenkung der Grundzustandsenergie relativ zur HF-Lösung. Da die HF-Energie mit größer werdendem U/t ihrerseits wieder näher an die exakte Energie heranrückt, führt die Energieabsenkung infolge der SCGF-Rechnung zu einer Überschätzung der Grundzustandsenergie.
2. Das SCGF-Verfahren ist ein störungstheoretisches Verfahren, das naturgemäß eher im Bereich kleiner Wechselwirkungsstärken eingesetzt werden sollte.
3. Im SCGF-Verfahren werden nur bestimmte Selbstenergieeinschübe zweiter Ordnung berücksichtigt. Mit wachsender Wechselwirkungsstärke nimmt die Wichtigkeit der nicht berücksichtigten Selbstenergieeinschübe zweiter und höherer Ordnung zu. Diese könnten wiederum zu einer Anhebung der Grundzustandsenergie führen.

Das Verhalten der Lösung in Abhängigkeit von U/t ist qualitativ auch für andere Gittergrößen so, wie es in Abbildung 5.3.5 dargestellt wurde. Lediglich der Kreuzungspunkt

zwischen der exakten und der SCGF–Energie sowie die absolute Größe des Fehlers variieren leicht mit der Gitterlänge. Zusammenfassend läßt sich sagen, daß das SCGF–Verfahren bis $U/t \simeq 8$ ein besseres Ergebnis für die Grundzustandsenergie liefert als HF und insbesondere im Bereich kleiner bis mittlerer Wechselwirkungsstärken eine sehr gute Näherungslösung darstellt.

SCGF und exakte Lösung im Vergleich

Hier sollen einige Resultate für das eindimensionale Hubbard–Modell mit der exakten und der HF–Lösung verglichen werden. Da mit dem verwendeten Lanczos–Programm eine quasiexakte Lösung bis zu einer Gitterlänge von 12 möglich ist, werden Gitter mit 8, 10 und 12 Plätzen für drei unterschiedliche Repulsionsstärken diskutiert. Die Ergebnisse finden sich in den Tabellen 5.3.5, 5.3.6 und 5.3.7. Betrachtet man die Ergebnisse für die Besetzungszahlen, so fällt auf, daß nur ein kleiner Unterschied zwischen den Vorhersagen von HF und SCGF besteht.

	$U/t = 2$			$U/t = 4$			$U/t = 6$		
	HF	SCGF	exakt	HF	SCGF	exakt	HF	SCGF	exakt
ε_k	$\langle n_{\uparrow k} \rangle$								
-2.00	0.9872	0.9809	0.9740	0.8959	0.8949	0.9139	0.7992	0.8000	0.8479
-1.41	0.9754	0.9693	0.9636	0.8379	0.8408	0.8825	0.7335	0.7356	0.8005
0.00	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000
1.41	0.0246	0.0308	0.0361	0.1621	0.1592	0.1173	0.2665	0.2644	0.1994
2.00	0.0128	0.0191	0.0257	0.1041	0.1051	0.0859	0.2008	0.2000	0.1520
1.41	0.0246	0.0308	0.0361	0.1621	0.1592	0.1173	0.2665	0.2644	0.1994
0.00	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000
-1.41	0.9754	0.9693	0.9636	0.8379	0.8408	0.8825	0.7335	0.7356	0.8005
E_0	-6.1266	-6.3924	-6.5682	-3.7486	-4.3563	-4.6035	-2.5925	-3.4732	-3.4088

Tabelle 5.3.5: Vergleich der HF–, SCGF– und exakten Resultate für die Besetzungszahlen und die Grundzustandsenergie des eindimensionalen Hubbard–Modells mit 8 Gitterplätzen und halber Füllung für zwei verschiedene U/t . Angaben für ε_k und E_0 in eV.

Für $U/t = 2$ erkennt man eine leichte Verbesserung der SCGF-Besetzungszahlen im Vergleich zu HF. Die Korrektur ist prozentual sehr gering, aber durchaus nicht bedeutungslos, da für kleine Repulsion U auch HF, zumindest für 8 bzw. 12 Gitterplätze, bereits sehr nahe am exakten Resultat liegt. Der Fehler zwischen exakten und HF-Besetzungszahlen wird, bei 8 und 12 Gitterplätzen, durch das SCGF-Verfahren ungefähr halbiert. Für 10 Gitterplätze ist der verbleibende Fehler etwas größer. Die Grundzustandsenergie wird für alle Gittergrößen deutlich verbessert.

Für $U/t = 4$ ist der Einfluß des SCGF-Verfahrens auf die Besetzungszahlen weniger stark ausgeprägt. Man kann keine nennenswerten Verbesserungen feststellen. Die Korrektur der HF-Besetzungszahlen durch das SCGF-Verfahren ist für alle angegebenen Gittergrößen klein ($\sim 1\%$) und uneinheitlich. Nicht alle Besetzungszahlen werden in Richtung der exakten korrigiert. Trotzdem erhält man auch hier eine deutlich verbesserte Grund-

	$U/t = 2$			$U/t = 4$			$U/t = 6$		
	HF	SCGF	exakt	HF	SCGF	exakt	HF	SCGF	exakt
ε_k	$\langle n_{\uparrow k} \rangle$								
-2.00	0.9991	0.9909	0.9788	0.8965	0.8958	0.9179	0.7993	0.8000	0.8482
-1.62	0.9986	0.9906	0.9750	0.8625	0.8643	0.9010	0.7586	0.7603	0.8199
-0.62	0.9908	0.9872	0.9526	0.6866	0.6930	0.7962	0.6125	0.6144	0.6787
0.62	0.0092	0.0128	0.0474	0.3134	0.3070	0.2039	0.3875	0.3856	0.3213
1.62	0.0014	0.0094	0.0250	0.1375	0.1357	0.0990	0.2414	0.2397	0.1801
2.00	0.0009	0.0091	0.0212	0.1035	0.1042	0.0821	0.2007	0.2000	0.1518
1.62	0.0014	0.0094	0.0250	0.1375	0.1357	0.0990	0.2414	0.2397	0.1801
0.62	0.0092	0.0128	0.0474	0.3134	0.3070	0.2039	0.3875	0.3856	0.3213
-0.62	0.9908	0.9872	0.9526	0.6866	0.6930	0.7962	0.6125	0.6144	0.6787
-1.62	0.9986	0.9906	0.9750	0.8625	0.8643	0.9010	0.7586	0.7603	0.8199
E_0	-7.9434	-8.3133	-8.6384	-4.6920	-5.4367	-5.8343	-3.2410	-4.3136	-4.2546

Tabelle 5.3.6: Vergleich der HF-, SCGF- und exakten Resultate für die Besetzungszahlen und die Grundzustandsenergie des eindimensionalen Hubbard-Modells mit 10 Gitterplätzen und halber Füllung für zwei verschiedene U/t . Angaben für ε_k und E_0 in eV.

zustandsenergie. Der Fehler zwischen HF–Energie und exakter Energie wird durch das SCGF–Verfahren um ca. 70% reduziert.

Auch für $U/t = 6$ ist die Korrektur der Besetzungszahlen aufgrund der SCGF–Rechnung gering. Allerdings ist hier wieder zu beobachten, daß die geringe Veränderung der Besetzungszahlen für jedes ε_k in die richtige Richtung geht. Für die stärkere Repulsion $U/t = 6$ ist man für alle angegebenen Gitter schon in dem Bereich von Wechselwirkungsstärken, für die das SCGF–Verfahren eine niedrigere Energie als die exakte Lösung liefert (vgl. Abbildung 5.3.5). Die Korrektur der HF–Energie durch das SCGF–Verfahren ist hier besonders ausgeprägt und man erhält eine Grundzustandsenergie, die das exakte Ergebnis

	$U/t = 2$			$U/t = 4$			$U/t = 6$		
	HF	SCGF	exakt	HF	SCGF	exakt	HF	SCGF	exakt
ε_k	$\langle n_{\uparrow k} \rangle$								
-2.00	0.9905	0.9839	0.9760	0.8963	0.8956	0.9152	0.7993	0.8001	0.8472
-1.73	0.9874	0.9809	0.9726	0.8739	0.8748	0.9033	0.7716	0.7731	0.8280
-1.00	0.9649	0.9599	0.9550	0.7725	0.7783	0.8454	0.6750	0.6773	0.7461
0.00	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000
1.00	0.0351	0.0401	0.0450	0.2275	0.2217	0.1546	0.3250	0.3227	0.2539
1.73	0.0126	0.0191	0.0274	0.1261	0.1252	0.0967	0.2284	0.2269	0.1720
2.00	0.0095	0.0161	0.0240	0.1037	0.1044	0.0848	0.2007	0.1999	0.1528
1.73	0.0126	0.0191	0.0274	0.1261	0.1252	0.0967	0.2284	0.2269	0.1720
1.00	0.0351	0.0401	0.0450	0.2275	0.2217	0.1546	0.3250	0.3227	0.2539
0.00	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000
-1.00	0.9649	0.9599	0.9550	0.7725	0.7783	0.8454	0.6750	0.6773	0.7461
-1.73	0.9874	0.9809	0.9726	0.8739	0.8748	0.9033	0.7716	0.7731	0.8280
E_0	-9.3379	-9.7278	-10.0418	-5.6291	-6.4998	-6.9203	-3.8891	-5.1520	-5.0801

Tabelle 5.3.7: Vergleich der HF–, SCGF– und exakten Resultate für die Besetzungszahlen und die Grundzustandsenergie des eindimensionalen Hubbard–Modells mit 12 Gitterplätzen und halber Füllung für zwei verschiedene U/t . Angaben für ε_k und E_0 in eV.

nahezu reproduziert, den Fehler der HF-Näherung aber leicht überkompensiert.

Interessant ist auch, daß die Teilchenzahl für alle hier untersuchten Gitter und Wechselwirkungsstärken erhalten ist, wie eine Aufaddition der Besetzungszahlen zeigt. Das SCGF-Verfahren garantiert diese Teilchenzahlerhaltung jedoch nicht und ihre Ursache ist wohl in der Halbfüllung und den in diesem Fall symmetrisch unter und über der Fermienergie angeordneten Polen der Ein-Teilchen-Greensfunktionen zu suchen, was man an den weiter unten angegebenen Zustandsdichten gut erkennen kann.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß das SCGF-Verfahren für alle Gittergrößen und alle U/t eine Verbesserung der HF-Resultate ermöglicht. Bei kleinem U/t , wenn also bereits HF eine gute Näherung ist, werden Besetzungszahlen und Grundzustandsenergie in gleichem Maße verbessert. Der Fehler kann etwa halbiert werden. Während mit zunehmendem U/t nach wie vor eine Verbesserung der Grundzustandsenergie erzielt wird, können die Besetzungszahlen nicht oder nur sehr wenig verbessert werden. Eine Ursache für dieses Verhalten ist in den Eigenschaften der HF-Lösung zu suchen, die als Startwert für das SCGF-Verfahren verwendet wird.

Zu Beginn einer SCGF-Iteration wird die HF-Greensfunktion benützt, um die Selbstenergiebeiträge zweiter Ordnung zu berechnen. Die Auswirkung dieser Terme besteht in einer Fragmentierung der Ein-Teilchen-Stärke auf mehrere Pole der resultierenden Greensfunktion. Die meiste Stärke für ein bestimmtes k gehört, nach einmaliger Berücksichtigung der Selbstenergien zweiter Ordnung, dann zum Quasiteilchen-Pol, der in der Nähe der ursprünglichen HF-Energie ε_k^{HF} liegt. Aufgrund der Fragmentierung der Ein-Teilchen-Stärke trägt der Quasiteilchen-Pol für ein $k < \varepsilon_F$ aber weniger Stärke als das entsprechende HF-Residuum. Die restliche Stärke wird auf Pole mit 2T1L- bzw. 2L1T-Charakter verteilt, die zu Energien von ungefähr $\pm 2 \varepsilon_k^{HF} \mp \varepsilon_{k+Q}^{HF} = \pm 3 \varepsilon_k^{HF}$ gehören, wobei sich diese Energien mit wachsendem U/t weiter vom Quasiteilchen-Pol weg ins Negative bzw. Positive verschieben. Das Resultat der Bevölkering dieser höherenergetischen 2T1L- und 2L1T-Anregungen geschieht auf Kosten des Quasiteilchen-Pols, so daß nach einem Iterationsschritt die Gesamtbesetzung eines Zustands mit $k < \varepsilon_F$ abnimmt, während die Gesamtbesetzung für ein $k > \varepsilon_F$ zunimmt. Erst die dann folgende Neuberechnung der Selbstenergie erster Ordnung sorgt bei repulsivem U dafür, daß die Ein-Teilchen-Energien unterhalb der Fermikante nach oben und die Ein-Teilchen-Energien überhalb der Fermikante nach unten korrigiert werden. Diese Korrektur führt im weiteren Verlauf der Iteration dazu, daß die Bevölkering der 2T1L- und 2L1T-Anregungen, in Abhängigkeit von U/t , wieder etwas abnimmt.

Für kleines U/t unterschätzt nun die HF-Rechnung die Ausschmierung der Besetzungszahlen. Die Fragmentierung der Ein-Teilchen-Stärke infolge der Selbstenergie zweiter Ordnung zusammen mit der, wegen der kleinen Repulsion geringen, Korrektur durch die Selbstenergie erster Ordnung führt insgesamt dazu, daß die Zustände unterhalb der

Fermienergie entvölkert werden. Bei größerem U/t hingegen überschätzt schon HF die Ausschmierung der Besetzungszahlen. Eine weitere Fragmentierung der Ein–Teilchen–Stärke und damit eine Vergrößerung der Diskrepanz zwischen den exakten und den HF–Besetzungszahlen kann durch die Korrektur infolge der Selbstenergie erster Ordnung vermieden werden. Jedoch ist diese Korrektur nicht oder nur sehr begrenzt dazu in der Lage, diese Diskrepanz zu verringern. Trotzdem führt die Verteilung der Stärke, auch auf höherenergetische Pole, zu einer Absenkung der Grundzustandsenergie, da die zu Zuständen mit 2L1T–Charakter gehörenden Energien natürlich zur Gesamtenergie beitragen. Eine Verbesserung der Resultate für größeres U/t könnte möglicherweise durch die Berücksichtigung von mehr Polen, also mit einer BAGEL–(p, q)–Näherung mit deutlich größerem p und q erzielt werden.

