

Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
Institut für Theoretische Physik und Astrophysik

Berechnung von quantenmechanischen Observablen im G1-G2 Schema

Bachelorarbeit

zur Erlangung des akademischen Grades
Bachelor of Science

Autor: Jonas Mahnke
MatNr. 1137657

1. Gutachter: Prof. Dr. Michael Bonitz
2. Gutachter: Priv.-Doz. Dr. Hanno Kählert

Kiel im Januar 2022

Zusammenfassung

Die Untersuchung von Observablen in Vielteilchensystemen ist ein elementarer Bestandteil der Informationsgewinnung für verschiedene physikalische Systeme und mögliche Simulationsschemata. Durch das erst vor kurzem entwickelte G1-G2 Schema [1], welches eine lineare Skalierung mit der Zeit bewirkt, ist es möglich Observablen zu untersuchen, die bisher kaum bis gar nicht im normalen Greenfunktion Schema berechenbar waren. Folglich ist eine Untersuchung dieser Observablen von besonders großem Interesse. Bevor diese jedoch in physikalisch interessanten Systemen wie Graphen verwendet werden können, ist eine allgemeine Untersuchung auf deren Eigenschaften und Genauigkeit notwendig. Daher befasst sich diese Arbeit im Rahmen des G1-G2 Schemas mit verschiedenen Ein- und Zweiteilchen-Observablen für Transport- und Struktureigenschaften. Diese werden zunächst analytisch abgeleitet und anschließend für kleine Hubbard-Systeme untersucht. Bei diesen Observablen wird speziell auf die Entwicklung für verschiedene Wechselwirkungspotentiale und den Vergleich zu exakten Rechnungen eingegangen.

Dabei kann zunächst ein Ausdruck für die Stromdichte in diskreten Hubbard-Systemen abgeleitet und verwendet werden, um Transportprozesse zu untersuchen. Die Stromdichte kann weiter mithilfe der Kontinuitätsgleichung verwendet werden, um Simulationsschemata mit dem Euler-Verfahren zu vergleichen. Es wird außerdem gezeigt, dass es möglich ist, mithilfe der Stromdichte die Schwerpunktgeschwindigkeit einer 1D-Kette effizient zu berechnen, um diese bei verschiedenen Wechselwirkungsstärken zu untersuchen. Für das lokale magnetische Moment kann gezeigt werden, dass besonders Fehler an den Rändern auftreten, wo durch Randeffekte starke Korrelationen entstehen. Das magnetische Moment, sowie die Paarverteilung zeigen dabei das schon bekannte antiferromagnetische Verhalten, welches im Hubbard-Modell bei großen Wechselwirkungspotentialen entsteht [2]. Die Paarkorrelationsfunktion weist ein Verhalten auf, bei welchem die Spindichtewelle direkt beobachtet werden kann. Hier zeigt sich, dass Fehler bei besonders weit entfernten Gitterpunkten entstehen. Des Weiteren kann anhand der Paarverteilung gezeigt werden, dass auch in diskreten Gittersystemen ein für Fermi-Gase und Fermi-Flüssigkeiten typisches Austauschkorrelationsloch entsteht. Für ein großes 1D-Gitter mit periodischen Randbedingungen können qualitativ dieselben Ergebnisse, wie für ein Elektronengas reproduziert werden. Es zeigt sich außerdem, dass die Ursache dieser Effekte im Fock-Anteil der Paarverteilung für selbe Spins liegt.

Abstract

The investigation of observables in many-body systems is an elementary component for obtaining information for various physical systems and possible simulation schemes. With the recently developed G1-G2 scheme [1], which achieves a linear scaling over time, it is now possible to examine observables that were previously difficult or not at all computable in the two-time Green function scheme. Hence, an investigation of these observables is of particular interest. However, before these can be used in physically close systems such as graphene, a general examination of properties and accuracy is necessary. In this thesis, therefore, within the framework of the G1-G2 scheme, various one- and two-particle observables for transport and structural properties are investigated, which are first derived analytically and then studied for small Hubbard systems. In the case of these observables, the development for different interaction potentials and the comparison with exact calculations are discussed in particular.

At first, an expression for the current density in discrete Hubbard systems can be derived and used to investigate transport processes. The current density can further be used, with the help of the continuity equation, to examine different simulation schemes for comparison with the Euler method. It is also shown that it is possible to use the current density to efficiently calculate the center of mass for a 1D chain in order to investigate it at different interaction strengths. Referring to the local magnetic moment it can be shown that errors occur particularly at the edges, where strong correlations arise from edge effects. The magnetic moment as well as the pair distribution show the already known antiferromagnetic behavior, which arises in the Hubbard model with large interaction potentials [2]. The pair correlation function shows a behavior in which the spin density wave can be observed directly, whereby it is shown that errors arise particularly at distant sites. Furthermore, using the pair distribution it can be shown that an exchange correlation hole, which is typical for Fermi gases and Fermi liquids, also arises in discrete lattice systems. For a large 1D lattice with periodic boundary conditions, the same results can be reproduced qualitatively as for an electron gas. It also shows that the cause of these effects lies in the Fock part of the pair distribution with same spins.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Theorie	3
2.1	Zweite Quantisierung	3
2.2	Hubbard-Modell	8
2.3	Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen	11
2.3.1	Generalisierter Kadanoff-Baym Ansatz	15
2.3.2	G1-G2 Schema	17
2.3.3	Contraction Consistency	20
2.3.4	Purification	22
3	Observablen	24
3.1	Einteilchen-Observablen	24
3.2	Zweiteilchen-Observablen	31
4	Untersuchung der Observablen	38
4.1	Setup	38
4.2	Energien	39
4.3	Stromdichte	40
4.4	Paarverteilung & Paarkorrelationsfunktion	47
4.5	Magnetisches Moment	56
5	Fazit und Ausblick	60
	Literaturverzeichnis	62
	Anhang	66
	Eidesstattliche Erklärung	76

1 Einleitung

Vielteilchensysteme sind schon lange von großem Interesse und gut untersuchte Forschungsgebiete in der Physik. Dennoch werden weiterhin große Fortschritte in diesem Bereich durch die Entwicklung von verbesserten Computersimulationen gemacht. Ein wichtiges Teilgebiet der Vielteilchentheorie sind die sogenannten *Nicht-Gleichgewichts-Greenfunktionen* (NEGF), welche schon seit den 1960er Jahren bekannt sind [3]. NEGF Simulationen erlebten in letzter Zeit eine große Weiterentwicklung, denn durch das 2021 entwickelte G1-G2 Schema [4], welches die Skalierung mit Zeitschritten linearisiert, ist es möglich auch zeitlich lange Simulationen durchzuführen. Des Weiteren öffnet sich durch das neu entwickelte Schema die Möglichkeit auf Observablen zuzugreifen, welche bisher nur umständlich oder gar nicht über das normale NEGF Schema berechenbar waren [1]. Besonders Zweiteilchen-Observablen können nun durch die Zweiteilchen-Greenfunktion problemlos abgegriffen und untersucht werden.

Um dieses neue Schema besser zu verstehen, ist es besonders notwendig die möglichen Observablen zu untersuchen. Diese geben nicht nur Auskunft über die Genauigkeit der Simulationen, sowie der verschiedenen Approximationen, sondern auch über den Vergleich mit experimentellen Daten kann die physikalische Genauigkeit überprüft werden. Durch die Entwicklung neuer Verfahren zur Herstellung und Untersuchung von Graphen konnten dabei viele neue Vergleiche mit den NEGF Simulationen zu sogenannten Graphen-Nanoribbons gemacht werden, die eine hohe Übereinstimmung mit den experimentellen Daten zeigen [5].

In dieser Arbeit wird sich mit ausgewählten Einteilchen- und Zweiteilchen-Observablen auseinandergesetzt, welche zunächst abgeleitet werden und danach mit den G1-G2 Simulationen untersucht werden. Ein besonderer Fokus liegt dabei auf den Zweiteilchen-Observablen, wie der Paarverteilung, der Paarkorrelationsfunktion sowie dem magnetischen Moment, welche durch das neue Schema zugänglich geworden sind. Des Weiteren wird die Wahrscheinlichkeitsstromdichte untersucht, welche für Transportprozesse relevant ist.

Zunächst wird eine kurze Übersicht über die erste Quantisierung gegeben und im Anschluss die zweite Quantisierung zusammengefasst, wobei zum einen die Spinstatistik und die Besetzungszahldarstellung von Vielteilchensystemen und zum anderen der Apparat der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren vorgestellt wird. Weiter wird eine kurze Einführung des Hubbard-Modells gegeben, welches die Skalierung der NEGF Simulationen stark verbessert. Danach werden die NEGF, sowie eine Ableitung der *Kadanoff-Baym Gleichungen* (KBE) präsentiert, welche numerisch im *generalized Kadanoff-Baym ansatz* (GKBA) verbessert werden. Es folgt eine Herleitung des G1-G2 Schemas aus den GKBA Gleichungen, sowie eine kurze Erklärung der verschiedenen Näherungen. Als weitere Verbesserung für die Genauigkeit der Simulationen wird die Näherung *Contraction Consistency* (CC) vorgestellt, welche fehlerhafte Spurrelationen der NEGF durch einen

zusätzlichen Term in der sogenannten *dynamically-screened-ladder* (DSL) Näherung korrigiert. Des Weiteren wird das *Purification* Schema (Pur) dargestellt, welches ausbrechende Eigenwerte korrigiert, sodass noch genauere Rechnungen bei großen Wechselwirkungspotentialen möglich sind. Aufbauend wird gezeigt, wie Erwartungswerte von Observablen in zweiter Quantisierung mithilfe des Ensemblemittelwerts berechnet werden und wie diese aus dem G1-G2 Schema gewonnen werden können. Dabei werden verschiedene Einteilchen- und Zweiteilchen-Observablen abgeleitet und betrachtet. Ausgewählte Observablen werden in Grundzustandsrechnungen, sowie in Nichtgleichgewichtsrechnungen untersucht auf ihr Verhalten bei verschiedenen Wechselwirkungspotentialen sowie auf ihre Genauigkeit durch Vergleich mit exakten Rechnungen.

2 Theorie

In diesem Kapitel werden die für diese Arbeit relevanten theoretischen Grundlagen dargestellt. Dazu wird zunächst der Apparat der zweiten Quantisierung vorgestellt. Darauf aufbauend wird ein vereinfachtes Modell in zweiter Quantisierung, das Hubbard-Modell, eingeführt, welches NEGF Simulationen numerisch erleichtert. Abschließend werden die Nicht-Gleichgewichtsgreenfunktionen eingeführt, aus diesen die für diese Arbeit wichtigen G1-G2 Gleichungen abgeleitet sowie weitere Näherungen zur Verbesserung der Genauigkeit dieses Schema vorgestellt.