Spektroskopische Information

Ein großer Vorteil des SCGF–Verfahrens besteht darin, neben den oben diskutierten Observablen wie Besetzungszahlen und Grundzustandsenergie, auch Aussagen über die Spektralfunktionen machen zu können. Die Kenntnis der nicht–trivialen Ein–Teilchen–Greensfunktion für jedes der N Teilchen ermöglicht neben der Angabe des Anregungsspektrums eines $N \pm 1$ –Clusters auch Aussagen über die Zustandsdichte und damit die energetische Lokalisierung der Ein–Teilchen–Stärke.

Während in der Kernphysik das Anregungsspektrum von Systemen mit einem Nukleon weniger (oder mehr) von großer Bedeutung ist, da dieses z. B. über eine ($e, e'p$)–Reaktion ((α, t) –Reaktion) experimentell zugänglich ist, hat man bei einem so schematischen Modell wie dem Hubbard–Modell nicht direkt die Möglichkeit einer experimentellen Überprüfung. Trotzdem ist auch hier eine Angabe der Spektralfunktionen bzw. der Zustandsdichte von Interesse. Die Loch– (Teilchen–) Spektralfunktionen $S_{h,\alpha}(\omega)$ ($S_{p,\alpha}(\omega)$) geben die Wahrscheinlichkeit dafür an, daß durch Entfernen (Hinzufügen) eines Teilchens im Ein–Teilchen–Zustand α des N –Teilchensystems ein Anregungszustand eines Systems mit einem Teilchen mehr (weniger) bei einer bestimmten diskreten Energie entsteht. Beim Hubbard–Modell im Impulsraum ist die Quantenzahl α die Kombination aus Gitterimpuls k und Spin σ . Bei 12 Gitterplätzen gibt es also 24 verschiedene Quantenzahlen α und demzufolge auch 24 verschiedene Loch– (Teilchen–) Spektralfunktionen. Die Zustandsdichte hingegen unterscheidet nicht nach den Quantenzahlen, sondern gibt, je nachdem ob $\omega < \varepsilon_F$ oder $\omega > \varepsilon_F$ ist, die Wahrscheinlichkeit dafür an, ein Teilchen bei einer bestimmten Energie unabhängig von seiner Quantenzahl entfernen oder hinzufügen zu können. Für die Zustandsdichte gilt demnach

$$\mathcal{N}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\alpha} [S_{h,\alpha}(\omega) + S_{p,\alpha}(\omega)] . \quad (5.3.21)$$

Dies impliziert zusammen mit den Eigenschaften der Spektralfunktion (vgl. Kapitel 2)

die Normierungsbedingung

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(\omega) d\omega = 1. \quad (5.3.22)$$

Als Referenz für die sich aus dem SCGF-Verfahren ergebenden Zustandsdichten sollen Ergebnisse aus dem sogenannten Quanten-Monte-Carlo-(QMC)-Verfahren herangezogen werden. Die Theorie dieses Verfahrens ist nicht Gegenstand der vorliegenden Arbeit. Die Fundamentalen Konzepte der QMC werden im Anhang B skizziert, weiteres findet sich in der Literatur [Koo97, Lan93, Nig99, Rom98, Rom97].

In Abbildung 5.3.6 ist die Zustandsdichte für das eindimensionale Hubbard-Modell, wie sie sich aus einer QMC-Rechnung [Pre94, Ass96, Jar96] ergibt, zusammen mit der sich aus dem SCGF-Verfahren ergebenden dargestellt. Im SCGF-Verfahren erhält man zunächst diskrete Werte für die spektroskopischen Faktoren an den Polstellen. Um diese besser mit den QMC-Resultaten vergleichen zu können wurde die Spektralfunktion mit einer Gaußkurve der Halbwertsbreite $t/4$ gefaltet. Zunächst erkennt man die für das Hubbard-Modell typische Energielücke symmetrisch um die Fermienergie, die hier bei Null liegt. Diese Energielücke entsteht schon bei einer HF-Rechnung und ist dort $\geq 2\Delta$. Sowohl

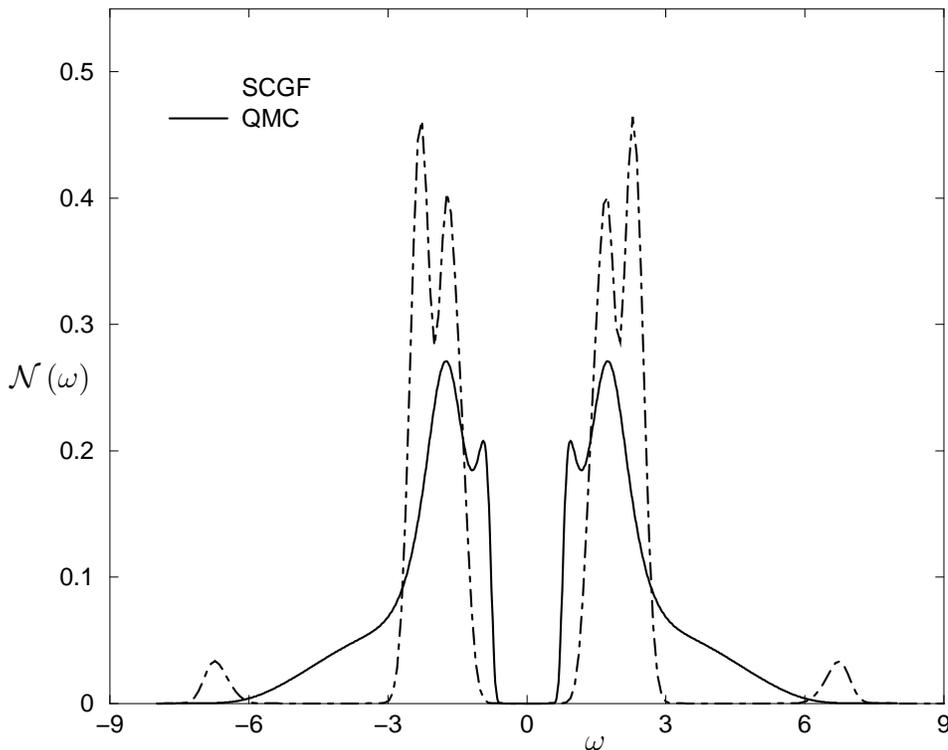


Abbildung 5.3.6: Vergleich der Zustandsdichten berechnet mit QMC bzw. SCGF für das eindimensionale Hubbard-Modell für $U/t = 4$, 12 Gitterplätze und halbe Füllung (ω in eV).

für die QMC-Rechnung als auch für die SCGF-Rechnung wird diese Energielücke an der richtigen Stelle und in der richtigen Größenordnung wiedergegeben. Die Energielücke ist die Energiedifferenz zwischen den im Grundzustand besetzten Zuständen zu den im Grundzustand unbesetzten Zuständen, also den niedrigsten angeregten Zuständen. Im HF-Verständnis bedeutet das Überwinden der Energielücke die initiale und auch im HF- oder SCGF-Endergebnis noch partiell vorhandene antiferromagnetische Anordnung der Elektronen aufzubrechen.

Desweiteren erkennt man, daß die qualitative Form der SCGF-Zustandsdichte in der Nähe der Fermienergie ($-3 \leq \omega \leq 0$) mit der Form der QMC-Zustandsdichte übereinstimmt. Die zwei Maxima, jeweils über und unter der Fermikante, sind in beiden Fällen deutlich ausgeprägt. Es fällt auf, daß die QMC-Methode Zustände bei Energien zwischen ± 3 und ± 6 eV vorhersagt, die mit dem SCGF-Formalismus nicht gefunden werden, während letzterer die zu 2T1L- bzw. 2L1T-Energien gehörenden Zustände bei ± 7 eV vorhersagt. Die unterschiedliche absolute Höhe der beiden Kurven resultiert in der Normierungsbedingung (5.3.22). Da die QMC-Methode eine Verteilung der Stärke auf einen breiteren Energiebereich vorhersagt, muß die Kurve insgesamt deutlich flacher sein. Beim SCGF-Verfahren hingegen ist die Zustandsdichte energetisch lokalisierter. Die Hauptstärke verteilt sich auf die zu Quasiteilchen-Energien gehörenden Pole in direkter Nachbarschaft der Fermiener-

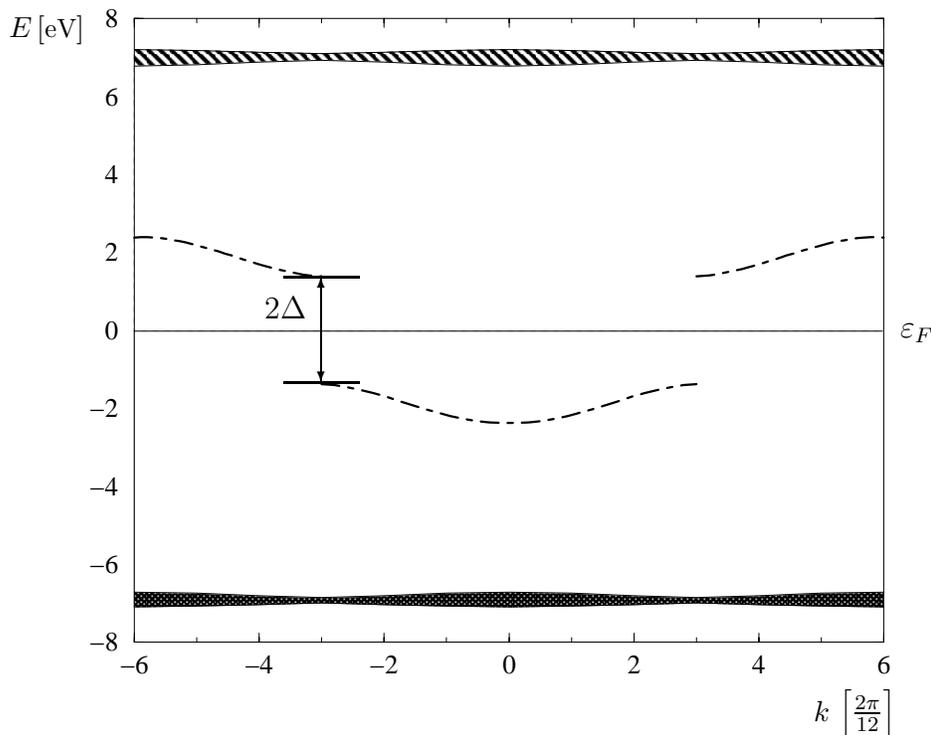


Abbildung 5.3.7: Polenergien der SCGF-Greensfunktionen $G_{\sigma k}(\omega)$ in Abhängigkeit des Gitterimpulses für 12 Gitterplätze, $U/t = 4$ und halbe Füllung.

gie. Die restliche Stärke ist bei den weiter von ε_F weg liegenden 2T1L- und 2L1T-Energien zu finden. Da diese grob dem dreifachen der Quasiteilchen-Energien entsprechen kann sich beim SCGF-Verfahren im intermediären Bereich (zwischen ± 3 und ± 6) gar keine Stärke befinden.

Die aus dem SCGF-Verfahren resultierende Stärke-Energie-Verteilung soll anhand von Abbildung 5.3.7 nochmals verdeutlicht werden. Dort sind die Polenergien der Ein-Teilchen-Greensfunktionen $G_{\sigma k}(\omega)$ in Abhängigkeit des Gitterimpulses k dargestellt. Die Polenergien gliedern sich in drei Bereiche. Die strichpunktierte Linie repräsentiert die Quasiteilchen-Energien. Unterhalb der Fermikante sind die zu diesen Energien gehörenden Zustände überwiegend besetzt, oberhalb der Fermikante überwiegend unbesetzt. Auch die Energielücke, also das Fehlen von Polenergien in Nachbarschaft der Fermikante, ist deutlich zu erkennen. Die beiden gepunkteten bzw. schraffierten Energiebänder gehören zu 2L1T- bzw. 2T1L-Energien und entsprechen den in Abbildung 5.3.6 ganz rechts und ganz links befindlichen kleineren Peaks. Die Zustände die zu dem unteren der beiden Bänder gehören sind teilweise besetzt und somit dafür verantwortlich, daß nicht die gesamte Stärke auf die Quasiteilchen-Zustände entfällt und daß die Grundzustandsenergie relativ zu HF abgesenkt wird.

Weiteren Aufschluß über die energetische Lokalisierung der Ein-Teilchen-Stärke kann eine kummulative Integration der Teilchenzahl geben. In Abbildung 5.3.8 ist die Größe $P(\omega)$ für das SCGF- und das QMC-Verfahren aufgetragen. Für P gilt

$$P(\omega) = \sum_{\sigma k} \int_{-\infty}^{\omega} S_{h,\sigma k}(\omega_1) d\omega_1 . \quad (5.3.23)$$

Die Funktion $P(\omega)$ gibt also jeweils die kummulierte Ein-Teilchen-Stärke zurück, die in einem bestimmten Energieintervall bis zur Obergrenze ω lokalisiert ist. Wie man auch rechts in der Abbildung erkennen kann, muß $P(\omega)$ bei der Fermienergie, hier $\varepsilon_F = 0$, die Teilchenzahl wiedergeben. Da das SCGF-Verfahren diskrete Pole liefert ist in diesem Fall P eine Treppenfunktion. Man erkennt, daß das SCGF-Verfahren früher als das QMC-Verfahren signifikante Stärke liefert. Dies ist auf die tief liegenden 2L1T-Energien zurückzuführen, die einen ersten Beitrag zu $P(\omega)$ liefern. Der weitere, bei etwa $\omega = -2.5$ eV beginnende Zuwachs an Stärke ist dann den Quasiteilchen-Polen zuzuschreiben. Der Anstieg der mit dem QMC-Verfahren ermittelten Kurve beginnt später und ist gleichmäßiger, die Stärke ist also auf einen größeren Energiebereich verteilt. Im Mittel kann man aber sagen, daß die zu SCGF gehörende Kurve sich recht gut an die QMC-Kurve anpaßt und qualitativ ein ähnliches Verhalten aufweist. Eine HF-Rechnung z. B. wäre hier nicht in der Lage, Stärke für Energien kleiner -2.5 eV vorherzusagen. Eben diese Stärke und die daraus resultierende teilweise Entvölkerung der Quasiteilchen-Pole ist aber letztlich dafür verantwortlich, daß SCGF im Vergleich zu HF eine deutlich verbesserte Grundzustandsenergie liefert.

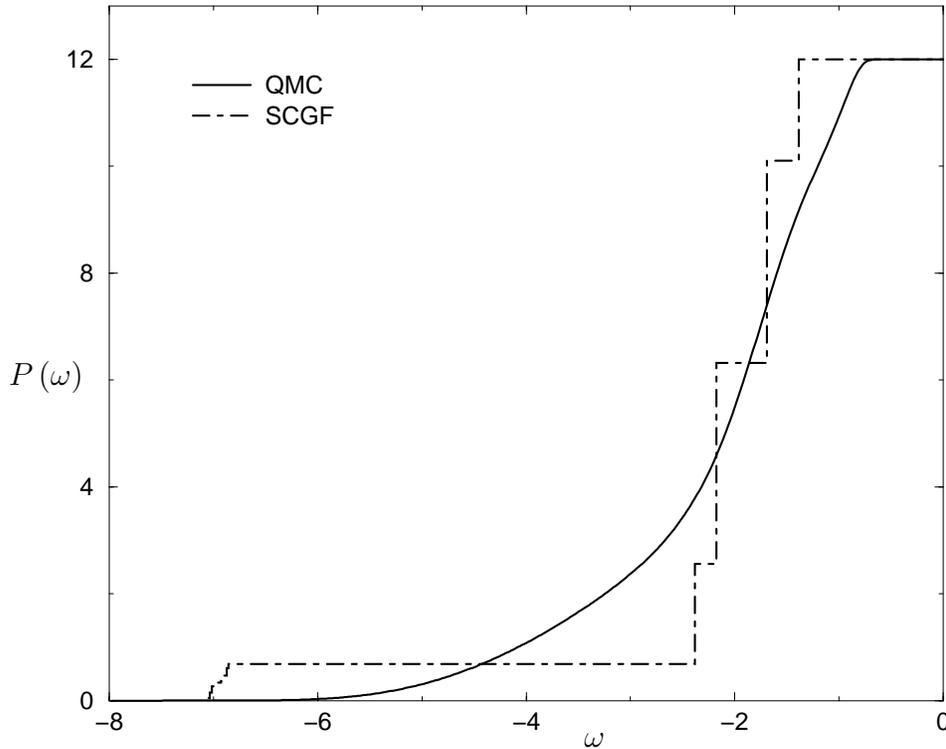


Abbildung 5.3.8: Integrierte Teilchenzahl für das QMC-Verfahren und den SCGF-Ansatz für 12 Gitterplätze, $U/t = 4$ und halbe Füllung (ω in eV).

Es soll an dieser Stelle darauf verzichtet werden, die Zustandsdichte, die Verteilung der Polenergien und die integrierte Teilchenzahl auch für andere Gitter oder Wechselwirkungsstärken anzugeben, da sich am qualitativen Erscheinungsbild dieser Größen nichts ändern würde. Lediglich die Energieskalen und der Betrag der Energielücke würden etwas variieren, was nicht weiter zum Verständnis beitragen kann.

5.3.5 Zweidimensionales Hubbard–Modell und SCGF–Verfahren

Da wie erwähnt für das zweidimensionale Hubbard–Modell nur eine exakte Lösung für den 2×2 Fall und eine quasixakte Lösung nur bis 4×4 existiert, ist es hier nicht mehr möglich, die SCGF–Ergebnisse in Relation zu den exakten zu setzen. Einen Hinweis über die Qualität der Resultate erhält man aber durch einen Vergleich mit der HF–Lösung. Außerdem kann man für einige Beispiele das QMC–Verfahren zu Rate zu ziehen, das für halbgefüllte Gitter eine sehr gute Näherungslösung darstellt und dessen Fehler dazuhin sehr genau abgeschätzt werden kann.

SCGF, HF und QMC im Vergleich

Hier sollen einige SCGF–Resultate für das zweidimensionale Hubbard–Modell mit der HF–Lösung und, sofern vorhanden, mit der QMC–Lösung verglichen werden. Es wurden die Gittergrößen 4×4 und 6×6 für verschiedene U/t untersucht.

In Tabelle 5.3.8 finden sich zunächst einige Daten für das 4×4 –Hubbard–Modell. Wegen der größeren Anzahl von Gitterimpulsen wurde hier darauf verzichtet, die Besetzungszahlen aller Gitterpunkte numerisch anzugeben. Die Symmetrie des Hubbard–Modells sorgt jedoch dafür, daß Besetzungszahlen, die zum gleichen $\varepsilon_{\vec{k}}$ gehören, gleich sind. Aus diesem Grund sind in der Tabelle alle relevanten Besetzungszahlen zu finden. Zur besseren Veranschaulichung der Situation sind in Abbildung 5.3.9 die Besetzungszahlen, mit einer Gaußfunktion der Halbwertsbreite $t/4$ gefaltet, räumlich aufgelöst dargestellt. Betrachtet man die Ergebnisse für die Besetzungszahlen, so ist eine gewisse Ähnlichkeit zum Verhalten der SCGF–Lösung für das eindimensionale Hubbard–Modell zu erkennen. Die Fragmentierung der Ein–Teilchen–Stärke sorgt bei $U/t = 2$ wieder dafür, daß die Besetzungszahlen, die zu negativen $\varepsilon_{\vec{k}}$ gehören, relativ zu HF etwas erniedrigt werden, während die zu $\varepsilon_{\vec{k}} = 2.0$ bzw. 4.0 gehörenden etwas erhöht werden. Dieser Trend ist hier, im Gegensatz zum eindimensionalen Hubbard–Modell, auch für die anderen Werte von U/t zu erkennen.

		$U/t = 2$		$U/t = 4$			$U/t = 6$	
		HF	SCGF	HF	SCGF	QMC	HF	SCGF
(k_x, k_y)	$\varepsilon_{\vec{k}}$	$\langle n_{\uparrow\vec{k}} \rangle$	$\langle n_{\downarrow\vec{k}} \rangle$	$\langle n_{\uparrow\vec{k}} \rangle$	$\langle n_{\downarrow\vec{k}} \rangle$	$\langle n_{\uparrow\vec{k}} \rangle$	$\langle n_{\uparrow\vec{k}} \rangle$	$\langle n_{\downarrow\vec{k}} \rangle$
$(0, 0)$	-4.0	0.9959	0.9936	0.9716	0.9664	0.9682	0.9243	0.9199
$(0, \frac{\pi}{2})$	-2.0	0.9842	0.9807	0.9088	0.9052	0.9255	0.8128	0.8124
$(0, \pi)$	0.0	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000
$(\frac{\pi}{2}, \pi)$	2.0	0.0158	0.0193	0.0912	0.0948	0.0746	0.1872	0.1876
(π, π)	4.0	0.0041	0.0064	0.0284	0.0336	0.0319	0.0757	0.0801
E_0		-17.5562	-17.926	-12.5667	-13.5913	-13.6315	-9.3800	-10.9904

Tabelle 5.3.8: Grundzustandsenergie und ausgewählte Besetzungszahlen für das 4×4 –Hubbard–Modell bei halber Füllung. Angaben für $\varepsilon_{\vec{k}}$ und E_0 in eV.

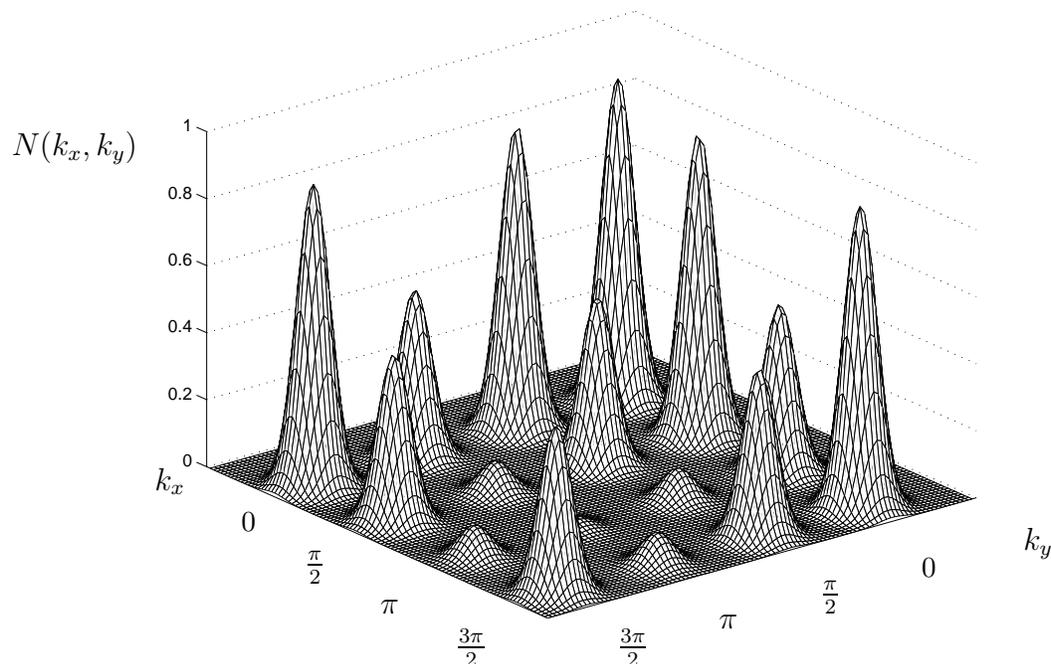


Abbildung 5.3.9: Räumliche Veranschaulichung der Besetzungszahlen für das 4×4 -Hubbard-Modell bei halber Füllung und $U/t = 4$.

Die Grundzustandsenergien werden für alle Wechselwirkungsstärken deutlich nach unten korrigiert. Ein Vergleich mit den nur für $U/t = 4$ vorhandenen QMC-Ergebnissen zeigt für $\vec{k} = (0, 0)$, $(0, \pi)$ und (π, π) eine gute Übereinstimmung der Besetzungszahlen. Auch die Korrektur der Grundzustandsenergie relativ zu HF ist hier besonders groß und die QMC-Energie wird nahezu reproduziert. Da die QMC auf einer stochastischen Integration beruht, sind die QMC-Observablen fehlerbehaftet. Eine solche Integration läßt sich in eine Summe überführen, so daß für eine Observable berechnet über eine Stichprobe S

$$O_S(f) = \frac{1}{N_S} \sum_{j=1}^{N_S} f(x^{[j]}) \pm \delta \quad (5.3.24)$$

gilt, wobei die $x^{[j]}$ die nach einer geeigneten Wahrscheinlichkeitsverteilung gewichteten Zustände sind, die zur Berechnung des Erwartungswertes herangezogen werden (siehe Anhang B). Nach dem zentralen Grenzwertsatz [Neg88] konvergiert $O_S(f)$ für hinreichend großes N_S gegen den exakten Wert $O(f)$ und für den Fehler δ gilt

$$\delta = \sqrt{\frac{O(f^2) - O(f)^2}{N_S}}. \quad (5.3.25)$$

Im Vorliegenden Fall ist für die Besetzungszahlen $\delta < 0.0005$ und für die Grundzustandsenergie $\delta < 0.015$ eV.

		$U/t = 4$			$U/t = 6$		
		HF	SCGF	QMC	HF	SCGF	QMC
(k_x, k_y)	$\varepsilon_{\vec{k}}$	$\langle n_{\uparrow\vec{k}} \rangle$					
(0, 0)	-4.0	0.9721	0.9669	0.9684	0.9248	0.9205	0.9346
$(0, \frac{\pi}{3})$	-3.0	0.9534	0.9485	0.9551	0.8851	0.8824	0.9070
$(\frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{3})$	-2.0	0.9101	0.9068	0.9274	0.8136	0.8132	0.8552
$(0, \frac{2\pi}{3})$	-1.0	0.7913	0.7919	0.8459	0.6867	0.6881	0.7379
(0, π)	0.0	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000	0.5000
$(\frac{\pi}{3}, \pi)$	1.0	0.2087	0.2081	0.1546	0.3133	0.3119	0.2626
$(\frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{3})$	2.0	0.0899	0.0931	0.0726	0.1864	0.1868	0.1448
$(\frac{2\pi}{3}, \pi)$	3.0	0.0466	0.0515	0.0450	0.1149	0.1176	0.0929
(π, π)	4.0	0.0279	0.0331	0.0316	0.0752	0.0795	0.0655
E_0		-28.6149	-30.821	-30.874	-21.3293	-24.867	-23.7125

Tabelle 5.3.9: Grundzustandsenergie und ausgewählte Besetzungszahlen für das 6×6 -Hubbard-Modell bei halber Füllung. Angaben für $\varepsilon_{\vec{k}}$ und E_0 in eV.