2.1 Zweite Quantisierung

Die zweite Quantisierung ist eine quantenmechanische Erweiterung, die äquivalent zur ersten Quantisierung steht, um Vielteilchenprobleme zu behandeln. Entwickelt wurde der physikalische Apparat, für den harmonischen Oszillator, welcher mithilfe der Besetzungszahldarstellung und den Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren beschrieben werden kann. Die zweite Quantisierung hat große Anwendungszwecke in der Quantenfeldtheorie, aber auch in der Festkörperphysik. Nach einer Zusammenfassung der ersten Quantisierung wird auf die Spinstatistik, die wichtigen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, sowie auf die Darstellung der Observablen in zweiter Quantisierung eingegangen. Für mehr Informationen zur zweiten Quantisierung sei auf [6] verwiesen.

Erste Quantisierung

Ein quantenmechanischer Zustand ist ein sogenannter Zustandsvektor, welcher ein Element des Hilbertraums \mathcal{H} ist. Nach Dirac wird ein solcher Zustand als ein *Ket* Zustand $|\Psi\rangle$ geschrieben, wobei zugehörig der *Bra* Zustand $\langle\Psi|$ aus dem dualen Hilbertraum $\tilde{\mathcal{H}}$ existiert.

Die Bewegungsgleichung der Quantenmechanik ist die Schrödingergleichung, mit der zeitabhängigen Form

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}_S|\Psi(t)\rangle. \quad (2.1)$$

Dabei ist \hat{H} der Hamiltonoperator, welcher auf den Zustand $|\Psi(t)\rangle$ wirkt. Im *Schrödingerbild* sind alle Zustandsvektoren zeitabhängig, während die Operatoren des Hilbertraums zeitunabhängig sind. Um experimentelle Messdaten zu vergleichen ist es notwendig, den Erwartungswert von verschiedenen Observablen zu bestimmen. Im Allgemeinen werden diese durch

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\Psi(t)|\hat{A}|\Psi(t)\rangle \quad (2.2)$$

berechnet. Im *Heisenberg-Bild* sind die Operatoren zeitabhängig und die Zustände zeitunabhängig. Mithilfe des Zeitentwicklungsoperators kann der Erwartungswert im Schrödingerbild umgeschrieben werden. Die Bewegungsgleichung im Heisenberg-Bild ist die sogenannte *Heisenberg-Gleichung*

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = [\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t_0)] + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_H(t). \quad (2.3)$$

Mit der Bedingung $\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_H(t) = 0$ vereinfacht sich die Gleichung zu

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = [\hat{A}_H(t), \hat{H}_H(t_0)]. \quad (2.4)$$

Für mehr Informationen zur ersten Quantisierung sei auf [7] verwiesen.

Besetzungszahldarstellung

Ein Vielteilchenzustand $|\Psi_{\{j\}}\rangle$ aus N Teilchen besteht aus einem Zustandsvektor, welcher von den Quantenzahlen $\{j\} = \{j_1, j_2, \dots, j_N\}$ abhängt. Zur Vertauschung von Indizes wird der sogenannte Permutationsoperator

$$\hat{P}_{j_k, j_l} := |\Psi_{\{j_1, j_2, \dots, j_k, \dots, j_l, \dots, j_N\}}\rangle = |\Psi_{\{j_1, j_2, \dots, j_l, \dots, j_k, \dots, j_N\}}\rangle. \quad (2.5)$$

eingeführt. Für den Permutationsoperator und den Hamiltonoperator gilt, dass diese kommutieren, also $[\hat{P}_{j_k, j_l}, \hat{H}] = 0$. Beide Operatoren besitzen somit gemeinsame Eigenzustände, woraus folgt, dass bei Anwendung des Permutationsoperators der Eigenwert $\lambda^\pm = \pm 1$ entsteht. Mithilfe des Permutationsoperators ist es also möglich einen symmetrischen oder antisymmetrischen Zustand zu konstruieren. Dazu wird der Operator $\hat{\Lambda}_{1\dots N}^\pm$ eingeführt, welcher Zustände symmetrisieren oder antisymmetrisieren kann:

$$\hat{\Lambda}_{1\dots N}^\pm := \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\hat{P} \in S_N} \text{sign}(P) \hat{P}. \quad (2.6)$$

Dabei stellt $\text{sign}(P)$ die Parität der Permutation und S_N die Permutationsgruppe dar. Der Zustand $|\Psi_{\{j\}}\rangle$ ist unphysikalisch, da die Ununterscheidbarkeit der Teilchen nicht gewahrt wird. Deshalb wird mithilfe $\hat{\Lambda}_{1\dots N}^\pm$ der symmetrische/antisymmetrische Zustand $|\Psi_{\{j\}}\rangle^\pm$ erzeugt, welcher physikalisch korrekt ist. Dieser neue Zustand besitzt die Information, wie viele Teilchen ein Orbital besetzen. Es ist sinnvoll, diese Zustände in eine Darstellung zu bringen, in welcher deutlich wird, wie viele Teilchen n_i sich im Orbital $|\Phi_i\rangle$ befinden. Diese Darstellung wird *Besetzungszahldarstellung* genannt:

$$|\Psi_{\{j\}}\rangle^\pm = |n_1 n_2 \dots\rangle = |\{n\}\rangle. \quad (2.7)$$

Dabei gilt $n_p \in \mathbb{N}_0$ und $p \in \mathbb{N}$. Die Notation $\{n\}$ beschreibt dabei die Gesamtmenge der Besetzungszahlen. Für die Besetzungszahldarstellung gelten die üblichen Orthonormalisierungsbedingungen

$$\langle \{n\} | \{n'\} \rangle = \delta_{\{n\}, \{n'\}} = \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} \dots \delta_{n_N n'_N}, \quad (2.8)$$

$$\sum_{\{n\}} |\{n\}\rangle \langle \{n\}| = 1. \quad (2.9)$$

Diese Darstellung besitzt den Vorteil, dass sie für Fermionen und Bosonen gilt und sich nur die möglichen Besetzungszahlen bei beiden Teilchenarten unterscheiden.

Die Zustände $|\Psi_{\{j\}}\rangle^\pm$ sind dabei Elemente des symmetrischen und antisymmetrischen Hilbertraums \mathcal{H}^\pm . Durch die Einführung der sogenannten Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, welche die Teilchenzahl erhöhen oder verringern kann, ist es notwendig, den sogenannten *Fock-Raum* \mathcal{F} einzuführen, welcher die Summe aller symmetrischen oder antisymmetrischen Hilberträume ist.

$$\mathcal{F}^\pm = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_n^\pm \quad (2.10)$$

Der Vakuum-Zustand ist der Zustand, in welchem die Besetzungszahlen alle null sind:

$$|\text{Vak}\rangle = |0, 0, \dots, 0\rangle. \quad (2.11)$$

Der antisymmetrische Zustand für Fermionen wird durch Anwendung des Antisymmetrisierungsoperators auf einen Produktzustand $|\Psi_{\{j\}}\rangle = |j_1\rangle_1 |j_2\rangle_2 \dots |j_N\rangle_N$ gewonnen. Dies führt zur sogenannten Slater- Determinante, welche folgende Form besitzt:

$$|\Psi_{\{j\}}\rangle^- = \hat{\Lambda}_{1\dots N}^- |\Psi_{\{j\}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |j_1\rangle_1 & |j_1\rangle_2 & \dots & |j_1\rangle_N \\ |j_2\rangle_1 & |j_2\rangle_2 & \dots & |j_2\rangle_N \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ |j_N\rangle_1 & |j_N\rangle_2 & \dots & |j_N\rangle_N \end{vmatrix}. \quad (2.12)$$

Wenn zwei gleiche Fermionen dasselbe Orbital besetzen (zum Beispiel $j_1 = j_2$), dann werden zwei Zeilen identisch und die Determinante ist gleich null. Diese Beobachtung ist das sogenannte Pauli-Prinzip, welches besagt, dass zwei identische Fermionen nicht denselben Einteilchen-Zustand besetzen können.

Für die Besetzungszahldarstellung bedeutet dies, dass bei einem Zustand $|\Psi_{\{j\}}\rangle^- = |n_1 n_2 \dots\rangle$ für die Besetzungszahlen $n_1, n_2, \dots, n_N \in \{0, 1\}$ gilt. Bei Bosonen ergibt sich eine andere Normierung für die Zustände:

$$|n_1 n_2 \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} \hat{\Lambda}_{1\dots N}^+ |\Psi_{\{j\}}\rangle. \quad (2.13)$$

Für Fermionen und Bosonen kann die Gesamtteilchenzahl n_{ges} eines Zustandes aus der Summe über alle Besetzungszahlen gewonnen werden.

$$n_{ges} = \sum_{j=1}^N n_j \quad (2.14)$$

Operatoren in zweiter Quantisierung

Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren haben folgende Definition beim Anwenden auf einen Besetzungszustand von Bosonen

$$\hat{c}_k^\dagger |\dots, n_k, \dots\rangle = \sqrt{n_k + 1} |\dots, n_k + 1, \dots\rangle, \quad (2.15)$$

$$\hat{c}_k |\dots, n_k, \dots\rangle = \sqrt{n_k} |\dots, n_k - 1, \dots\rangle. \quad (2.16)$$

Dabei ist \hat{c}_k^\dagger der Erzeugungsoperator und \hat{c}_k der Vernichtungsoperator. Für Fermionen muss die Antisymmetrie der Wellenfunktion, sowie das Pauli-Prinzip mit beachtet werden. Die daraus resultierenden Operatoren besitzen folgende Form beim Anwenden:

$$\hat{c}_k^\dagger |\dots, n_k, \dots\rangle = (1 - n_k) (-1)^{\alpha_k} |\dots, n_k + 1, \dots\rangle, \quad (2.17)$$

$$\hat{c}_k |\dots, n_k, \dots\rangle = n_k (-1)^{\alpha_k} |\dots, n_k - 1, \dots\rangle. \quad (2.18)$$

Wobei $\alpha_k = \sum_{l < k} n_l$ die Antisymmetrie gewährleistet und der Teil $(1 - n_k)$ das Pauli-Prinzip darstellt, sodass beim Anwenden des Erzeugungsoperators auf einen schon besetzten Zustand die Wellenfunktion verschwindet.