In Tabelle 5.3.9 sind die entsprechenden Daten für das 6×6 -Hubbard-Modell für zwei verschiedene U/t angegeben. Die räumliche Veranschaulichung der mit einer Gaußfunktion ($\Gamma = t/4$) gefalteten Besetzungszahlen findet sich in Abbildung 5.3.10. Auch eine Betrachtung der Besetzungszahlen für den 6×6 -Fall zeigt im Wesentlichen eine Erniedrigung der Besetzungszahlen unterhalb und eine Erhöhung der Besetzungszahlen oberhalb der Fermienergie.

Für $U/t = 4$ ist das SCGF-Verfahren in der Lage die QMC-Besetzungszahlen recht gut wiederzugeben. Hierbei ist der Fehler für Zustände in der Nähe der Fermienergie ($-2.0 \leq \varepsilon_k \leq 2.0$ eV) größer als für die anderen Zustände. Dies dürfte ein Artefakt des HF-Startwerts sein, der dazu neigt die Ausschmierung der Besetzungszahlen in der Nähe der Fermikante zu überschätzen. Die Korrektur der HF-Energie durch das SCGF-

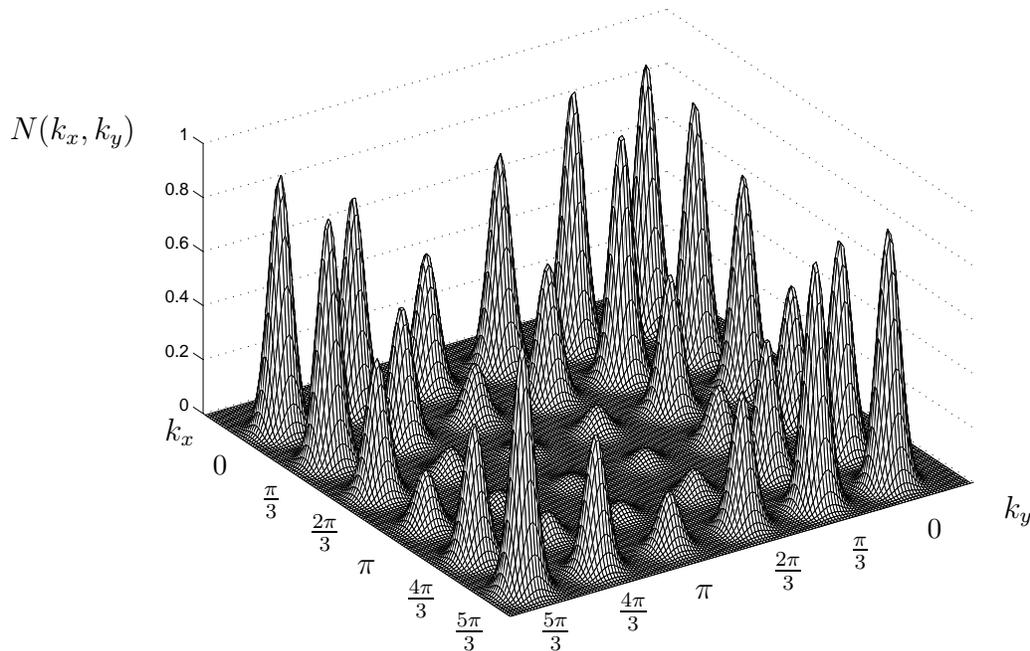


Abbildung 5.3.10: *Räumliche Veranschaulichung der Besetzungszahlen für das 6×6 -Hubbard-Modell bei halber Füllung und $U/t = 4$.*

Verfahren sorgt dafür, daß die QMC-Energie nahezu reproduziert wird. Der stochastische Fehler für die QMC-Besetzungszahlen ist hier kleiner 0.0005. Der entsprechende Fehler in der Grundzustandsenergie hingegen kleiner 0.009 eV.

Für $U/t = 6$ weichen die SCGF-Ergebnisse stärker von den QMC-Vorhersagen ab. Die Besetzungszahlen werden für alle Zustände unterhalb der Fermienergie unterschätzt und für alle Zustände oberhalb der Fermikante überschätzt. Auch hier ist der Fehler in der Nachbarschaft der Fermienergie merklich größer. Offensichtlich führt die Fragmentierung der Ein-Teilchen-Stärke hier zu einer zu starken Ausschmierung der Besetzungszahlen, was auch durch die, diesem Effekt entgegenwirkende Korrektur der Selbstenergie erster Ordnung nicht verhindert werden kann. Auch die Absenkung der Grundzustandsenergie relativ zu HF fällt hier zu groß aus. Die vom SCGF-Verfahren vorhergesagte Energie ist tiefer als die QMC-Energie. Dies ist wieder auf die U/t -Abhängigkeit der Lösung, wie bei der Diskussion der SCGF-Ergebnisse für das eindimensionale Hubbard-Modell erläutert, zurückzuführen. Auch beim zweidimensionalen Hubbard-Modell ist zu beobachten, daß ab $U/t = 6$ die Differenz zwischen HF-Energie und QMC-Energie durch das SCGF-Verfahren überkompensiert wird. Die stochastischen Fehler für die QMC-Besetzungszahlen bzw. -Energien sind hier kleiner 0.0006 bzw. 0.012 eV.

Spektroskopische Information

Da die über die Multipol-Greensfunktion zugänglichen Größen Zustandsdichte $\mathcal{N}(\omega)$ und integrierte Teilchenzahl $P(\omega)$ schon im Rahmen der Ergebnisse für das eindimensionale Hubbard-Modell erklärt wurden (vgl. Kapitel 5.3.4), kann hier auf eine nochmalige Definition verzichtet werden. In Abbildung 5.3.11 sind wieder die mit QMC respektive SCGF berechneten Zustandsdichten für den 4×4 -Fall aufgetragen. In Analogie zum eindimensionalen Fall wurden die diskreten Pole der Greensfunktionen mit einer Gaußkurve der Halbwertsbreite $t/4$ gefaltet.

Auch im zweidimensionalen Fall ist die, für halbe Füllung typischerweise symmetrisch um die Fermienergie $\omega = 0$ liegende Energielücke, deutlich zu erkennen. Auffällig ist, daß hier das SCGF-Verfahren eine feiner strukturierte Zustandsdichte vorhersagt, als das QMC-Verfahren. Auf jeder Seite der Fermienergie sind im SCGF-Fall vier Peaks auszumachen. Das ganz rechts bzw. ganz links befindliche niedrigste Maximum gehört zu den 2T1L- bzw. 2L1T-Anregungen. Die höheren weiter innen liegenden Peaks entstehen durch Überlagerungen von Quasiteilchen-Polen. Da die sich aus dem SCGF-Verfahren ergebende Zustandsdichte strukturierter ist, müssen hier ihre Maximalwerte konsequenterweise niedriger sein, als die der QMC-Zustandsdichte, um die Normierungsbedingung $\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(\omega) d\omega = 1$ nicht zu verletzen. Im Gegensatz zum eindimensionalen Fall kann man hier nicht sagen, daß beiden Kurven in der Nähe der Fermienergie ein qualitativ ähnliches

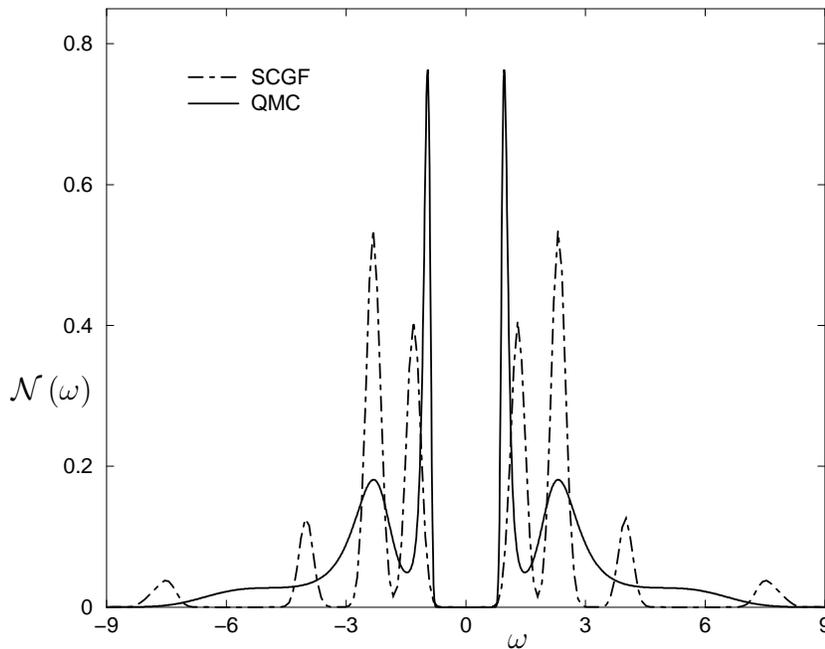


Abbildung 5.3.11: Vergleich der Zustandsdichten berechnet mit QMC bzw. SCGF für das zweidimensionale 4×4 -Hubbard-Modell, $U/t = 4$ und halbe Füllung (ω in eV).

Verhalten aufweisen. Die QMC–Kurve hat unterhalb von ε_F zwei Maxima, wobei das niedrigere der beiden sehr breit ist. Stärke wird bis in den 2T1L–Bereich hinein vorhergesagt. Hingegen besitzt die SCGF–Kurve, neben dem 2T1L–Peak, drei Maxima, die energetisch lokalisierter sind. Die Existenz dieser Peaks bei den entsprechenden Energien hat aber durchaus ihre Berechtigung, da im zweidimensionalen Fall die Eigenwerte der kinetischen Energie nicht mehr zwischen -2.0 und 2.0 eV (zwei nächste Nachbarn), sondern zwischen -4.0 und 4.0 eV (vier nächste Nachbarn) liegen und somit auch Quasiteilchen–Pole, die einen großen Anteil der Gesamtstärke des fraglichen Ein–Teilchen–Zustands tragen, bei tieferen Energien auftauchen können, als das im eindimensionalen Modell der Fall war.

Obwohl also auf den ersten Blick die Zustandsdichten, wie sie von SCGF und QMC vorhergesagt werden, für das 4×4 –Hubbard–Modell recht unterschiedlich anmuten, zeigt die Betrachtung der integrierten Teilchenzahl $P(\omega)$, die in Abbildung 5.3.12 dargestellt ist, eine sehr gute Übereinstimmung. Einen ersten, auf die 2L1T–Zustände zurückführbaren Beitrag zur Teilchenzahl sagt das SCGF–Verfahren bei $\omega \simeq -8$ eV voraus und damit nur unwesentlich früher als die QMC–Rechnung. Die für QMC stetig zunehmende Teilchenzahl wird von der mit SCGF bestimmten Treppenfunktion im Mittel gut reproduziert. Sogar der leichte Knick in der QMC–Kurve bei $\simeq -1$ eV findet sich in der SCGF–Kurve wieder.

Zum Schluß sind in den Abbildungen 5.3.13 und 5.3.14 noch die Zustandsdichte und die

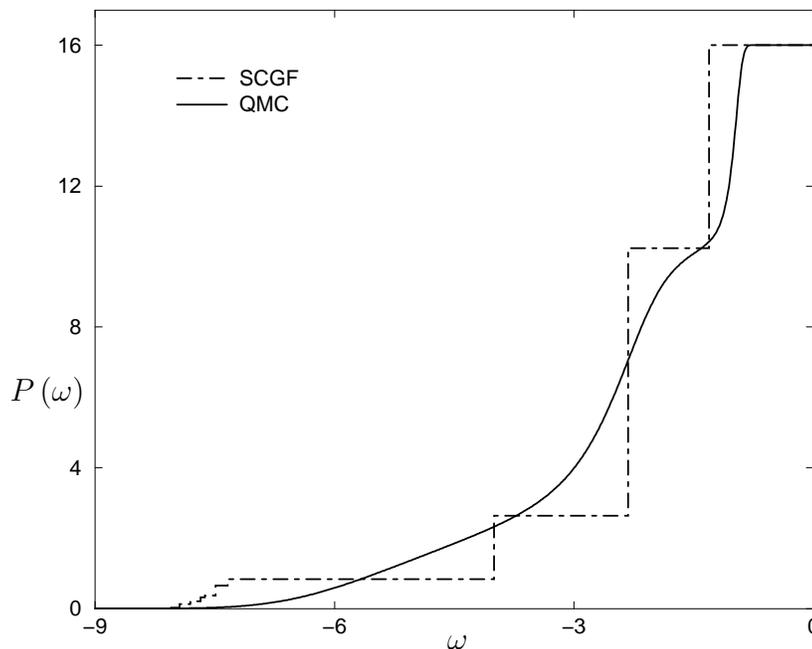


Abbildung 5.3.12: Integrierte Teilchenzahl für das QMC–Verfahren und den SCGF–Ansatz für das zweidimensionale 4×4 –Hubbard–Modell, $U/t = 4$ und halbe Füllung (ω in eV).

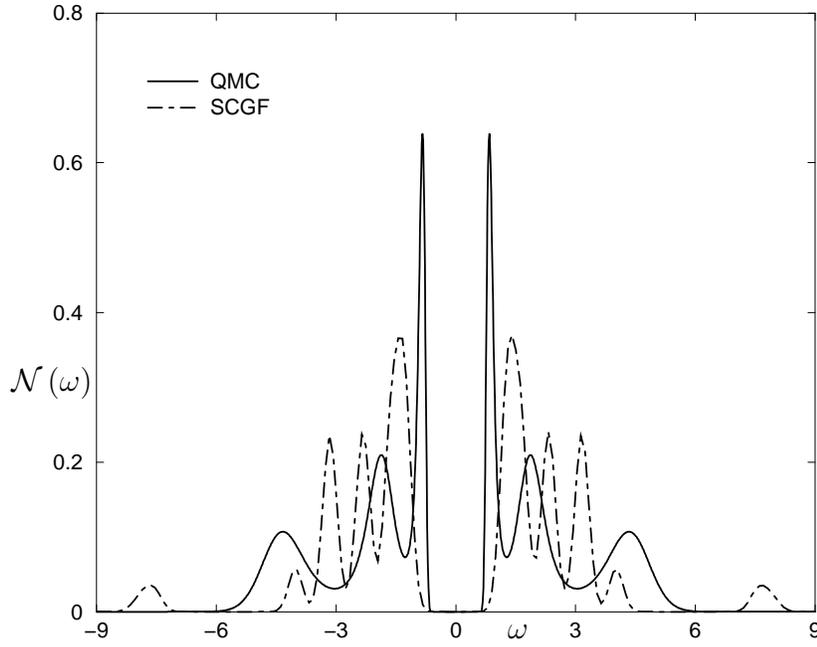


Abbildung 5.3.13: Vergleich der Zustandsdichten berechnet mit QMC bzw. SCGF für das zweidimensionale 6×6 -Hubbard-Modell, $U/t = 4$ und halbe Füllung (ω in eV).

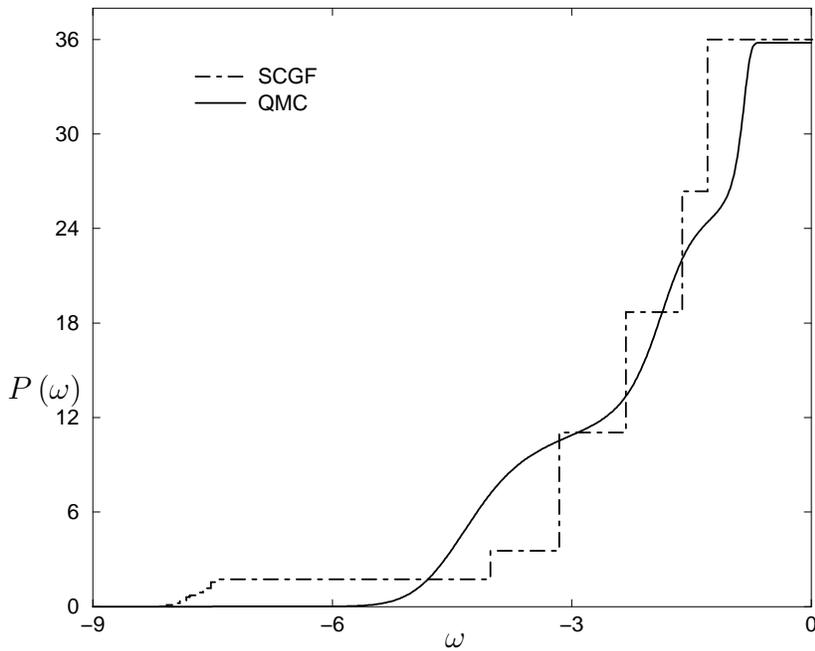


Abbildung 5.3.14: Integrierte Teilchenzahl für das QMC-Verfahren und den SCGF-Ansatz für das zweidimensionale 6×6 -Hubbard-Modell, $U/t = 4$ und halbe Füllung (ω in eV).

integrierte Teilchenzahl für das 6×6 -Hubbard-Modell für $U/t = 4$ und halbe Füllung angegeben. Bei der Zustandsdichte ist, ähnlich wie beim 4×4 -Fall, zu erkennen, daß wiederum das SCGF-Verfahren eine feiner strukturierte Kurve vorhersagt. Hier finden sich, neben den 2L1T-Peaks, vier Maxima unterhalb der Fermikante ($\varepsilon_F = 0$). Das QMC-Verfahren sagt drei Peaks voraus, wobei der höchste am nächsten an der Fermienergie liegt. Für den 6×6 -Fall sagt auch das SCGF-Verfahren den höchsten Peak in der Nähe der Fermienergie voraus. Zwar liegen die Maxima in der SCGF-Kurve näher beieinander als die in der QMC-Kurve, trotzdem kann man sagen, daß das qualitative Verhalten der Zustandsdichten hier wieder ähnlicher ist, als im 4×4 -Fall. Allerdings sagt das QMC-Verfahren hier keine besetzbaren Zustände im Bereich der 2L1T-(2T1L)-Energien voraus.

Für die Integrierte Teilchenzahl ist auch für das 6×6 -Hubbard-Modell eine gute Übereinstimmung zwischen den Vorhersagen der QMC und den SCGF-Resultaten zu erkennen. Die ersten Beiträge zur Teilchenzahl tauchen hier für das SCGF-Verfahren jedoch wieder bei deutlich tieferen Energien als die entsprechenden QMC-Beiträge auf. Dies ist selbstverständlich darauf zurückzuführen, daß das QMC-Verfahren keine besetzbaren Zustände im Bereich der 2L1T-Energien vorhersagt. Die Treppenfunktion reproduziert zwar auch hier die QMC-Kurve im Mittel recht gut, jedoch sind die Abweichungen etwas größer als für das 4×4 -Hubbard-Modell.

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

6.1 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden verschiedene physikalische Fragestellungen mit unterschiedlichen Methoden untersucht. Allen Problemstellungen ist dabei zu eigen, daß es möglich ist, den Sachverhalt in einem diskreten Modellraum zu formulieren. Diskrete Modellräume sind historisch bedeutsam, da sowohl in der Atomphysik als auch in der Kernphysik sehr erfolgreiche Schalenmodelle existieren, die sowohl qualitative als auch, in eingeschränkter Weise, quantitative Einblicke in die mikroskopische Struktur der Materie ermöglichen. Das Ziel dieser Arbeit war es, das einfachste Werkzeug in solch einem Schalenmodell, nämlich die HF-Rechnung, konsistent zu verbessern um so im Rahmen einer diskreten Darstellung der Modellraumzustände zu einer verbesserten Theorie zu gelangen. Die in dieser Arbeit untersuchten Vielteilchentheorien gliederten sich hierbei in zwei Gruppen.

Formalismus Greenscher Funktionen

Die Ein-Teilchen-Greensfunktion wurde unter Berücksichtigung der Selbstenergien erster und zweiter Ordnung aus einer selbstkonsistenten Lösung der Dyson-Gleichung bestimmt (SCGF-Verfahren). Dazu wurde die Dyson-Gleichung in ein nichtlineares Eigenwertproblem überführt. Um Selbstkonsistenz zu erreichen mußte die zu diesem Eigenwertproblem gehörende Matrix mehrfach neu aufgestellt und diagonalisiert werden, sowie ihre Dimension mit Hilfe des Lanczos-Algorithmus konstant gehalten werden. Die sich nach dem Selbstkonsistenzverfahren ergebende Greensfunktion kann dann zur Berechnung von Observablen herangezogen werden. Insbesondere wurde dieser Formalismus Greenscher Funktionen in der vorliegenden Arbeit für eine Kernstrukturrechnung von Sauerstoff 16 und für eine Untersuchung des ein- bzw. zweidimensionalen Hubbard-Modells verwendet. Bei der Untersuchung von Sauerstoff wurden moderne, die Isospin-

symmetrie verletzende Nukleon–Nukleon–Potentiale verwendet, so daß es möglich war, die Nolen–Schiffer–Anomalie zu untersuchen. Die Coulomb–Energieverschiebungen zwischen Zuständen in Kernen mit gleichem Gesamtsospin bei verschiedener Isospinprojektion konnte so teilweise erklärt werden. Darüberhinaus konnten auch die wichtigsten Einzelteilchen–Eigenschaften und die Grundzustandsenergie des Sauerstoffkerns mit einer für nichtrelativistische Kernstrukturrechnungen typischen Genauigkeit angegeben werden.

Neben dieser kernphysikalischen Anwendung wurde auch das in der Festkörperphysik wichtige Hubbard–Modell mit dem Formalismus Greenscher Funktionen untersucht. In der Sichtweise des Hubbard–Modells werden die Atome des Festkörpers auf Gitterpunkte reduziert und das dynamische Verhalten durch die Valenzelektronen beschrieben, die durch Hüpfen zwischen den Gitterplätzen kinetische Energie gewinnen bzw. sich aufgrund der Coulombwechselwirkung gegenseitig abstoßen können. Die Berücksichtigung der Selbstenergie zweiter Ordnung in der Dyson–Gleichung führte beim halbgefüllten Hubbard–Modell zu einer deutlichen Absenkung der Grundzustandsenergie relativ zu HF während die Korrektur der Besetzungszahlen gering ausfiel. Für das eindimensionale Hubbard–Modell konnten Vergleiche mit den exakten Resultaten angestellt werden, die eine deutliche Überlegenheit des SCGF–Verfahrens gegenüber einer HF–Rechnung zeigten. Für das zweidimensionale Hubbard–Modell mußte wegen der Größe des Konfigurationsraums ein speicheroptimiertes und parallelisiertes Programm geschrieben werden. Es konnten Vergleiche mit Quantum–Monte–Carlo–Rechnungen angestellt werden. Für beide Versionen des Hubbard–Modells konnte die spektroskopische Information extrahiert werden, die Aufschluß über die energetische Lokalisierung besetzbarer Zustände geben konnte.

Adaptive Basisgenerierung

Neben dem Formalismus Greenscher Funktionen wurden auch zwei Verfahren untersucht, mit denen die tatsächliche Vielteilchenwellenfunktion durch ihre wichtigsten Bestandteile approximiert wird. Im Einzelnen sind dies das BAGEL–Verfahren, das mit Hilfe des Lanczos–Algorithmus eine Basis generiert und das Coupled–Cluster– oder $\exp[S]$ –Verfahren, das bestimmte Klassen von n –Teilchen– n –Loch–Anregungen auf einem Startzustand aufbaut. Der Lanczos–Algorithmus ist besonders dazu geeignet die Diagonalisierung von Hamiltonoperatoren in einem Unterraum näherungsweise durchzuführen. Diese Vorgehensweise zeigt schnell Konvergenz und ermöglicht die Beschreibung von Systemen mit großen Konfigurationsräumen, die nicht mehr exakt behandelt werden können. Lanczos–Diagonalisierungen wurden für das kernphysikalische Paarproblem und das eindimensionale Hubbard–Modell durchgeführt. Für noch exakt diagonalisierbare Dimensionen konnte in beiden Fällen die rasche Konvergenz verifiziert werden und es konnte festgestellt werden, daß das Lanczos–Verfahren für die untersuchten Fragestellungen bei kleineren bis mittlere Teilchenzahlen sehr effizient ist.

Das $exp[S]$ -Verfahren wurde nur für den Paarhamiltonoperator getestet. Es zeigte sich, daß eine Restriktion auf Zwei-Teilchen-Zwei-Loch-Anregungen für kleine Paarkräfte bereits eine deutliche Verbesserung gegenüber der BCS-Theorie bringt. Für größere Paarkräfte bzw. Teilchenzahlen nimmt die Wichtigkeit höherer Anregungen rasch zu, so daß zumindest Vier-Teilchen-Vier-Loch-Anregungen berücksichtigt werden sollten, um akzeptable Resultate zu erzielen. Das $exp[S]$ -Verfahren schien insbesondere für das Paarproblem gut geeignet zu sein, da der Paarhamiltonoperator kein Aufbrechen von Paaren zuläßt und deshalb nur geradzahlige n -Teilchen- n -Loch-Anregungen berücksichtigt werden mußten, was den Rechenaufwand erheblich reduzierte.

6.2 Ausblick

Die in dieser Arbeit angewandten Verfahren ergaben für alle untersuchte Problemstellungen eine deutliche Verbesserung gegenüber den leichter handhabbaren Mean-Field-Methoden. Zwar ist es in einigen Jahren infolge verbesserter Großrechner sicher möglich die in dieser Arbeit untersuchten Vielteilchenmethoden auch für größere Konfigurationsräume anzuwenden, interessanter dürfte jedoch sein, diese Verfahren an anderen Problemstellungen zu testen, da nicht zu erwarten ist, daß sich das prinzipielle Verhalten dieser Methoden mit wachsender Teilchenzahl drastisch ändert. So wäre es sicher aufschlußreich, das $exp[S]$ -Verfahren auch für das Hubbard-Modell durchzuführen. Da die Anzahl der Freiheitsgrade beim Hubbard-Modell sehr viel größer ist, als beim Paarproblem gelingt es nicht ohne weiteres die Methodik eins zu eins zu übertragen. Es müßten effiziente Methoden zu Lösung von nichtlinearen Gleichungssystemen entwickelt werden, oder versucht werden, die Entartungen der Ein-Teilchen-Zustände so zu nutzen, daß Klassen von Zuständen zusammengefaßt werden können, um die Anzahl der unbekanntenen S -Amplituden zu verringern. Auch ist es eventuell denkbar, Monte-Carlo-Methoden mit dem $exp[S]$ -Verfahren zu kombinieren, so daß die S -Amplituden stochastisch und entsprechend ihrer Wichtigkeit erzeugt werden, man sich also auf wenige aber dafür signifikante Anregungen beschränken kann.

Desweiteren wäre es sicher auch möglich, das SCGF-Verfahren auf den Paarhamiltonian anzuwenden und zwar mit der BCS-Lösung als Startzustand. Wegen der engen Verwandtschaft der HF-Lösung für das Hubbard-Modell mit der BCS-Lösung für das Paarproblem, ist für letzteres ein ähnlich gutes Ergebnis zu erwarten, wie es beim Hubbard-Modell erzielt werden konnte. Von größtem Interesse wäre schließlich das SCGF-Verfahren auf das nicht halbgefüllte zweidimensionale Hubbard-Modell anzuwenden. Für das halbgefüllte Hubbard-Modell ist das QMC-Verfahren nämlich äußerst effizient, da das in QMC-Methoden gefürchtete Vorzeichenproblem keine Auswirkungen hat. Abseits von der Halbfüllung sorgt aber eben dieses Vorzeichenproblem dafür, daß es bei größeren Git-

tern nahezu unmöglich wird, vernünftige Ergebnisse zu erzielen. Das SCGF-Verfahren würde so eine Methode darstellen, die in der Lage ist ein System zu beschreiben, daß weder exakt, noch mit Hilfe stochastischer Integration bearbeitet werden kann. Die Wahl antiperiodischer Randbedingungen kann auch beim nicht halbgefüllten Hubbard-Modell eine endliche Energielücke an der Fermikante erzeugen, so daß es keine Probleme mit Entartungen geben und der SCGF-Formalismus anwendbar sein sollte.