Für die fermionischen und bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren gelten folgende Kommutatorrelationen, wobei \mp den Kommutator bei Bosonen und Antikommutator bei Fermionen darstellt, mit dem Antikommutator $[\hat{A}, \hat{B}]_{\mp} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$:

$$[\hat{c}_i, \hat{c}_j]_{\mp} = 0, \quad [\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_j^\dagger]_{\mp} = 0, \quad (2.19)$$

$$[\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger]_{\mp} = \delta_{i,j}. \quad (2.20)$$

Wobei (2.19) und (2.20) für alle i und j gelten. Ein wichtiger Operator ist der Teilchenzahloperator \hat{n}_i , welcher die Besetzung auf einem Platz i bestimmt.

$$\hat{n}_i := \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i \quad (2.21)$$

Allgemein können alle Operatoren in zweiter Quantisierung durch die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausgedrückt werden. Einteilchen-Operatoren besitzen dabei folgende Form:

$$\hat{A}_{(1)} = \sum_{i,j} a_{ij} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j. \quad (2.22)$$

Dabei stellt der Index mit (1) dar, dass es sich um einen Einteilchen-Operator handelt. Der Term a_{ij} ist das Matrixelement, welches aus Zuständen eines vollständigen Orthonormal-Systems (VONS) gebildet wird

$$\langle i | \hat{a} | j \rangle = a_{ij} \quad (2.23)$$

Zweiteilchen-Operatoren besitzen eine ähnliche Form und können dargestellt werden als

$$\hat{A}_{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} a_{ijkl} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_l \hat{c}_k, \quad (2.24)$$

wobei a_{ijkl} die Matrixelemente von \hat{a} sind und aus den Produktzuständen $|k, l\rangle = |k\rangle |l\rangle$ und $\langle i, j| = \langle i| \langle j|$ gebildet werden.

$$\langle i, j | \hat{a} | k, l \rangle = a_{ijkl} \quad (2.25)$$

Besonders relevant ist dabei der allgemeine Hamiltonoperator in zweiter Quantisierung, welcher aus der kinetischen und potentiellen Energie sowie einem Wechselwirkungsterm besteht.

$$\hat{H}(t) = \underbrace{\sum_{i,j} h_{ij}^0 \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j}_{\hat{H}^{(0)}} + \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{i,j,k,l} \omega_{ijkl} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_l \hat{c}_k}_{\hat{E}_{int}} + \underbrace{\sum_{i,j} f_{ij}(t) \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j}_{\hat{F}(t)} \quad (2.26)$$

Dabei ist $\hat{H}^{(0)}$ der Einteilchen-Hamiltonoperator, \hat{E}_{int} der Wechselwirkungsoperator zwischen den Teilchen und $\hat{F}(t)$ der Operator für die potentielle Energie, beispielsweise bei äußerer Anregung durch elektromagnetische Felder.

2.2 Hubbard-Modell

Das Hubbard-Modell, welches unabhängig von Gutzwiller, Hubbard und Kanamori [8, 9, 10] eingeführt wurde, vereinfacht den allgemeinen Hamiltonoperator der zweiten Quantisierung, wodurch die benötigte Zeit bei Computersimulation wesentlich verkürzt wird. Das Prinzip des Hubbard-Modells besteht darin, dass sich die Teilchen auf festen Gitterplätzen befinden. Befinden sich nun zwei Teilchen am selben Gitterplatz, so wirkt zwischen diesen Teilchen aufgrund der Coulomb-Abstoßung eine Wechselwirkungsenergie U , ansonsten findet aber keine Wechselwirkung zwischen anderen Gitterplätzen statt. Weiter können die Teilchen nur von ihrem Gitterplatz zu benachbarten springen, was durch die Sprungamplitude J dargestellt wird, welche die kinetische Energie beim Wechsel des Gitterpunkts beinhaltet. Abbildung (1) zeigt schematisch das Prinzip des Hubbard-Modells. Für mehr Informationen zum Hubbard-Modell siehe [2, 11, 12].

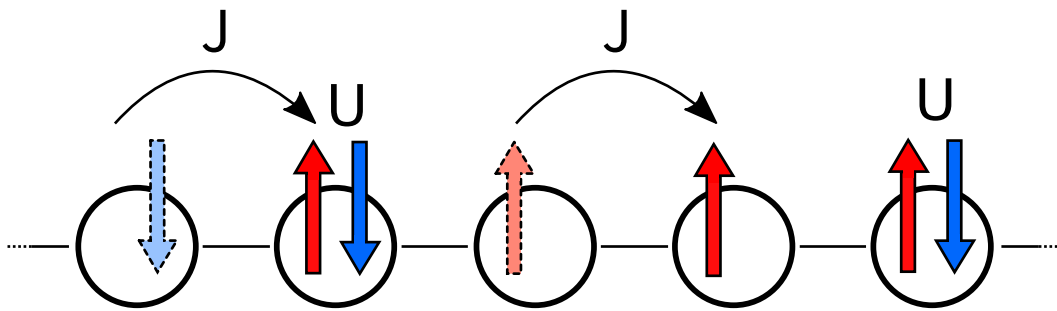


Abbildung 1: Schematische Abbildung des Hubbard-Modells. Für zwei Elektronen mit unterschiedlichen Spins auf einem Gitterplatz wirkt die Wechselwirkungsenergie U . Beim Übergang von einem Elektron auf einen angrenzenden Gitterplatz (nur nächste Nachbarn) wirkt die Sprungamplitude J .

Hubbard-Hamiltonoperator

Der vereinfachte Hubbard-Hamiltonoperator besitzt die Form

$$\hat{H}(t) = -J \sum_{\langle i,j \rangle \alpha} \hat{c}_{i,\alpha}^\dagger \hat{c}_{j,\alpha} + U(t) \sum_i \hat{n}_i^\uparrow \hat{n}_i^\downarrow + \sum_i f_i(t) (\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} + \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}). \quad (2.27)$$

Hierbei ist J die Sprungamplitude und U das Wechselwirkungspotential zwischen den Teilchen auf demselben Gitterpunkt. Im ersten Summanden, der kinetischen Energie, bezeichnet $\langle i, j \rangle$, dass nur über jene i und j aufsummiert wird, welche nächste Nachbarn sind. Das griechische α steht für die Spinrichtung. Der mittlere Summand entspricht der Wechselwirkungsenergie und der hintere Summand stellt die potentielle Energie auf jedem Gitterplatz mit der Amplitude $f_i(t)$ dar. Diese wirkt zum Beispiel bei äußeren Anregungen, wie elektrischen und magnetischen Felder.

Der Hubbard-Dimer

Auch wenn das Hubbard-Modell ein stark vereinfachtes Modell ist, sind analytische Lösungen für dieses nur in speziellen Fällen möglich. In 1D Systemen können beispielsweise mithilfe der *density-matrix-renormalization-group* Methode (DMRG) exakte numerische Lösungen berechnet werden [13]. Für höher dimensionale Systeme kann eine exakte Rechnung über Quanten-Monte-Carlo-Methoden [14] oder über die Methode der *configuration interaction* (CI) durchgeführt werden [15]. Dabei sind diese jedoch auf sehr kleine Systeme beschränkt.

Ein einfaches System, welches tatsächlich analytisch gelöst werden kann, ist der sogenannte *Hubbard-Dimer*, welcher aus zwei Gitterpunkten mit halber Füllung besteht. Das heißt, es gibt zwei Elektronen mit unterschiedlicher Spinkomponente. Dieses einfache System kann verwendet werden, um Effekte im Hubbard-Modell, wie die Entwicklung eines antiferromagnetischen Zustandes für große U (mehr dazu siehe Kapitel (4.4)), sehr leicht zu erklären. Folglich ist es sinnvoll das einfachste Modell, den Hubbard-Dimer, analytisch zu untersuchen. Der folgende Abschnitt wurde J.-P. Joost [16] nachempfunden.

Bei halber Füllung gibt es vier verschiedene quantenmechanische Zustände, die im Folgenden in der Besetzungsdarstellung durch Spins präsentiert werden (es werden äußere Anregungen vernachlässigt, also $f_i(t) = 0$). Ein Punkt stellt einen leeren Gitterplatz dar.

$$|\uparrow, \downarrow\rangle = c_{1,\uparrow}^\dagger c_{2,\downarrow}^\dagger |.,.\rangle \quad (2.28)$$

$$|\downarrow, \uparrow\rangle = c_{2,\uparrow}^\dagger c_{1,\downarrow}^\dagger |.,.\rangle \quad (2.29)$$

$$|\uparrow\downarrow, .\rangle = c_{1,\uparrow}^\dagger c_{1,\downarrow}^\dagger |.,.\rangle \quad (2.30)$$

$$|., \uparrow\downarrow\rangle = c_{2,\uparrow}^\dagger c_{2,\downarrow}^\dagger |.,.\rangle \quad (2.31)$$

Aus diesen Zuständen kann der Hubbard-Hamiltonoperator in Matrixdarstellung geschrieben werden als

$$H = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -J & -J \\ 0 & 0 & -J & -J \\ -J & -J & U & 0 \\ -J & -J & 0 & U \end{pmatrix}. \quad (2.32)$$

Durch Diagonalisierung der Matrix können die Energie-Eigenwerte bestimmt werden [16]:

$$E^0 = 0, \quad (2.33)$$

$$E^U = U, \quad (2.34)$$

$$E^\pm = \frac{U}{2} \pm \sqrt{\frac{U^2}{4} + 4J^2}. \quad (2.35)$$

Grafik (2) zeigt die vier Energieeigenwerte aufgetragen gegen U für ein festes J mit $J = U$. Deutlich zu erkennen ist, wie sich die E^- Kurve für große U immer mehr der E^0 Kurve

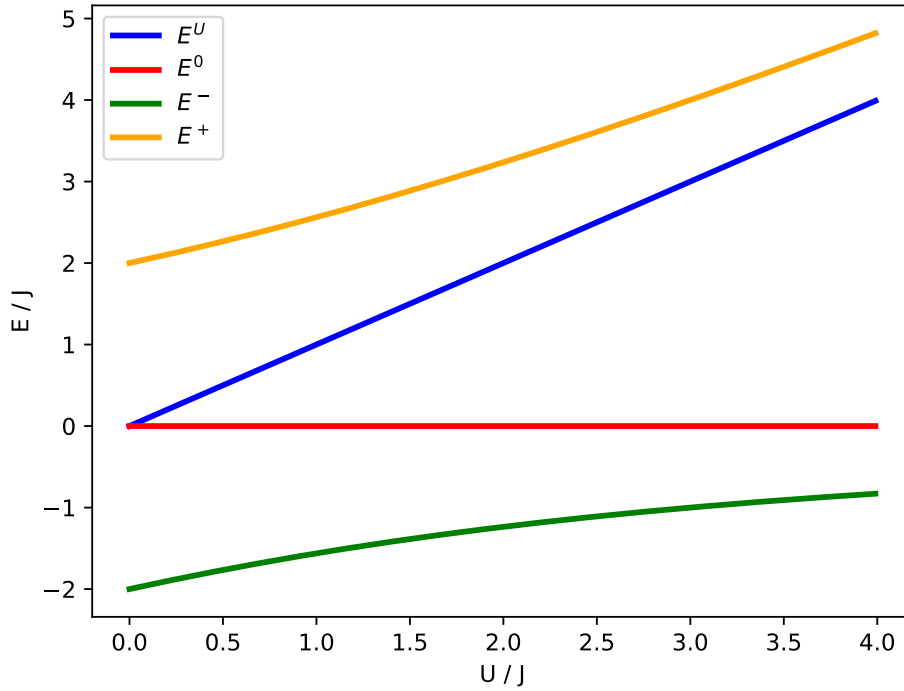


Abbildung 2: Darstellung der vier Energieeigenwerte, aufgetragen gegen U in Einheiten von J . Für $U \rightarrow \infty$ nähert sich E^- der Kurve von E^0 an, sowie E^+ an E^U .

annähert, genauso wie E^+ an E^U .

Gleichzeitig ergeben sich die Eigenfunktionen zu [16]

$$\Psi^\pm = \left(2 + \frac{1}{2} \left(\frac{E^\pm}{J} \right)^2 \right)^{-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \mp 1 \\ \mp 1 \\ \frac{E^\pm}{2J} \\ \frac{E^\pm}{2J} \end{pmatrix}, \quad (2.36)$$

$$\Psi^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.37)$$

$$\Psi^U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.38)$$

2.3 Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen

Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen haben sich als eine sehr effektive Möglichkeit gezeigt, um große (korrelierte) Vielteilchensysteme zu simulieren. NEGF Simulationen erreichen dabei eine sehr hohe Genauigkeit, was im Vergleich mit DMRG Rechnungen gezeigt werden konnte [17]. Für eine allgemeine Einführung zum Thema der NEGF sei auf [18] verwiesen.

Im Folgenden werden Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen für Fermionen betrachtet. Um die Gleichungen zu vereinfachen, wird eine Notation mit Multiindizes verwendet, bei welcher ein Index den Ort und Spin kennzeichnet, also $i \rightarrow \{i, \sigma\}$. Zunächst wird die Einteilchen-Greenfunktion betrachtet, welche über komplexe Zeitargumente z auf der sogenannten *Keldysh-Kontur* \mathcal{C} , welche 1964 von Keldysh eingeführt wurde [19], definiert ist.

$$G_{ij}(z, z') = \frac{1}{i\hbar} \langle \mathcal{T}_{\mathcal{C}} \{ \hat{c}_i(z) \hat{c}_j^\dagger(z') \} \rangle \quad (2.39)$$

Dabei ist $\mathcal{T}_{\mathcal{C}}$ der sogenannte Zeitentwicklungsoperator, welcher die Operatoren nach der zeitlichen Reihenfolge auf der Keldysh-Kontur sortiert. Abbildung (3) zeigt die Keldysh-Kontur auf der komplexen Zeitachse für thermodynamische Gleichgewichtskorrelationen.

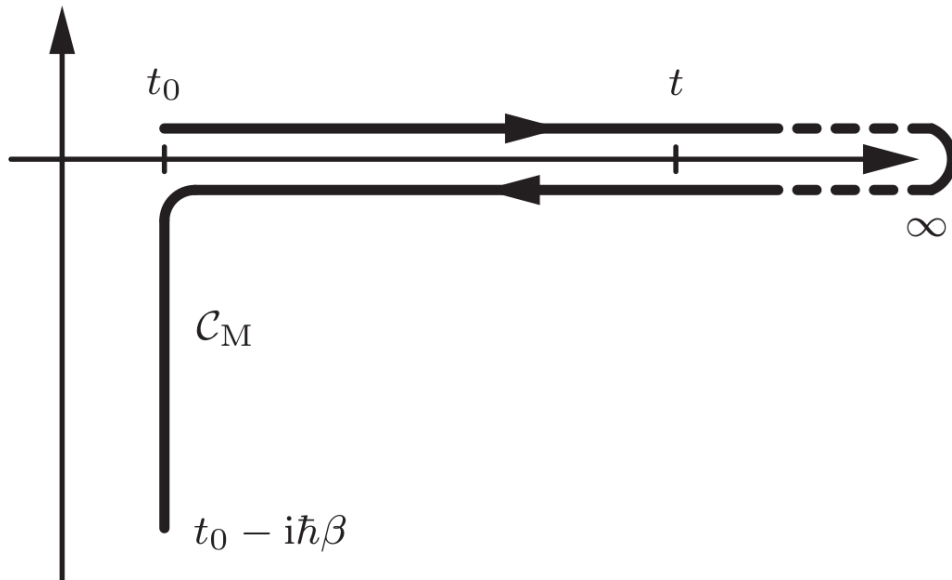


Abbildung 3: Zeichnung der Keldysh-Kontur abgebildet auf der komplexen Zeitachse. Die Kontur besitzt einen imaginären Zweig, welcher thermodynamische Gleichgewichts Korrelationen berücksichtigt. Abbildung entnommen aus [4]

Die Einteilchen-Greenfunktion G kann durch die sogenannte *lesser Greenfunktion* $G^<$ und

die *greater Greenfunktionen* $G^>$ ausgedrückt werden:

$$G_{ij}(z, z') = \Theta_C(z - z')G_{ij}^>(z, z') + \Theta_C(z' - z)G_{ij}^<(z, z'). \quad (2.40)$$

Dabei ist $\Theta_C(z - z')$ definiert als die Heaviside-Funktion¹ auf der Keldysh-Kontur, bedeutet sie entspricht eins, falls z später auf der Kontur liegt als z' . Die greater und lesser Greenfunktion sind definiert als

$$G_{ij}^>(z, z') = \frac{i}{\hbar} \langle \hat{c}_i(z) \hat{c}_j^\dagger(z') \rangle, \quad (2.41)$$

$$G_{ij}^<(z, z') = -\frac{i}{\hbar} \langle \hat{c}_j^\dagger(z') \hat{c}_i(z) \rangle. \quad (2.42)$$

Dabei beschreibt $G^>$ die Propagation eines hinzugefügten Teilchens und $G^<$ die Propagation eines entfernten Teilchens.

Um die Bewegungsgleichung der NEGF abzuleiten, wird (2.40) nach dem komplexen Zeitargument z abgeleitet [18]. Es gilt

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} G_{ij}(z, z') &= \delta_C(z - z') \{ G_{ij}^>(z, z') - G_{ij}^<(z, z') \} + \Theta_C(z - z') \frac{\partial}{\partial z} G_{ij}^>(z, z') + \\ &+ \Theta_C(z' - z) \frac{\partial}{\partial z} G_{ij}^<(z, z'), \end{aligned} \quad (2.43)$$

wobei δ_C durch die Ableitung der Heaviside-Funktion entsteht. Durch das Kontur-Kronecker kann der vordere Teil nur bei gleichem z ausgewertet werden, sodass die Relation

$$G_{ij}^>(z, z) - G_{ij}^<(z, z) = -\frac{i}{\hbar} \delta_{ij} \quad (2.44)$$

in (2.43) verwendet werden kann. Es folgt

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} G_{ij}(z, z') &= -\frac{i}{\hbar} \delta_C(z - z') \delta_{ij} - \frac{i}{\hbar} \Theta_C(z - z') \left\langle \frac{\partial}{\partial z} \hat{c}_i(z) \hat{c}_j^\dagger(z') \right\rangle + \\ &+ \frac{i}{\hbar} \Theta_C(z' - z) \left\langle \hat{c}_j^\dagger(z') \frac{\partial}{\partial z} \hat{c}_i(z) \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.45)$$

Die Dynamik der Vernichtungsoperatoren ist dabei durch die heisenbergsche Bewegungsgleichung (2.4) gegeben.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \hat{c}_i(z) = [\hat{c}_i(z), \hat{H}(z)]_- \quad (2.46)$$

¹Die Heaviside-Funktion ist definiert als $\Theta : \mathbb{R} \rightarrow \{0, 1\}$; $x \mapsto \begin{cases} 0 & : x < 0 \\ 1 & : x \geq 0 \end{cases}$.

Für die zeitliche Ableitung des Vernichtungsoperators ergibt sich

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \hat{c}_i(z) = \sum_k h_{ik}(z) \hat{c}_k(z) + \sum_{slk} \int_{\mathcal{C}} \omega_{iskl}(z - \bar{z}) \hat{c}_s^\dagger(\bar{z}) \hat{c}_l(\bar{z}) \hat{c}_k(z). \quad (2.47)$$

Dabei ist $h_{ik} = \langle i | \hat{h} | k \rangle$ und $\langle ij | \hat{w} | kl \rangle$. Gleichung (2.47) kann in die Bewegungsgleichung (2.45) eingesetzt werden.

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial z} G_{ij}(z, z') &= \delta_{\mathcal{C}}(z - z') \delta_{ij} - \frac{i}{\hbar} \sum_k h_{ik}(z) \left\{ \Theta_{\mathcal{C}}(z - z') \langle \hat{c}_k(z) \hat{c}_j^\dagger(z') \rangle - \Theta_{\mathcal{C}}(z' - z) \langle \hat{c}_j^\dagger(z') \hat{c}_k(z) \rangle \right\} - \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \sum_{slk} \int_{\mathcal{C}} d\bar{z} \omega_{iskl}(z - \bar{z}) \left\{ \Theta_{\mathcal{C}}(z - z') \langle \hat{c}_s^\dagger(\bar{z}) \hat{c}_l(\bar{z}) \hat{c}_k(z) \hat{c}_j^\dagger(z') \rangle - \right. \\ &\quad \left. - \Theta_{\mathcal{C}}(z' - z) \langle \hat{c}_j^\dagger(z') \hat{c}_s^\dagger(\bar{z}) \hat{c}_l(\bar{z}) \hat{c}_k(z) \rangle \right\} \end{aligned} \quad (2.48)$$

Als Nächstes wird die sogenannte Zweiteilchen-Greenfunktion definiert [18]:

$$G_{ijkl}^{(2)}(z, \bar{z}, z', \bar{z}') := \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \langle \mathcal{T}_{\mathcal{C}} \hat{c}_i(z) \hat{c}_j(\bar{z}) \hat{c}_l^\dagger(\bar{z}') \hat{c}_k^\dagger(z') \rangle. \quad (2.49)$$