Anhang A

Meson–Austausch–Potentiale

Hier sollen einige Eigenschaften der drei Potentiale CDBonn96, CDBonn99 und Argonne V_{18} angegeben werden, die in der Kernstrukturrechnung für ^{16}O verwendet werden. Da ein Ziel dieser Rechnung darin besteht, die Nolen–Schiffer–Anomalie so gut wie möglich zu erklären, ist allen Potentialen eine Verletzung der Isospinsymmetrie im starken Teil der NN–Wechselwirkung zu eigen. Der langreichweitige Teil der NN–Wechselwirkung wird bei allen Potentialen durch Ein–Pion–Austausch beschrieben, wobei die Massendifferenz zwischen π^0 und π^\pm berücksichtigt wird. Bei den Bonn–Potentialen führt die nichtrelativistische Reduktion des Pion–Austauschs zu Nichtlokalitäten in der Wechselwirkung. Beim Argonne V_{18} hingegen wird der Pion–Austausch lokal beschrieben. Desweiteren berücksichtigen alle Potentiale die Massenaufspaltung zwischen Proton und Neutron, die zu Korrekturen der kinetischen Energie und unterschiedlichen Matrixelementen für den Pion–Austausch führt, je nachdem, ob zwei Protonen oder zwei Neutronen das Meson austauschen.

Darüberhinaus berücksichtigen die Potentiale noch zusätzliche, die Ladungssymmetrie verletzenden Terme, die nötig sind, um die empirischen Unterschiede der Streuphasen und effektiven Reichweiten für Proton–Proton– und Neutron–Neutron–Streuung im 1S_0 –Zustand zu reproduzieren. Das Argonne V_{18} Potential wird in einer Spin–Isospin–Zerlegung konstruiert. Die lokalen Potentialmatrixelemente im $(S = 0, T = 1)$ –Kanal werden dabei so angepaßt, daß sie die 1S_0 –Streuphasen für die unterschiedlichen Isospinprojektionen reproduzieren. Die Ladungsabhängigkeiten von Partialwellen mit $L > 0$ werden beim Argonne V_{18} ausgehend von den Informationen über den 1S_0 –Zustand extrapoliert.

Die Ladungsabhängigkeit in Partialwellen mit $L > 0$ werden in den Bonn–Potentialen durch ein über den Ein–Meson–Austausch hinausgehendes Meson–Austausch–Modell beschrieben. Die Einflüsse der Nukleon–Massenaufspaltung werden dabei für Partialwellen bis $J = 4$ berechnet. Das CDBonn99–Potential berücksichtigt neben diesen die Isospinsymmetrie verletzenden Termen noch Effekte aus einem irreduziblen $\pi\gamma$ –Austausch, wie

er in [Kol98] hergeleitet wurde. Der Unterschied zwischen CDBonn99 und CDBonn96 ist, daß die Ladungssymmetrieverletzung beim letzteren nur im 1S_0 -Zustand und nicht in den höheren Partialwellen berücksichtigt wird.

Die wichtigsten Konstanten und Parameter der Potentiale CDBonn99 und Argonne V_{18} sind in Tabelle A.1 angegeben. Da das CDBonn99 eine konsistente Verbesserung des CDBonn96 ist und die Werte der Konstanten nicht nennenswert voneinander abweichen, sollen die Werte hier nur für das neuere der Bonn-Potentiale angegeben werden. In der Tabelle finden sich die Massen von Proton und Neutron sowie die der verwendeten Mesonen. $g^2/4\pi$ ist die Kopplungskonstante des jeweiligen Meson-Nukleon-Vertex und Λ ein cut-off Parameter, der bestimmt, bis zu welcher Energie ein Meson berücksichtigt werden soll. Die Stärke eines Wechselwirkungsmatrixelements hängt unter anderem von einem Formfaktor

$$\frac{\Lambda^2 - m_\pi^2}{\Lambda^2 + (\vec{q}' - \vec{q})^2}$$

ab, in dem $(\vec{q}' - \vec{q})^2$ der Dreierimpulsübertrag ist. Mit diesem Formfaktor muß jeder Vertex multipliziert werden, so daß Λ also ein für das Potential charakteristischer Parameter ist.

Da NN-Wechselwirkungen in der Regel Zwei-Körper-Charakter haben sollten moderne Potentialen neben den Streuphasen der NN-Streuung auch die Eigenschaften des gebundenen Zwei-Körper-Problems Deuteron beschreiben können. Deshalb ist es üblich die

Teilchen	CDBonn99			Argonne V_{18}		
	Masse [MeV]	$\frac{g^2}{4\pi}$	Λ [GeV]	Masse [MeV]	$\frac{g^2}{4\pi}$	Λ [GeV]
π^\pm	139.56995	13.6	1.72	139.5675	13.6	0.9
π^0	134.9764	13.6	1.72	134.9739	13.6	0.9
ρ^\pm, ρ^0	769.9	0.84	1.31			
ω	781.94	20.0	1.5			
Proton	938.27231			938.27231		
Neutron	939.56563			939.56563		

Tabelle A.1: Fundamentale Konstanten für die Potentiale CDBonn99 und Argonne V_{18} .

	CDBonn99	Argonne V_{18}	Experiment
Bindungsenergie B_d [MeV]	2.224575	2.224575	2.224575(9)
Asymptotischer S -Zustand A_S [$\text{fm}^{-1/2}$]	0.8846	0.8850	0.8846(9)
Asymptotischer D/S -Zustand η	0.0256	0.0256	0.0245(4)
RMS-Radius r_d [fm]	1.966	1.967	1.971(6)
Quadrupolmoment Q_d [fm^2]	0.270	0.270	0.2859(3)
Wahrscheinlichkeit D -Beimischung P_D [%]	4.85	5.76	

Tabelle A.2: *Statische Eigenschaften des Deuterons für die Potentiale CDBonn99 und Argonne V_{18} im Vergleich mit experimentellen Werten.*

Ergebnisse, die mit einer NN-Wechselwirkung für das Deuteron erzielt werden können, mit experimentellen Daten zu vergleichen. Die wichtigsten dieser Daten sind für das CDBonn99 und das Argonne V_{18} in Tabelle A.2 aufgeführt. Die hier verwendeten NN-Wechselwirkungen sind in der Lage alle meßbaren Größen mit Ausnahme des Quadrupolmoments im Rahmen der experimentellen Genauigkeit zu reproduzieren. Die Abweichungen der Vorhersagen beider Potentiale sind bis auf die experimentell nicht zugängliche Wahrscheinlichkeit der D -Beimischung verschwindend gering. Typischerweise sagen lokale Potentiale eine größer D -Beimischung voraus, was auf die die "off-shell"-Stärke der Tensorkraft zurückzuführen ist.

Anhang B

QMC–Formalismus

Hier sollen die wichtigsten Punkte einer QMC–Rechnung in der Pfadintegralformulierung kurz skizziert werden. Detailliertere Darstellungen finden sich in der Literatur [Koo97, Lan93, Nig99, Rom98, Rom97].

Hat man einen beliebigen Vielteilchen–Hamiltonoperator H , versucht man einen handhabbaren Ausdruck für den imaginären Zeitentwicklungsoperator

$$U = e^{-\beta H} \tag{B.1}$$

zu finden. β hat hier die Einheit inverse Energie, so daß β^{-1} als imaginäre Zeit aufgefaßt werden kann. Zwar kann U auch als der Boltzmann–Operator für die Temperatur β^{-1} aufgefaßt werden, trotzdem soll er im folgenden als Entwicklungsoperator bezeichnet werden. Ist $\beta > 0$ spricht man vom 'thermalen' Formalismus, geht $\beta \rightarrow \infty$ vom 'zero–temperature'–Formalismus und für die Zustandsfunktion gilt

$$Z = \text{Tr } e^{-\beta H} . \tag{B.2}$$

Der Erwartungswert eines beliebigen Operators berechnet sich nun nach

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr } [O e^{-\beta H}] . \tag{B.3}$$

Dabei ist die Spur Tr über die kanonische oder großkanonische Teilchenzahl zu bilden. Im 'zero–temperature'–Formalismus beginnt man mit einer Testwellenfunktion ψ_0 und verwendet den Entwicklungsoperator, um den Grundzustand herauszuprojizieren. Voraussetzung dafür ist, daß ψ_0 nicht orthogonal zum Grundzustand ist. Für den Erwartungswert des Operators O erhält man so

$$\langle O \rangle = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\langle \psi_0 | e^{-\frac{\beta}{2} H} O e^{-\frac{\beta}{2} H} | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | e^{-\beta H} | \psi_0 \rangle} . \tag{B.4}$$

Die Frage ist nun, welche Gestalt der Entwicklungsoperator U haben muß, so daß der Erwartungswert von O berechnet werden kann. Eine Möglichkeit besteht in einer Pfadintegralformulierung des Entwicklungsoperators. Hat man einen Hamiltonoperator, der höchstens Zwei-Teilchen-Operatoren beinhaltet, kann er mit geeigneten Operatoren \mathcal{O}_α als quadratische Form geschrieben werden

$$H = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} \mathcal{O}_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} V_{\alpha} \mathcal{O}_{\alpha}^2, \quad (\text{B.5})$$

wobei angenommen wurde, daß der quadratische Term diagonal in \mathcal{O}_{α} ist. Geeignete Operatoren sind hier zumeist Ein-Teilchen-Dichten. Die Stärke der Zwei-Teilchen-Wechselwirkung wird durch reelle Zahlen V_{α} beschreiben. Falls H als eine solche quadratische Form geschrieben werden kann, ist es möglich, den Entwicklungsoperator U als Pfadintegral zu schreiben. Dazu wird die Exponentialfunktion in N_t 'Zeitschritte' $\beta = N_t \Delta\beta$ aufgeteilt, so daß

$$U = \left[e^{-\Delta\beta H} \right]^{N_t} \quad (\text{B.6})$$

gilt. Dann muß eine Hubbard-Stratonovich-Transformation [Hub59] für den n -ten Zeitschritt des Zwei-Teilchen-Anteils durchgeführt werden, was auf

$$e^{-\Delta\beta H_2} \simeq \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\alpha} d\sigma_{\alpha n} \left(\frac{\Delta\beta |V_{\alpha}|}{2\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\Delta\beta \left(\sum_{\alpha} \frac{1}{2} |V_{\alpha}| \sigma_{\alpha n}^2 + \varepsilon_{\alpha} \mathcal{O}_{\alpha} + s_{\alpha} V_{\alpha} \sigma_{\alpha n} \mathcal{O}_{\alpha} \right) \right\} \quad (\text{B.7})$$

führt. s_{α} ist ein Phasenfaktor der ± 1 ist, wenn $V_{\alpha} < 0$ und $\pm i$ wenn $V_{\alpha} > 0$ ist. Jede reelle Variable $\sigma_{\alpha n}$ ist ein sogenanntes 'auxiliary field', das beim Zeitschritt n zum Operator \mathcal{O}_{α} gehört. Für den Entwicklungsoperator erhält man nun

$$U = \left[e^{-\Delta\beta H} \right]^{N_t} \simeq \int \mathcal{D}^{N_t} [\sigma] G(\sigma) e^{(-\Delta\beta h_{\sigma}(\tau_{N_t}))} \dots e^{(-\Delta\beta h_{\sigma}(\tau_1))}, \quad (\text{B.8})$$

wobei die Metrik

$$\mathcal{D}^{N_t} [\sigma] = \prod_{n=1}^{N_t} \prod_{\alpha} d\sigma_{\alpha n} \left(\frac{\Delta\beta |V_{\alpha}|}{2\pi} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (\text{B.9})$$

der Gaußfaktor

$$G(\sigma) = \exp \left(- \sum_{\alpha n} \frac{1}{2} |V_{\alpha}| \sigma_{\alpha n}^2 \right) \quad (\text{B.10})$$

und der Ein-Teilchen-Hamiltonoperator

$$h_{\sigma}(\tau_n) = \sum_{\alpha} (\varepsilon_{\alpha} + s_{\alpha} V_{\alpha} \sigma_{\alpha n}) \mathcal{O}_{\alpha} \quad (\text{B.11})$$

eingeführt wurden. Für den Grenzfall unendlich vieler Zeitschritte ist Gleichung (B.8) exakt. In der Praxis hat man jedoch immer eine endliche Zahl von Zeitschritten, so daß die Näherung nur in der Ordnung $\Delta\beta$ gültig ist.

Das Umschreiben des Entwicklungsoperators U als Pfadintegral, kann eine Berechnung von Observablen ermöglichen. Falls die \mathcal{O}_α Dichteoperatoren sind, ist (B.1) eine Exponentialfunktion von Zwei-Teilchen-Operatoren, die auf eine Slaterdeterminante wirkt und so eine Summe vieler Slaterdeterminanten erzeugt. Im Gegensatz dazu enthält die Pfadintegralformulierung (B.8) nur Ein-Teilchen-Operatoren im Exponenten, was dafür sorgt, daß jeweils eine Slaterdeterminante in eine andere überführt wird. Anstatt mit einer großen Anzahl von Slaterdeterminanten umgehen zu müssen, hat man so zu jedem Zeitpunkt nur mit einer Slaterdeterminante zu rechnen. Diese Vereinfachung muß man sich aber mit der Bestimmung eines hochdimensionalen Integrals über die Hilfsfelder ('auxiliary fields') erkaufen.