Dabei ist $G^{(2)}$ durch den Erwartungswert von vier Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren definiert. $G^{(2)}$ beschreibt deshalb die "Partikel-Loch" Wechselwirkung. Mithilfe der Zweiteilchen-Greenfunktion kann (2.48) vereinfacht werden zu

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial z} G_{ij}(z, z') &= \delta_{\mathcal{C}}(z - z') \delta_{ij} + \sum_k h_{ik}(z) G_{kj}(z, z') - \\ &\quad - i\hbar \sum_{slk} \int_{\mathcal{C}} d\bar{z} \omega_{iskl}(z - \bar{z}) G_{lkjs}^{(2)}(z, \bar{z}, z', \bar{z}^+). \end{aligned} \quad (2.50)$$

Dabei ist \bar{z}^+ infinitesimal größer als \bar{z} . Die Zweiteilchen-Greenfunktion kann aufgeteilt werden in einen sogenannten Hartree-Fock-Anteil (dabei ist H der Hartree und F der Fock Teil) und in einen korrelierten Anteil [4]:

$$G_{ijkl}^{(2)}(z, \bar{z}, z', \bar{z}') = G_{ijkl}^{(2),H}(z, \bar{z}, z', \bar{z}') - G_{ijkl}^{(2),F}(z, \bar{z}, z', \bar{z}') + G_{ijkl}^{(2),\text{corr}}(z, \bar{z}, z', \bar{z}') \quad (2.51)$$

Die Hartree- und Fock-Anteile können durch

$$G_{ijkl}^{(2),H}(z, \bar{z}, z', \bar{z}') = G_{ik}(z, z') G_{jl}(\bar{z}, \bar{z}'), \quad (2.52)$$

$$G_{ijkl}^{(2),F}(z, \bar{z}, z', \bar{z}') = G_{il}(z, \bar{z}') G_{jk}(\bar{z}, z') \quad (2.53)$$

berechnet werden.

Unter Verwendung von (2.52) und (2.53) kann Gleichung (2.50) noch weiter vereinfacht und die abschließenden Bewegungsgleichungen aufgestellt werden.

$$\sum_k \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \delta_{ik} - h_{ik}^{\text{HF}}(z) \right\} G_{kj}(z, z') = \delta_{\mathcal{C}}(z - z') \delta_{ij} - i\hbar \sum_{skl} \int_{\mathcal{C}} d\bar{z} \omega_{iskl}(z - \bar{z}) G_{lkjs}^{(2),\text{corr}}(z, \bar{z}, z', \bar{z}^+), \quad (2.54)$$

$$\sum_k G_{ik}(z, z') \left\{ -i\hbar \frac{\partial}{\partial z'} \delta_{kj} - h_{kj}^{\text{HF}}(z') \right\} = \delta_{\mathcal{C}}(z - z') \delta_{ij} - i\hbar \sum_{skl} \int_{\mathcal{C}} d\bar{z} G_{lik}^{(2),\text{corr}}(z, \bar{z}, z', \bar{z}^+) \omega_{ksjl}(z' - \bar{z}). \quad (2.55)$$

Gleichungen (2.54) und (2.55) sind die Bewegungsgleichungen der Einteilchen-NEGF, die sogenannten *Keldysh-Kadanoff-Baym* Gleichungen (KBE) [20]. Die Gleichungen sind nicht geschlossen, denn zur Auswertung muss die Zweiteilchen-Greenfunktion $G^{(2)}$ bekannt sein. Es zeigt sich im Allgemeinen, dass für die Bewegungsgleichung einer Greenfunktion $G^{(2)}$ mit ($n \geq 2$) Informationen über $G^{(n-1)}$ und $G^{(n+1)}$ vorliegen müssen [18]. Daraus folgt, dass an die Bewegungsgleichung für die Zweiteilchen-Greenfunktion die der Dreiteilchen-Greenfunktion koppelt und an diese die Vierteilchen und so weiter. Diese Hierarchie unendlich gekoppelter Differenzialgleichungen wird *Martin-Schwinger* Hierarchie genannt. Für den Fall $t = t'$ mit reellen Zeitargumenten wandelt sich die Hierarchie für die Bewegungsgleichung von $G^<$ in die *Bogolyubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon* (BBGKY) Hierarchie um. Mehr zur BBGKY-Hierarchie siehe [21]. Um das Problem der unendlichen Differenzialgleichungen zu beheben, wird die Hierarchie entkoppelt, indem die Zweiteilchen-Greenfunktion durch die Einteilchen-Greenfunktion ausgedrückt wird. Dies kann jedoch nur erreicht werden, indem über eine unendliche Summe von Beiträgen summiert wird. Folglich müssen Approximationen betrachtet werden. Dazu wird die sogenannte Selbstenergie Σ eingeführt, mit welcher sich der hintere Term der Gleichung (2.55) schreiben lässt als

$$-i\hbar \sum_{skl} \int_{\mathcal{C}} d\bar{z} \omega_{ksjl}(z' - \bar{z}) G_{lik}^{(2),\text{corr}}(z, \bar{z}, z', \bar{z}^+) = \sum_k \int_{\mathcal{C}} d\bar{z} \Sigma_{ik}(z, \bar{z}) G_{kj}(\bar{z}, z'). \quad (2.56)$$

Mit der Selbstenergie sind die KBE weiterhin exakt. Für Σ können nun verschiedene Approximationen betrachtet werden, die unterschiedliche Beiträge beinhalten und unterschiedlich genau sind. Die verschiedenen Näherungen werden im Kapitel (2.3.2) erläutert. Der Übersicht halber wird im Folgenden zunächst die *Second-order Born Approximation* (SOA) verwendet, welche die einfachste Näherung ist, die Korrelationseffekte berücksichtigt. Die Selbstenergie der SOA Näherung ist in (2.59) für reelle Zeitargumente dargestellt.

2.3.1 Generalisierter Kadanoff-Baym Ansatz

Zur Beschleunigung der Computersimulationen von NEGF Systemen kann der generalisierte Kadanoff-Baym Ansatz (GKBA) verwendet werden, welcher die Propagation auf die Zeitdiagonale beschränkt [22]. Die Nicht-Diagonal-Elemente können dann aus der Dichtematrix zurückgewonnen werden.

Es wird sich also auf die Realteil-Komponenten der Diagonalen von $G^{\lessgtr}(t, t')$ bezogen, bedeutet $G_{ij}^{\lessgtr}(t) := G_{ij}^{\lessgtr}(t, t)$. Die Bewegungsgleichung für die Einteilchen-Greenfunktion im GKBA Schema besitzt dabei die Form [4]

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{ij}^{\lessgtr}(t) - [h^{\text{HF}}, G^{\lessgtr}]_{ij}(t) = [I + I^\dagger]_{ij}(t) \quad (2.57)$$

mit dem sogenannten collision Integral $I(t) = \mathcal{I}(t) + \mathcal{I}^{\text{IC}}(t)$. Dieses besteht dabei aus einem dynamischen Anteil $\mathcal{I}(t)$ und einem anfänglichen Korrelations-Anteil (initial correlation) $\mathcal{I}^{\text{IC}}(t)$, welcher die Paarkorrelationen zum Anfangszeitpunkt t_0 beschreibt. In dieser Arbeit wird $\mathcal{I}^{\text{IC}}(t)$ über die adiabtic switching Methode berechnet, mehr dazu folgt in Abschnitt (4.1). Das dynamische collision Integral beschreibt dabei die zeitlich aufbauenden Korrelationen und ist definiert als

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{ij}(t) &= \pm i\hbar \sum_{klp} \omega_{iklp}(t) \mathcal{G}_{lpjk}(t) \\ &= \sum_k \int_{t_0}^t d\bar{t} \left[\Sigma_{ik}^{\lessgtr}(t, \bar{t}) G_{kj}^{\lessgtr}(\bar{t}, t) - \Sigma_{ik}^{\lessgtr}(t, \bar{t}) G_{kj}^{\lessgtr}(\bar{t}, t) \right]. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Zunächst wird der Fall für die einfachste Näherung, nämlich die Second-order Born Approximation (SOA) betrachtet, bevor im G1-G2 Schema (Abschnitt (2.3.2)) weitere Approximationen erklärt werden. Die Selbstenergie für SOA ist definiert als [23]

$$\Sigma_{ij}^{\lessgtr}(t, t') = \pm (i\hbar)^2 \sum_{klpqrs} \omega_{iklp}(t) \omega_{qrjs}^\pm(t') G_{lq}^{\lessgtr}(t, t') G_{pr}^{\lessgtr}(t, t') G_{sk}^{\lessgtr}(t', t). \quad (2.59)$$

Eingesetzt in Gleichung (2.58) ergibt sich für das collision Integral

$$\mathcal{I}_{ij}(t) = \pm (i\hbar)^2 \sum_{klpqrsu} \omega_{iklp}(t) \int_{t_0}^t d\bar{t} \omega_{qrsu}^\pm(\bar{t}) \left[\mathcal{G}_{ljqs}^{\text{F},>}(t, \bar{t}) \mathcal{G}_{urkp}^{\text{F},<}(\bar{t}, t) - \mathcal{G}_{ljqs}^{\text{F},<}(t, \bar{t}) \mathcal{G}_{urkp}^{\text{F},>}(\bar{t}, t) \right]. \quad (2.60)$$

Hieraus kann schnell \mathcal{G} bestimmt werden:

$$\mathcal{G}_{ijkl}(t) = i\hbar \sum_{pqrs} \int_{t_0}^t d\bar{t} \omega_{pqrs}^\pm(\bar{t}) \left[\mathcal{G}_{ijpq}^{\text{H},>}(t, \bar{t}) \mathcal{G}_{rskl}^{\text{H},<}(\bar{t}, t) - \mathcal{G}_{ijpq}^{\text{H},<}(t, \bar{t}) \mathcal{G}_{rskl}^{\text{H},>}(\bar{t}, t) \right]. \quad (2.61)$$

Dabei sind $\mathcal{G}_{ijkl}^{\text{H},\gtrless}(t, t')$ und $\mathcal{G}_{ijkl}^{\text{F},\gtrless}(t, t')$ definiert als

$$\mathcal{G}_{ijkl}^{\text{H},\gtrless}(t, t') := G_{ik}^{\gtrless}(t, t')G_{jl}^{\gtrless}(t, t'), \quad \mathcal{G}_{ijkl}^{\text{F},\gtrless}(t, t') := G_{il}^{\gtrless}(t, t')G_{jk}^{\lessgtr}(t', t). \quad (2.62)$$

Die Nicht-Diagonal-Elemente können rekonstruiert werden aus [23]

$$G_{ij}^{\gtrless}(t, t') = i\hbar \sum_k \left[G_{ik}^R(t, t')G_{kj}^{\gtrless}(t') - G_{ik}^{\gtrless}(t)G_{kj}^A(t, t') \right]. \quad (2.63)$$

Dabei wurde die *retarded Greenfunktion* G^R und die *advanced Greenfunktion* G^A eingeführt, welche folgendermaßen definiert werden:

$$G_{ij}^R(t, t') := \Theta(t - t') \left[G_{ij}^>(t, t') - G_{ij}^<(t, t') \right], \quad G_{ij}^A(t, t') := -\Theta(t' - t) \left[G_{ij}^>(t, t') - G_{ij}^<(t, t') \right]. \quad (2.64)$$

Nun wird der Propagator \mathcal{U} eingeführt, welcher definiert ist als die Differenz zwischen der retarded und advanced Greenfunktion.

$$\mathcal{U}_{ij}(t, t') := G_{ij}^R(t, t') - G_{ij}^A(t, t') \quad (2.65)$$

Der Propagator hat in dem Hartree-Fock-GKBA (HF-GKBA) die Form eines Zeitentwicklungsoperators und kann in Gleichung (2.63) wiedergefunden werden [4]. Vom HF-GKBA wird gesprochen, wenn G^R und G^A in der HF-Näherung berechnet werden. Für die Nicht-Zeitdiagonalen-Elemente ergibt sich

$$G_{ij}^{\gtrless}(t' \leq t) = i\hbar \sum_k G_{ik}^{\gtrless}(t')\mathcal{U}_{kj}(t', t), \quad G_{ij}^{\gtrless}(t \geq t') = i\hbar \sum_k \mathcal{U}_{ik}(t, t')G_{kj}^{\gtrless}(t'). \quad (2.66)$$

Mit den beiden Ausdrücken kann (2.61) umformuliert werden zu

$$\mathcal{G}_{ijkl}(t) = (i\hbar)^3 \sum_{pqrs} \int_{t_0}^t dt' \mathcal{U}_{ijpq}^{(2)}(t, t') \Psi_{pqrs}^{\pm}(t') \mathcal{U}_{rskl}^{(2)}(t', t). \quad (2.67)$$

Wobei Ψ der Zweiteilchen-Source-Term ist mit

$$\Psi_{ijkl}^{\pm}(t) = \frac{1}{(i\hbar)^2} \sum_{pqrs} \omega_{pqrs}^{\pm}(t) \Phi_{pqkl}^{ijrs}(t). \quad (2.68)$$

Des Weiteren gelten noch die folgenden Relationen:

$$\mathcal{U}_{ijkl}^{(2)}(t, t') = \mathcal{U}_{ik}(t, t')\mathcal{U}_{jl}(t, t'), \quad (2.69)$$

$$\Phi_{pqrs}^{ijkl}(t) = \Phi_{pqrs}^{ijkl,>}(t) - \Phi_{pqrs}^{ijkl,<}(t), \quad (2.70)$$

$$\Phi_{pqrs}^{ijkl,\gtrless}(t) = (i\hbar)^4 \mathcal{G}_{ijpq}^{\text{H},\gtrless}(t) \mathcal{G}_{klrs}^{\text{H},\lessgtr}(t). \quad (2.71)$$

Aus diesen wichtigen Gleichungen kann im nächsten Kapitel das G1-G2 Schema abgeleitet werden.

2.3.2 G1-G2 Schema

Das G1-G2 Schema ist eine Umformulierung des HF-GKBA, um eine lineare Zeitskalierung zu erreichen. Dabei werden die Gleichungen lediglich umformuliert, ohne weitere Näherungen zu verwenden. Hierzu muss das Integral in der Zweiteilchen-Greenfunktion eliminiert werden. Eine ausführliche Ableitung des Schemas für verschiedene Näherungen ist in [4] dargestellt.

Im Folgenden werden die Gleichungen für SOA hergeleitet und die sogenannte *dynamically-screened-ladder* (DSL) Approximation noch einmal dargestellt, welche starke Kopplung und Screening-Effekte mitberücksichtigt.

Zunächst wird die Gleichung (2.67) differenziert, um das Integral zu eliminieren.

$$\frac{d}{dt}\mathcal{G}_{ijkl}(t) = \left[\frac{d}{dt}\mathcal{G}_{ijkl}(t) \right]_f + \left[\frac{d}{dt}\mathcal{G}_{ijkl}(t) \right]_{\mathcal{U}^{(2)}} \quad (2.72)$$

Die erste Klammer kommt durch die Integrationsgrenzen zustande und die zweite durch die Zeitabhängigkeit von $\mathcal{U}^{(2)}$. Die Integralkomponente ergibt sich zu

$$\left[\frac{d}{dt}\mathcal{G}_{ijkl}(t) \right]_f = (i\hbar)^3 \sum_{pqrs} \mathcal{U}_{ijpq}^{(2)}(t, t) \Psi_{pqrs}^{\pm}(t) \mathcal{U}_{rskl}^{(2)}(t, t). \quad (2.73)$$

Aufgrund der Beziehung $\mathcal{U}_{ijkl}^{(2)}(t, t) = \frac{1}{(i\hbar)^2} \delta_{ik} \delta_{jl}$ durch Gleichung (2.64) und (2.69) kann die obere Gleichung vereinfacht werden zu

$$\left[\frac{d}{dt}\mathcal{G}_{ijkl}(t) \right]_f = \frac{1}{i\hbar} \Psi_{ijkl}^{\pm}(t). \quad (2.74)$$

Die hintere Klammer aus Gleichung (2.72) wird zu

$$\left[\frac{d}{dt}\mathcal{G}_{ijkl}(t) \right]_{\mathcal{U}^{(2)}} = (i\hbar)^3 \sum_{pqrs} \int_{t_0}^t d\bar{t} \Psi_{pqrs}^{\pm}(\bar{t}) \left\{ \left[\frac{d}{dt}\mathcal{U}_{ijpq}^{(2)}(t, \bar{t}) \right] \mathcal{U}_{rskl}^{(2)}(\bar{t}, t) + \mathcal{U}_{ijpq}^{(2)}(t, \bar{t}) \left[\frac{d}{dt}\mathcal{U}_{rskl}^{(2)}(\bar{t}, t) \right] \right\}. \quad (2.75)$$

Die Ableitung der Zweiteilchen-Propagatoren kann mithilfe der Produktregel ausgedrückt werden durch die Ableitung der Einteilchen-Propagatoren, sodass

$$\frac{d}{dt} \left[\mathcal{U}_{ijkl}^{(2)}(t, \bar{t}) \right] = \frac{d}{dt} \left[\mathcal{U}_{ik}(t, \bar{t}) \right] \mathcal{U}_{jl}(t, \bar{t}) + \mathcal{U}_{ik}(t, \bar{t}) \frac{d}{dt} \left[\mathcal{U}_{jl}(t, \bar{t}) \right] \quad (2.76)$$

gilt. Aus der Definition des Einteilchen-Propagators über die retarded und advanced Greenfunktion kann aus der Bewegungsgleichung dieser Komponenten ein Ausdruck für

(2.76) gefunden werden [4]:

$$\frac{d}{dt} [\mathcal{U}_{ijkl}^{(2)}(t, \bar{t})] = \frac{1}{i\hbar} \sum_{pq} h_{ijpq}^{(2),\text{HF}}(t) \mathcal{U}_{pqkl}^{(2)}(t, \bar{t}). \quad (2.77)$$

Analog gilt für vertauschte Zeitargumente

$$\frac{d}{dt} [\mathcal{U}_{ijkl}^{(2)}(\bar{t}, t)] = -\frac{1}{i\hbar} \sum_{pq} \mathcal{U}_{ijpq}^{(2)}(\bar{t}, t) h_{pqkl}^{(2),\text{HF}}(t). \quad (2.78)$$

Aus den Gleichungen (2.77) und (2.78) ergibt sich dann eingesetzt in (2.75)

$$\begin{aligned} \left[\frac{d}{dt} \mathcal{G}_{ijkl}(t) \right]_{\mathcal{U}^{(2)}} &= (i\hbar)^3 \sum_{pqrs} \int_{t_0}^t d\bar{t} \left\{ \left[\frac{1}{i\hbar} \sum_{uv} h_{ijuv}^{(2),\text{HF}}(t) \mathcal{U}_{uvpq}^{(2)}(t, \bar{t}) \right] \Psi_{pqrs}^{\pm}(\bar{t}) \mathcal{U}_{rskl}^{(2)}(\bar{t}, t) \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{U}_{ijpq}^{(2)}(t, \bar{t}) \Psi_{pqrs}^{\pm}(\bar{t}) \left[-\frac{1}{i\hbar} \sum_{uv} \mathcal{U}_{rsuv}^{(2)}(\bar{t}, t) h_{uvkl}^{(2),\text{HF}}(t) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.79)$$

Diese Gleichung kann wiederum durch \mathcal{G} vereinfacht werden zu

$$\left[\frac{d}{dt} \mathcal{G}_{ijkl}(t) \right]_{\mathcal{U}^{(2)}} = \frac{1}{i\hbar} \sum_{pq} h_{ijpq}^{(2),\text{HF}}(t) \mathcal{G}_{pqkl}(t) - \frac{1}{i\hbar} \sum_{lf} \mathcal{G}_{ijpq}(t) h_{pqkl}^{(2),\text{HF}}(t). \quad (2.80)$$

Zusammengefasst kann aus Gleichung (2.80) und (2.74) die Bewegungsgleichung für die zeitdiagonale Zweiteilchen-Greenfunktion hergeleitet werden, welche in (2.83) dargestellt ist. Im Folgenden werden die wesentlichen Gleichungen des G1-G2 Schemas zusammengefasst.

Die Bewegungsgleichung der Einteilchen-Greenfunktion werden durch die Gleichungen

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_{ij}^{\leq}(t) = [h^{HF}, G^{\leq}]_{ij}(t) + [I + I^{\dagger}]_{ij}(t), \quad (2.81)$$

$$I_{ij}(t) = \pm i\hbar \sum_{klp} \omega_{iklp}(t) \mathcal{G}_{lpjk}(t) \quad (2.82)$$

beschrieben. Dabei koppelt das collision Integral an die zeitdiagonale Zweiteilchen-Greenfunktion, welche wiederum durch die Differenzialgleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{G}_{ijkl}(t) - [h^{(2),\text{HF}}, \mathcal{G}]_{ijkl}(t) = \Psi_{ijkl}^{\pm}. \quad (2.83)$$

berechnet werden kann. Der Kommutator für Zweiteilchen Größen ist dabei definiert als

$$[A, B]_{ijkl}(t) = \sum_{pq} [A_{ijpq}(t) B_{pqkl}(t) - B_{ijpq}(t) A_{pqkl}(t)]. \quad (2.84)$$

Diese gekoppelten Differenzialgleichungen besitzen den Vorteil, dass sie linear mit der Zeit skalieren und somit besonders für zeitlich längere Rechnungen numerisch vorteil-

haft sind, ohne dabei wesentliche Abweichungen von den GKBA Rechnungen aufzuweisen [1]. Gleichzeitig ist es damit leicht möglich Observablen zu berechnen, die vorher im normalen GKBA nur schwer oder gar unmöglich zu bestimmen waren. Die zeitdiagonale Zweiteilchen-Greenfunktion beinhaltet dabei die Informationen für alle Zweiteilchen-Observablen, wie beispielsweise die Paarverteilung, Doppelbesetzung und so weiter.