Die Berechnung diese komplizierten Integrals, zumindest wenn man keine sehr kleine Anzahl von Hilfsfeldern $\sigma_{\alpha n}$ hat, ist nur mit stochastischen Methoden, wie etwa einer Monte-Carlo-Integration, möglich. Definiert man sich den Ein-Teilchen-Entwicklungsoperator

$$U_\sigma(\beta, 0) = \lim_{N_t \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N_t} \exp(-\Delta\beta h_\sigma(\tau_n)) , \quad (\text{B.12})$$

so erhält man für den Erwartungswert des Operators O aus (B.4)

$$\langle O \rangle = \frac{\int \mathcal{D}[\sigma] G(\sigma) \langle O(\sigma) \rangle \xi(\sigma)}{\int \mathcal{D}[\sigma] G(\sigma) \xi(\sigma)} \quad (\text{B.13})$$

mit

$$\xi(\sigma) = \langle \psi_0 | U_\sigma(\beta, 0) | \psi_0 \rangle \quad (\text{B.14})$$

und

$$\langle O(\sigma) \rangle = \frac{\langle \psi_0 | U_\sigma(\beta, \frac{\beta}{2}) O U_\sigma(\frac{\beta}{2}, 0) | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | U_\sigma(\beta, 0) | \psi_0 \rangle} . \quad (\text{B.15})$$

Um (B.13) mit Monte-Carlo-Techniken zu berechnen, sollte man eine normierbare Gewichtsfunktion W_σ sowie einen Satz statistisch unabhängiger Hilfsfelder $\{\sigma_i\}$ wählen, so daß die Wahrscheinlichkeit ein Feld mit den Werten σ_i zu finden W_{σ_i} ist. Definiert man die Wirkung

$$S_\sigma = \sum_\alpha \frac{1}{2} |V_\alpha| \int_0^\beta d\tau \sigma_\alpha(\tau)^2 - \ln \xi(\sigma) , \quad (\text{B.16})$$

wird der Erwartungswert zu

$$\langle O \rangle = \frac{\int \mathcal{D}[\sigma] \langle O \rangle_{\sigma} e^{-S_{\sigma}}}{\int \mathcal{D}[\sigma] e^{-S_{\sigma}}} = \frac{\frac{1}{N} \sum_i \langle O \rangle_i \Phi_i}{\frac{1}{N} \sum_i \Phi_i}. \quad (\text{B.17})$$

N ist hierbei die Anzahl der Stichproben, das Integral wird diskretisiert und die Summe geht über den Stichprobensatz $\Phi_i = e^{S_{\sigma_i}}/W_i$. Idealerweise sollte e^{-S} durch W so gut wie möglich approximiert werden, da dann alle Summanden gleich wichtig sind ($\Phi_i \simeq 1$). Gelingt es nicht, ein geeignetes W zu finden, kann dies zur Folge haben, daß Φ_i stark oszilliert, was dazu führen kann, daß die Summen in Zähler und Nenner sehr klein werden und sich gegenseitig aufheben. Dieses sogenannte Vorzeichenproblem kann in ungünstigen Fällen dazu führen, daß die Fehler bei der Monte-Carlo-Integration zu groß sind um, bei vertretbarem Rechenaufwand, eine sinnvolle Aussage über den eigentlich zu berechnenden Erwartungswert $\langle O \rangle$ machen zu können.

Darüberhinaus ist oftmals die Zerlegung des Hamiltonoperators in die quadratische Form (B.5) nicht trivial und muß für jedes physikalische Problem aufs Neue durchgeführt werden, worauf hier aber nicht näher eingegangen werden kann. Abschließend bleibt zu sagen, daß es für viele Fragestellungen, wie z. B. die des Hubbard-Modells bei halber Füllung, sehr effizient ist, die Observablen nach der Beziehung (B.17) zu berechnen, was im Vorliegenden Fall das Entscheidende ist.

Literaturverzeichnis

- [All72] K. Allaart, *Nuclear superfluidity and the shell model*, Dissertation, Universität Amsterdam, (1972)
- [Ami97] K. Amir–Azimi–Nili, *Langreichweitige Korrelationen und die nukleare Spektralfunktion*, Dissertation, Universität Tübingen, (1997)
- [Arn51] W.E. Arnoldi, *Quart. Appl. Math.* **9** (1951) 17
- [Ass96] F.F. Assaad und M. Imada, *J. Phys. Soc. Jpn* **65** (1996), 189
- [Bau68] G. Baumgärtner und P. Schuck, *Kernmodelle*, BI Hochschultaschenbücher 203/203a*, Mannheim 1968
- [BCS57] J. Bardeen, L.N. Cooper, J.R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, (1957), 1175
- [Bis78] R.F. Bishop und K.H. Lührmann, *Phys. Rev.* **B17**, (1978), 3757
- [Bra90] M.G.E. Brand, K. Allaart und W.H. Dickhoff, *Nucl. Phys.* **A509** (1990) 1
- [Bra67] B.H. Brandow, *Rev. Mod. Phys.* **39** (1967) 771
- [Bru55a] K.A. Brueckner, *Phys. Rev.* **97** (1955) 1353. 156
- [Bru55b] K. A. Brueckner, *Phys. Rev.* **100** (1955) 36
- [Che73] H. Chen und R.W. Richardson, *Nucl. Phys.* **A212** (1973) 317
- [Coe58] F. Coester, *Nucl. Phys.* **7** (1958) 421
- [Dag92a] E. Dagotto, A. Moreo, F. Ortolani, D. Poilblanc und J. Riera, *Phys. Rev.* **B45** (1992) 10741
- [Dag92b] E. Dagotto, F. Ortolani und D. Scalapino, *Phys. Rev.* **B46** (1992) 3183
- [Dag94] E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.* **66** (1994) 763
- [Dew97] Y. Dewulf, D. Van Neck et al., *Phys. Lett.* **B396** (1997) 7

- [Eng97] L. Engvik, M. Hjorth–Jensen und A. Arima, *Nucl. Phys.* **A627** (1997) 97
- [Fen92] G.S. Feng und S.R. White, *Phys. Rev.* **B46** (1992) 8691
- [Fet71] A.L. Fetter und J.D. Walecka, *The Quantum Theorie of Many–Particle Systems*, McGraw–Hill, Inc., New York 1971
- [Geb97] F. Gebhard: *The Mott Metal–Insulator Transition*, Springer Tracts in Modern Physics, Springer–Verlag, Berlin 1997
- [Gol92] T. Goldman, J.A. Henderson und A.W. Thomas, *Few–Body Systems* **12** (1992) 193
- [Gol57] J. Goldstone, *Proc. Roy. Soc. (London)*, **A239** (1957) 267
- [Gra94] P. Grabmayr, G.J. Wagner et al., *Phys. Rev.* **C49** (1994) 2971
- [Har95] C.H. Harzer, *Korrelierte und unkorrelierte Zwei–Teilchen–Greensfunktionen zur Beschreibung von Atomkernen*, Diplomarbeit, Universität Tübingen (1995)
- [Har99] C.H. Harzer, H. Mütter und R. Machleidt, *Phys. Lett.* **B459** (1999) 1
- [Hub57] J. Hubbard, *Proc. roy. Soc.* **240** (1957) 539
- [Hub59] J. Hubbard, *Phys. Lett.* **3**, 77 (1959); R.D. Stratonovich, *Soviet Phys. Dokl.* **2**, (1958) 416
- [Jar96] M. Jarrell und J.E. Gubernatis, *Phys. Rep.* **269** (1996) 133
- [Koe92] H.S. Köhler, *Nucl. Phys.* **A537** (1992) 64
- [Kol98] U. van Kolck, M.C.M. Rentmeester, J.L. Friar, T. Goldman und J.J. de Swart *Phys. Rev. Lett.* **80** (1998) 4386
- [Koo97] S.E. Koonin, D.J. Dean und K. Langanke, *Phys. Rep.* **278**, (1997) 1
- [Kre93] G. Krein, A.W. Thomas und A.G. Williams, *Phys. Lett.* **B317** (1993) 293
- [Kue62] H. Kümmel, *Lectures on the many-body problem*, ed. E. R. Caianiello, Academic Press, New York (1962)
- [Kue78] H. Kümmel, K.H. Lührmann und J.G. Zabolitzky, *Phys. Rep.* **36C**, No. 1 (1978) 1
- [Lan50] C. Lanczos, *J. Res. Nat. Bur. Stand.* **45(4)** (1950) 255
- [Lan93] G.H. Lang, C.W. Johnson, S.E. Koonin und W.E. Ormand, *Phys. Rev.* **C48**, (1993) 1518

- [Leu94] M. Leuschner, J.R. Calarco und F.W. Hersman, *Phys. Rev.* **C49** (1994) 955
- [Li98] G.Q. Li und R. Machleidt, *Phys. Rev.* **C53** (1998) 1393
- [Lie68] E.H. Lieb, F.Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **20** (1968) 1445
- [Mac89] R. Machleidt, *Adv. Nucl. Phys.* **19** (1989) 189
- [Mac96] R. Machleidt, F. Sammarruca und Y. Song, *Phys. Rev.* **C53** (1996) R1483
- [Mac00] R. Machleidt, nucl-th/0006014
- [Mil90] G.A. Miller, M.K. Nefkens und I. Slaus, *Phys. Rep.* **194** (1990) 1
- [Mue88] H. Müther, T. Taigel und T.T.S. Kuo, *Nucl. Phys.* **A482** (1988) 601
- [Mue93a] H. Müther, L.D. Skouras, *Nucl. Phys.* **A555** (1993) 541
- [Mue93b] H. Müther, L.D. Skouras, *Phys. Lett.* **B306** (1993) 201
- [Mue95a] H. Müther, L.D. Skouras, *Nucl. Phys.* **A581** (1995) 247
- [Mue95b] H. Müther, A. Polls und W.H. Dickhoff, *Phys. Rev.* **C51** (1995) 3040
- [Mue95c] H. Müther, G. Knehr und A. Polls, *Phys. Rev.* **C52** (1995) 2955
- [Mue99] H. Müther, A. Polls und R. Machleidt, *Phys. Lett.* **B445** (1999) 259
- [Nec91] D. Van Neck, M. Waroquier und J. Ryckebusch, *Nucl. Phys.* **A530** (1991) 347
- [Neg88] J.W. Negele und H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems*, Addison-Wesley Publishing Company, Redwood City, (1988)
- [Nig99] A. Muramatsu, *Quantum Monte Carlo for Lattice Fermions*, M.P. Nightingale and C.J. Umrigar (eds.), *Proceedings of the NATO Advanced Study Institute on Quantum Monte Carlo Methods in Physics and Chemistry*, 343-373, Nato Science Series (1999)
- [Nol69] J.A. Nolen und J.P. Schiffer, *Annu. Rev. Nucl. Sci.* **19** (1969) 471
- [Pie93] J. Piekarewicz und A.G. Williams, *Phys. Rev.* **C47** (1993) 2462
- [Pre94] R. Preuss, A. Muramatsu, W. von der Linden, P. Dietrich, F.F. Assaad und W. Hanke, *Phys. Rev. Lett.* **73** (1994) 732
- [Ric61] R.W. Richardson und N. Sherman, *Nucl. Phys.* **52** (1961) 221
- [Ric77] R.W. Richardson, *J. Math. Phys.* **18** (1977) 1802

- [Rin80] P. Ring und P. Schuck: *The Nuclear Many-Body Problem*, Springer-Verlag, New York 1980
- [Rom98] S. Rombouts, K. Heyde und N. Jachowicz, *Phys. Rev.* **C58**, (1998) 3295
- [Rom97] S. Rombouts, *A Monte-Carlo method for fermionic many-body problems*, Dissertation, University of Gent (Belgien), 1997.
- [Sat76] H. Sato, *Nucl. Phys.* **A269**, (1976) 378
- [Sic91] I. Sick und P.K.A. de Witt Huberts, *Comments Nucl. Part. Phys.* **20** (1991) 177
- [Sto94] V.G.J. Stoks, R.A.M. Klomp, C.P.F. Terheggen und J.J. de Swart, *Phys. Rev.* **C49** (1994) 2950
- [Suz92] T. Suzuki, H. Sagawa und A. Arima, *Nucl. Phys.* **A536** (1992) 141
- [Wil65] J.H. Wilkinson, *The algebraic eigenvalue Problem*, Oxford Univ. Press, Oxford, 1965
- [Wir95] R.B. Wiringa, V.G.J. Stoks und R. Schiavilla, *Phys. Rev.* **C51**, (1995) 38
- [Yos96] K. Yosida, *Theory of magnetism*, Springer series in solid-state science, Springer Verlag, Berlin 1996
- [Zab74] J.G. Zabolitzky, *Nucl. Phys.* **A228** (1974) 272