Um das Schema numerisch effizienter zu machen, werden die G1-G2 Gleichungen im Hubbard-Modell betrachtet. Der vereinfachte Hamiltonoperator des Hubbard-Modells gestaltet die Auswertung der Bewegungsgleichungen einfacher, sodass auch größere Systeme, aufgrund der kleineren Skalierung, untersucht werden können. Im Fermi-Hubbard-Modell hat der Paarwechselwirkungs-Tensor die Form

$$\omega_{ijkl}^{\alpha\beta\gamma\delta}(t) = U(t)\delta_{ij}\delta_{ik}\delta_{il}\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}(1 - \delta_{\alpha\beta}). \quad (2.85)$$

Dabei ist U die Wechselwirkungsenergie und die hintere Klammer gewährleistet das Pauli-Prinzip. Es ergibt sich für die Bewegungsgleichung der Einteilchen-Greenfunktion mit der Spin-Up Komponente

$$i\hbar G_{ij}^{<,\uparrow}(t) = [h^{\text{HF},\uparrow}, G^{<,\uparrow}]_{ij}(t) + [I + I^\dagger]_{ij}^\dagger(t), \quad (2.86)$$

$$I_{ij}^\dagger(t) = -i\hbar U(t)\mathcal{G}_{iji}^{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}(t). \quad (2.87)$$

Dieselbe Bewegungsgleichung kann für die Spin-down Komponente aufgestellt werden, wobei die Spins ausgetauscht werden, also $\uparrow \leftrightarrow \downarrow$. Die Zweiteilchen-Bewegungsgleichung ergibt sich zu:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{G}_{ijkl}^{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}(t) - [h_{\uparrow\downarrow}^{(2),\text{HF}}, \mathcal{G}^{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}]_{ijkl}(t) =: \Psi_{ijkl}^{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}. \quad (2.88)$$

Es gelten die Relationen [4]

$$h_{ij}^{\text{HF},\uparrow}(t) = h_{ij}^{(0)} - i\hbar\delta_{ij}U(t)G_{ii}^{<,\downarrow}(t), \quad (2.89)$$

$$h_{ijkl,\uparrow\downarrow}^{(2),\text{HF}}(t) = \delta_{jl}h_{ik}^{\text{HF},\uparrow}(t) + \delta_{ik}h_{jl}^{\text{HF},\downarrow}(t), \quad (2.90)$$

$$\Psi_{ijkl}^{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} = \frac{1}{(i\hbar)^2} U(t)\Phi_{ijkl}^{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}(t), \quad (2.91)$$

$$\Phi_{ijkl}^{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}(t) := (i\hbar)^4 \sum_p [G_{ip}^{>,\uparrow} G_{jp}^{>,\downarrow} G_{pk}^{<,\uparrow} G_{pl}^{<,\downarrow} - G_{ip}^{<,\uparrow} G_{jp}^{<,\downarrow} G_{pk}^{>,\uparrow} G_{pl}^{>,\downarrow}]. \quad (2.92)$$

Insgesamt ergeben sich vier Bewegungsgleichungen (durch die zwei Spin Komponenten). Neben der eben vorgestellten SOA Näherung, gibt es noch weitere Näherungen, die verschiedene Effekte berücksichtigen beziehungsweise auch vernachlässigen. Die GW Näherung berücksichtigt Screening-Effekte bei schwacher Kopplung und die T -Matrix Näherung starke Kopplung und überhaupt keine Screening-Effekte. In NEGF gibt es eine weitere Näherung, die sogenannte *fluctuating-exchange Approximation* (FLEX), bei wel-

cher die GW und die T-Matrix Beiträge vereint werden, um Screening-Effekte und starke Kopplung zu berücksichtigen. Die Selbstenergie kann in dieser Näherung geschrieben werden als

$$\Sigma = \Sigma_{\text{TPP}} + \Sigma_{\text{TPH}} + \Sigma_{\text{GW}} - 2\Sigma_{\text{SOA}}, \quad (2.93)$$

wobei der letzte Term vorhanden ist, um Doppelzählungen zu vermeiden (Σ_{TPH} ist der sogenannte Particle Hole - Term). Eine voll selbstkonsistente Näherung, die sogar noch über die Effekte von FLEX hinaus geht und zusätzliche Kreuzterme zwischen den einzelnen Beiträgen (TPP, GW, usw.) enthält, ist die sogenannte *dynamically-screened-ladder Approximation* (DSL). Diese kann im G1-G2 Schema sehr einfach aufgeschrieben werden. Die Terme der Partikel-Partikel und Partikel-Loch T-Matrix, sowie GW werden in der Zweiteilchen-Bewegungsgleichung zusätzlich addiert [4]. Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{G}_{ijkl}(t) - [h^{(2),\text{HF}}, \mathcal{G}]_{ijkl}(t) &= \Psi_{ijkl}^{\pm}(t) + \\ &+ \Pi_{ijkl}(t) - [\Pi_{lkji}(t)]^* + \Lambda_{ijkl}(t) - [\Lambda_{klji}(t)]^*, \end{aligned} \quad (2.94)$$

wobei Π die Polarisationssterme von GW und Λ die Leiter Terme von der T-Matrix Näherung sind. Es gilt $\Lambda_{ijkl}(t) = \Lambda_{ijkl}^{\text{pp}}(t) + \Lambda_{ijkl}^{\text{ph}}(t)$, wobei pp für Partikel-Partikel und ph für Partikel-Loch steht. Dabei wurde der SOA Term (Ψ) nur einmal verwendet, um doppeltes Zählen zu vermeiden.

2.3.3 Contraction Consistency

Contraction Consistency (CC) ist eine zusätzliche Korrektur, die die Spurrelationen von Dichtematrizen und Greenfunktionen erhalten soll. Für eine ausführliche Erklärung von CC im *Two-electron Reduced Density Matrix* (2RDM) Schema sei auf [24] verwiesen. Allgemein gilt für eine N -Teilchen Dichte Matrix ρ_N in einem finiten System folgender Zusammenhang [21]:

$$D_{1\dots s}^{(s)} = \frac{N!}{(N-s)!} \text{Tr}_{s+1\dots N} \rho_N. \quad (2.95)$$

Dabei ist $\text{Tr}_{s+1\dots N}$ die partielle Spur und $D_{1\dots s}^s$ die reduzierte Dichte-Matrix. Ein solcher Zusammenhang gilt ebenfalls für Greenfunktionen:

$$\begin{aligned} N &= -i\hbar \text{Tr}_1 G_1, \\ (N-1)G_1 &= -i\hbar \text{Tr}_2 G_{12}, \\ (N-2)G_{12} &= -i\hbar \text{Tr}_3 G_{123}, \\ &\vdots \end{aligned}$$

Für die ersten drei Greenfunktionen bei Teilchen mit Spin 1/2 ergeben sich folgende Relationen, die erhalten bleiben müssen:

$$\begin{aligned} \frac{N}{2} &= -i\hbar \sum_p G_{pp}^{\uparrow\uparrow}, \quad \frac{N}{2} G_{ij}^{\uparrow\uparrow} = -i\hbar \sum_p G_{ipjp}^{(2),\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}, \quad G_{ij}^{\uparrow\uparrow} = -i\hbar \sum_p G_{ippj}^{(2),\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}, \\ \left(\frac{N}{2} - 1\right) G_{ijkl}^{(2),\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} &= -i\hbar \sum_p G_{ipjkpl}^{(3),\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}, \quad \frac{N}{2} G_{ijkl}^{(2),\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} = -i\hbar \sum_p G_{ijpkpl}^{(3),\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}, \\ G_{ijkl}^{(2),\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} &= -i\hbar \sum_p G_{ipjkpl}^{(3),\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}, \quad G_{ijkl}^{(2),\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} = -i\hbar \sum_p G_{ijpkpl}^{(3),\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}. \end{aligned}$$

Das Ziel von CC ist es, diese Konsistenz für die DSL-Näherung zu wahren. Dazu muss ein zusätzlicher Term für $G^{(3)}$ gefunden werden, welcher Teile von $\mathcal{G}^{(3)}$ enthält, um die DSL Näherung contraction consistent zu machen, also

$$G^{(3)} = G^{(3),\text{DSL}} + G^{(3),\text{CC}}. \quad (2.96)$$

Es handelt sich dabei um eine eigene Näherung, bei der im G1-G2 Schema ein zusätzlicher Term hinzukommt.

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{G}_{ijkl} = \left[h^{(2),\text{HF}}, \mathcal{G} \right]_{ijkl} + \Psi_{ijkl} + \Lambda_{ijkl} + \Pi_{ijkl}^{\pm} + C_{ijkl}^{\text{CC}} \quad (2.97)$$

Dabei gilt für den CC Term

$$C_{ijkl}^{\text{CC}} = \pm i\hbar \sum_{pqr} \omega_{ipqr} G_{qrjkpl}^{(3),\text{CC}} + \text{Symmetrien}. \quad (2.98)$$

Die Elemente von $G^{(3),\text{CC}}$ können über

$$\begin{aligned} G_{i_1 i_2 i_3 j_1 j_2 j_3}^{(3),\text{CC}} &= \sum_{k=1}^6 \sum_{\tau \in S_3} a_{\tau}^k \delta_{i_{\tau(1)} j_1} \delta_{i_{\tau(2)} j_2} \delta_{i_{\tau(3)} j_3} {}^k M^{(0)} \\ &+ \sum_{k=1}^{18} \sum_{\sigma, \tau \in S_3; \sigma(1) < \sigma(2)} b_{\tau\sigma}^k \delta_{i_{\tau(1)} j_{\sigma(1)}} \delta_{i_{\tau(2)} j_{\sigma(2)}} {}^k M_{i_{\tau(3)} j_{\sigma(3)}}^{(1)} \\ &+ \sum_{k=1}^9 \sum_{\sigma, \tau \in S_3} c_{\tau}^k \delta_{i_{\tau(1)} j_{\sigma(1)}} {}^k M_{i_{\tau(2)} i_{\tau(3)} j_{\sigma(2)} j_{\sigma(3)}}^{(2)} \end{aligned} \quad (2.99)$$

berechnet werden, wobei S_3 die Permutationsgruppe von drei Elementen darstellt. Für eine Tabelle mit allen Werten von a_{τ}^k , $b_{\tau\sigma}^k$, c_{τ}^k und ${}^k M^{(0)}$, ${}^k M^{(1)}$, ${}^k M^{(2)}$ siehe [25]. Insgesamt ergeben sich 687 Terme die ausgewertet werden müssen. Aufgrund der Symmetrie von $G^{(3),\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow}$ können jedoch einige Terme zusammengefasst werden, sodass sich die Anzahl der Terme von 684 auf 174 reduzieren lässt. CC kann nur für Systeme mit $N > 4$ realisiert werden. In dieser Arbeit wird deshalb mit Systemen von sechs oder mehr Gitterplätzen gearbeitet.