Abbildungsverzeichnis

2.1.1	<i>Diagrammatische Darstellung der Störungsreihe für die Greensfunktion mit Hilfe der reduzierten Selbstenergie (doppelschraffierte Fläche)</i>	13
2.1.2	<i>Beispiele für irreduzible (erstes und zweites Diagramm von links) und reduzierbare (übrige Diagramme) Selbstenergieeinschübe</i>	13
2.1.3	<i>Der exakte Propagator in Abhängigkeit der irreduziblen Selbstenergie (schraffierte Flächen). Die Aufsummation aller möglichen Wiederholungen gibt wieder die reduzierbare Selbstenergie (doppelschraffierte Fläche).</i>	14
2.1.4	<i>Diagrammatische Darstellung der Dyson-Gleichung. Durch die irreduzible Selbstenergie (schraffierte Fläche) wird ein Zusammenhang zwischen dem exakten Propagator (Doppellinie) und dem freien Propagator (Einfachlinie) hergestellt.</i>	14
2.1.5	<i>Der Ein-Teilchen Propagator in HF-Näherung</i>	16
2.1.6	<i>Untersuchte Beiträge zur Selbstenergie erster und zweiter Ordnung</i>	18
2.1.7	<i>Im SCGF-Verfahren auftretende Beiträge zur Selbstenergie. Die Diagramme a) – c) zeigen die mit g^{HF} berechneten Startwerte der Selbstenergiebeiträge, während die Diagramme d) – g) Beispiele für Graphen sind, die durch das selbstkonsistente Verfahren generiert werden.</i>	20
2.1.8	<i>Selbstkonsistentes Iterationsschema des SCGF-Verfahrens.</i>	24
2.2.1	<i>Grafische Darstellung der S-Amplituden</i>	26
3.1.1	<i>Diskrete Schalenmodell-Zustände mit Spin-Bahn-Kopplung. Rechts sind die magischen Zahlen der Schalenabschlüsse angegeben.</i>	35
3.2.1	<i>Modellraum für einen reinen Paarhamiltonoperator (Impulsraum). Dargestellt ist der HF-Grundzustand.</i>	37

3.3.1	<i>Modellraum für das eindimensionale Hubbard-Modell (Ortsraum). Dargestellt ist eine mögliche Konfiguration.</i>	39
3.3.2	<i>Nearest-Neighbour-Hopping im zweidimensionalen Hubbard-Modell.</i>	40
3.3.3	<i>Ein-Teilchen-Spektrum des 4×4 Hubbard-Modells für $U = 0$.</i>	41
4.1.1	<i>Mesonaustausch von Nukleonen.</i>	43
4.3.1	<i>Multiplikation von zwei zeilenweise komprimierten Matrizen.</i>	48
4.3.2	<i>Multiplikation einer zeilenweise komprimierten mit einer spaltenweise komprimierten Matrix.</i>	48
5.3.1	<i>Antiferromagnetisch angeordnete Elektronenspins im eindimensionalen Hubbard-Modell.</i>	76
5.3.2	<i>Antiferromagnetisch angeordnete Elektronenspins im zweidimensionalen Hubbard-Modell.</i>	76
5.3.3	<i>Eine mögliche, nicht translationsinvariante Lösung des HF-Verfahrens für das eindimensionale Hubbard-Modell. Die Länge der Pfeile repräsentiert die Besetzungszahl am entsprechenden Gitterpunkt.</i>	79
5.3.4	<i>Konvergenz der Grundzustandsenergie bei einer Lanczos-Diagonalisierung für das eindimensionale Hubbard-Modell, 12 Gitterplätze und halbe Füllung. Aufgetragen ist der tiefste Energieeigenwert in Abhängigkeit der Anzahl der generierten Lanczos-Vektoren.</i>	85
5.3.5	<i>Grundzustandsenergiedifferenzen zwischen der exakten Lösung (E_0) und der HF- bzw. SCGF-Näherung (E_N) in Abhängigkeit von U/t für 8 Gitterplätze bei halber Füllung.</i>	88
5.3.6	<i>Vergleich der Zustandsdichten berechnet mit QMC bzw. SCGF für das eindimensionale Hubbard-Modell für $U/t = 4$, 12 Gitterplätze und halbe Füllung (ω in eV).</i>	94
5.3.7	<i>Polenergien der SCGF-Greensfunktionen $G_{\sigma k}(\omega)$ in Abhängigkeit des Gitterimpulses für 12 Gitterplätze, $U/t = 4$ und halbe Füllung.</i>	95
5.3.8	<i>Integrierte Teilchenzahl für das QMC-Verfahren und den SCGF-Ansatz für 12 Gitterplätze, $U/t = 4$ und halbe Füllung (ω in eV).</i>	97
5.3.9	<i>Räumliche Veranschaulichung der Besetzungszahlen für das 4×4-Hubbard-Modell bei halber Füllung und $U/t = 4$.</i>	99

5.3.10 *Räumliche Veranschaulichung der Besetzungszahlen für das 6×6 -Hubbard-Modell bei halber Füllung und $U/t = 4$.* 101

5.3.11 *Vergleich der Zustandsdichten berechnet mit QMC bzw. SCGF für das zweidimensionale 4×4 -Hubbard-Modell, $U/t = 4$ und halbe Füllung (ω in eV).* 102

5.3.12 *Integrierte Teilchenzahl für das QMC-Verfahren und den SCGF-Ansatz für das zweidimensionale 4×4 -Hubbard-Modell, $U/t = 4$ und halbe Füllung (ω in eV).* 103

5.3.13 *Vergleich der Zustandsdichten berechnet mit QMC bzw. SCGF für das zweidimensionale 6×6 -Hubbard-Modell, $U/t = 4$ und halbe Füllung (ω in eV).* 104

5.3.14 *Integrierte Teilchenzahl für das QMC-Verfahren und den SCGF-Ansatz für das zweidimensionale 6×6 -Hubbard-Modell, $U/t = 4$ und halbe Füllung (ω in eV).* 104

Tabellenverzeichnis

4.3.1	<i>Zeilenweise Kompression einer schwach besetzten Dreiecksmatrix.</i>	47
4.3.2	<i>Vergleich des Speicherbedarfs der exakten und der SCGF-Matrix für unterschiedliche Kompressionsarten. Die Angaben beziehen sich auf das 6×6-Hubbard-Modell bei halber Füllung.</i>	49
4.3.3	<i>Hardwareprofil des verwendeten HP V-Class V2200 Rechners</i>	51
4.3.4	<i>Programmlaufzeiten in Abhängigkeit der Anzahl von Prozessoren für unterschiedliche maximale Polanzahlen und daraus resultierenden Matrixdimensionen. Alle Angaben beziehen sich auf das zweidimensionale Hubbard-Modell mit $U = 4$ und $t = 1$.</i>	53
5.1.1	<i>Ein-Teilchen-Eigenschaften von Protonen und Bindungsenergie pro Nukleon in ^{16}O für drei verschiedene Potentiale.</i>	58
5.1.2	<i>Coulomb-Verschiebung der Energie für Ein-Loch- ($p_{3/2}^{-1}$ und $p_{1/2}^{-1}$) und Ein-Teilchen-Zustände ($d_{5/2}$ und $1s_{1/2}$) bezogen auf ^{16}O in keV.</i>	60
5.2.1	<i>Vergleich der exakten und der BCS-Ergebnisse für den Paarhamiltonoperator für verschiedene Wechselwirkungsstärken und 3 Nukleonenpaare in 6 Schalen. Angaben für G, ε_k und E_0 in MeV.</i>	65
5.2.2	<i>Besetzungszahlen und Grundzustandsenergie für 4 Paare in 8 Schalen, $G = 0.3$ MeV und unterschiedliche Anzahlen von generierten Lanczos-Vektoren. Zum Vergleich ist auch die BCS-Lösung angegeben. Angaben für ε_k und E_0 in MeV.</i>	67
5.2.3	<i>Besetzungszahlen und Grundzustandsenergie für 5 Paare in 10 Schalen, $G = 0.3$ MeV und unterschiedliche Anzahlen von generierten Lanczos-Vektoren. Zum Vergleich ist auch die BCS-Lösung angegeben. Angaben für ε_k und E_0 in MeV.</i>	68

5.2.4	<i>Vergleich der exakten Ergebnisse mit den Ergebnissen aus der S_2- und S_4-Näherung sowie den BCS-Resultaten für den Paarhamiltonoperator für verschiedene Wechselwirkungsstärken und 2 Nukleonenaare in 6 Schalen. Angaben für G, ε_k^0 und E_0 in MeV.</i>	71
5.2.5	<i>Vergleich der exakten Ergebnisse mit den Ergebnissen aus der S_2- und S_4-Näherung sowie den BCS-Resultaten für den Paarhamiltonoperator für verschiedene Wechselwirkungsstärken und 3 Nukleonenaare in 7 Schalen. Angaben für G, ε_k^0 und E_0 in MeV.</i>	72
5.2.6	<i>Vergleich der exakten Ergebnisse mit den Ergebnissen aus der S_2- und S_4-Näherung sowie den BCS-Resultaten für den Paarhamiltonoperator für verschiedene Wechselwirkungsstärken und 4 Nukleonenaare in 8 Schalen. Angaben für G, ε_k^0 und E_0 in MeV.</i>	73
5.3.1	<i>Vergleich von HF und exaktem Ergebnis für das eindimensionale Hubbard-Modell im Ortsraum. Angaben für E_0 in eV.</i>	79
5.3.2	<i>Vergleich von HF und exaktem Ergebnis für das eindimensionale Hubbard-Modell im Impulsraum. Angaben für ε_k und E_0 in eV.</i>	81
5.3.3	<i>Besetzungszahlen und Grundzustandsenergie für das eindimensionale Hubbard-Modell, 8 Gitterplätze, halbe Füllung, $U/t = 4$ und unterschiedliche Anzahlen von generierten Lanczos-Vektoren. Zum Vergleich ist auch die HF-Lösung angegeben. Angaben für ε_k und E_0 in eV.</i>	83
5.3.4	<i>Besetzungszahlen und Grundzustandsenergie für das eindimensionale Hubbard-Modell in Abhängigkeit der Maximalanzahl von Polen in der Ein-Teilchen-Greensfunktion für 6 Gitterplätze, $U/t = 4$ und halbe Füllung. Angaben für ε_k und E_0 in eV.</i>	86
5.3.5	<i>Vergleich der HF-, SCGF- und exakten Resultate für die Besetzungszahlen und die Grundzustandsenergie des eindimensionalen Hubbard-Modells mit 8 Gitterplätzen und halber Füllung für zwei verschiedene U/t. Angaben für ε_k und E_0 in eV.</i>	89
5.3.6	<i>Vergleich der HF-, SCGF- und exakten Resultate für die Besetzungszahlen und die Grundzustandsenergie des eindimensionalen Hubbard-Modells mit 10 Gitterplätzen und halber Füllung für zwei verschiedene U/t. Angaben für ε_k und E_0 in eV.</i>	90

5.3.7	<i>Vergleich der HF-, SCGF- und exakten Resultate für die Besetzungszahlen und die Grundzustandsenergie des eindimensionalen Hubbard-Modells mit 12 Gitterplätzen und halber Füllung für zwei verschiedene U/t. Angaben für $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ und E_0 in eV.</i>	91
5.3.8	<i>Grundzustandsenergie und ausgewählte Besetzungszahlen für das 4×4-Hubbard-Modell bei halber Füllung. Angaben für $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ und E_0 in eV.</i>	98
5.3.9	<i>Grundzustandsenergie und ausgewählte Besetzungszahlen für das 6×6-Hubbard-Modell bei halber Füllung. Angaben für $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ und E_0 in eV.</i>	100
A.1	<i>Fundamentale Konstanten für die Potentiale CDBonn99 und Argonne V_{18}.</i>	111
A.2	<i>Statische Eigenschaften des Deuterons für die Potentiale CDBonn99 und Argonne V_{18} im Vergleich mit experimentellen Werten.</i>	112

Danksagung

An erster Stelle sei Herrn Prof. Dr. H. Mütter gedankt, ohne den diese Arbeit nicht realisierbar gewesen wäre. Neben den fruchtbaren Diskussionen in vielen Gebieten der theoretischen Physik trugen auch die durch ihn geschaffenen finanziellen Rahmenbedingungen, zunächst in Form eines Stipendiums, später in Form einer Anstellung im Sonderforschungsbereich 382, das Wesentliche zum Gelingen meiner Dissertation bei.

Danken möchte ich Herrn Prof. Dr. Mütter ferner für die Ermöglichung der Teilnahme an einigen internationalen Konferenzen, auf denen ich, auch durch dort geknüpfte Kontakte zu anderen Wissenschaftlern, viel lernen konnte.

Lehrreiche Diskussionen mit Mitgliedern der Institute für Theoretische Physik in Tübingen, Stuttgart und Gent (Belgien) trugen ebenfalls zum Gelingen meiner Arbeit bei. Gedankt sei hier Priv.-Doz. Dr. Alfons Buchmann, Dr. Stefan Ulrych, Dr. Karim Amir-Azimi-Nili, Dr. Ralf Hofmann, Dr. Ulrich Meyer, Dr. Georg Wagner, Michael Heim, Erdmann Schiller, Oliver Haug, Prof. Dr. Alejandro Muramatsu, Priv.-Doz. Dr. Fakher Asaad, Dr. Michael Brunner, Dr. Stefan Rombouts, Yves Dewulf und Nathalie Jachowicz.

Dank gesagt sei auch Prof. Dr. Hanns Ruder, dem Sprecher und Organisator des Sonderforschungsbereich *Verfahren und Algorithmen zur Simulation physikalischer Prozesse auf Höchstleistungsrechnern*, dem der Fluß finanzieller Mittel zu verdanken ist.

Nicht unerwähnt sollen die für die Computer-Infrastruktur Verantwortlichen, Priv.-Doz. Dr. Reinhard Alkofer und Steven Ahlig bleiben, die bei gelegentlichen Systemstillständen stets um zügige Problembehebung bemüht waren.

Desweiteren sei Sabine Biesinger neben ihrer bürokratischen Hilfe auch für die gemeinsamen auflockernden Koffeinpausen gedankt. Ferner schulde ich meinen Freunden Bastian Frey, Jörg Ostrowski und Daniel Knödler Dank für interessante Diskussionen, Korrekturlesen oder EDV-Tips. Zum Schluß sei auch insbesondere meinen Eltern gedankt, die immer an das Gelingen meiner Arbeit geglaubt und mich während Studium und Promotion moralisch und finanziell unterstützt haben.