Im Folgenden wird das in dieser Arbeit verwendete CC Schema vorgestellt. Folgende Schritte werden ausgeführt:

1. Zu Beginn der Simulation werden die Koeffizienten a , b und c bestimmt. Da diese zeitunabhängig sind, muss dieser Schritt nur einmal ausgeführt werden.
2. In jedem Schritt werden die Korrekturterme $M^{(0)}$, $M^{(1)}$ und $M^{(2)}$ bestimmt, welche die Informationen über die fehlende Contraction Consistency beinhalten.
3. Die Korrekturen werden gewichtet, indem diese mit den Koeffizienten kombiniert werden und das Ergebnis wird zur Zweiteilchen-Bewegungsgleichung addiert:

$$i \frac{d}{dt} \mathcal{G}_{ijkl} = \left[h^{(2),HF}, \mathcal{G} \right]_{ijkl} + \Psi_{ijkl} + \Lambda_{ijkl} + \Pi_{ijkl}^{\pm} + C_{ijkl}^{CC}.$$

2.3.4 Purification

Ein Problem, das bei Simulationen im G1-G2 Schema auftritt, ist, dass für große Wechselwirkungspotentiale U die Rechnungen schnell fehlerhafte Werte produzieren und damit für größere Zeiten unbrauchbar werden. Dieses Problem wird mithilfe des Purification Schemas (Pur) verbessert. Ausbrechende Eigenwerte, welche nach einiger Zeit gegen positiv oder negativ unendlich divergieren, werden in regelmäßigen Abständen korrigiert. Abbildung (4) zeigt schematisch das Prinzip von Purification, wobei die gestrichelten Linien die berechneten Werte darstellen, welche nach einiger Zeit von der exakten Dynamik, der durchgängigen Linie, abweichen. Mithilfe von Purification werden diese abweichenden Werte wieder in die Nähe der exakten Dynamik gebracht (rote Pfeile). Es gibt keine allgemeine Definition, sondern viele verschiedene Schemata, welche man in der Literatur finden kann [26]. Im Folgenden wird das von Lackner, Alcoba und Joost entwickelte Schema verwendet, welches hier näher erläutert werden soll [24].

In diesem Purification Schema werden folgende Schritte durchgeführt:

1. Zunächst wird die vollständige Zweiteilchen-Greenfunktion $G_{ijkl}^{(2)}$ berechnet, sowie die reduzierte Zwei-Loch-Dichtematrix $Q_{ijkl}^{(2)}$.²
2. Es wird eine Eigenzerlegung durchgeführt und aus diesen der Beitrag der positiven Eigenwerte in $G_{\text{pos}}^{(2)}$ und $Q_{\text{pos}}^{(2)}$ gespeichert.
3. Die positiven Einträge mit ($i = k$ und $j = l$) werden auf Null gesetzt.
4. Es werden die kontraktionsfreien Komponenten der Tensoren $G_{\text{pos,CC}}^{(2)}$ und $Q_{\text{pos,CC}}^{(2)}$ berechnet.
5. Danach wird die purified Zweiteilchen-Greenfunktion bestimmt:

$$G_{\text{new}}^{(2)} = G^{(2)} - G_{\text{pos,CC}}^{(2)} - Q_{\text{pos,CC}}^{(2)}.$$

²Die reduzierte Zwei-Loch Dichte-Matrix wird definiert als $Q_{ijkl}^{(2)} = \langle \Psi | \hat{c}_i \hat{c}_j \hat{c}_l^{\dagger} \hat{c}_k^{\dagger} | \Psi \rangle$.

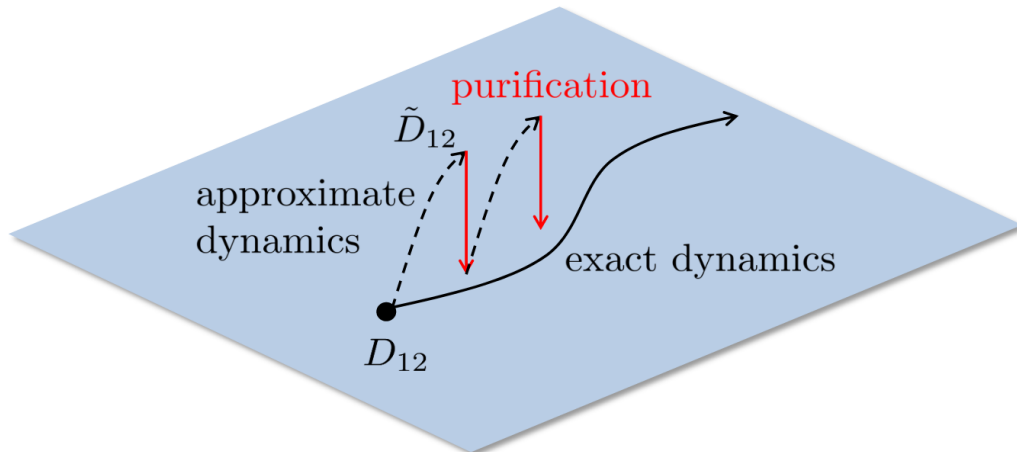


Abbildung 4: Schematische Abbildung vom Purification Schema. Die schwarze Linie mit dem Pfeil beschreibt die exakte Dynamik, während im Laufe der Simulationen die berechnete Dynamik immer mehr abweicht, dargestellt durch die gestrichelten Linien. Mithilfe von Purification wird die approximative Dynamik nach jedem Zeitschritt wieder in die Nähe der exakten gebracht, dargestellt durch die roten Pfeile. Abbildung entnommen aus [24].

6. Aus $G_{\text{new}}^{(2)}$ kann wieder der für das G1-G2 Schema wichtige korrelierte Teil der Zweiteilchen-Greenfunktion aus folgender Relation berechnet werden:

$$\mathcal{G}_{ijkl}^{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} = G_{ijkl}^{(2),\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} - G_{ik}^{<,\uparrow} G_{jl}^{<,\downarrow}.$$

Optionalerweise können die Schritte wiederholt werden, wenn die positiven Eigenwerte weiterhin zu groß sind. In diesem Schema wird dabei Contraction Consistency, sowie die Energieerhaltung garantiert.

3 Observablen

In diesem Kapitel sollen verschiedene Observablen vorgestellt und hergeleitet werden. Dabei wird zunächst gezeigt, wie aus den Greenfunktionen die Einteilchen- und Zweiteilchen-Dichtematrizen gewonnen und wie aus diesen dann die Ensemblemittelwerte bestimmt werden. Nach der Vorstellung der Einteilchen-Observablen, die noch im Rahmen des normalen NEGF Schemas bestimmt werden können, werden die Zweiteilchen-Observablen vorgestellt, welche sehr einfach anhand des G1-G2 Schemas abgeleitet werden können. Im Folgenden bezeichnen griechische Buchstaben explizit Spinkomponenten und lateinische Buchstaben Gitterplätze.

3.1 Einteilchen-Observablen

Bestimmung von Einteilchen-Erwartungswerten

Elementar für die Bestimmung von Ensemble Erwartungswerten ist der aus der statistischen Physik bekannte Dichteoperator. Dieser ist in zweiter Quantisierung für eine Spinrichtung α definiert als [27]

$$\hat{n}_{ij}^\alpha(t) = \hat{c}_{i,\alpha}^\dagger(t)\hat{c}_{j,\alpha}(t). \quad (3.1)$$

Allgemein gilt für den Erwartungswert des Dichteoperators

$$\langle \hat{c}_{i,\alpha}^\dagger(t)\hat{c}_{j,\alpha}(t) \rangle \equiv n_{ji}^\alpha(t), \quad (3.2)$$

wobei $n_{ji}^\alpha(t)$ die Einteilchen-Dichtematrix für eine Spinrichtung ist. Daraus ergibt sich mit der Definition der Greenfunktion $G_{ij}^{\leq,\alpha}(t)$ für reelle Zeitargumente t nach Gleichung (2.39) für den Erwartungswert des Einteilchen-Greenfunktionsoperators [4]

$$\langle \hat{G}_{ij}^{\leq,\alpha}(t) \rangle = G_{ij}^{\leq,\alpha}(t) = -\frac{1}{i\hbar}n_{ij}^\alpha(t) = -\frac{1}{i\hbar}\langle \hat{n}_{ji}^\alpha(t) \rangle. \quad (3.3)$$

In zweiter Quantisierung sind Einteilchen-Operatoren (im Heisenbergbild) definiert über (2.22):

$$\hat{A}(t) = \sum_{ij} \sum_{\alpha} a_{ij}^\alpha \hat{c}_{i,\alpha}^\dagger(t)\hat{c}_{j,\alpha}(t). \quad (3.4)$$

Der Erwartungswert für einen Operator \hat{A} besitzt dann nach (3.2) die Form

$$A(t) = \langle \hat{A}(t) \rangle = \sum_{ij} \sum_{\alpha} a_{ij}^\alpha \langle \hat{c}_{i,\alpha}^\dagger(t)\hat{c}_{j,\alpha}(t) \rangle = \sum_{ij} \sum_{\alpha} a_{ij}^\alpha n_{ji}^\alpha(t). \quad (3.5)$$

Es ist also notwendig die Dichtematrix zu kennen, um die Observablen berechnen zu können. Diese lässt sich aus der Greenfunktion mit (3.3) bestimmen. Daraus ergibt sich

ein Zusammenhang für Operatoren mit einer Spinkomponente:

$$A(t) = \sum_{ij} \sum_{\alpha} a_{ij} n_{ji}^{\alpha}(t) = -i\hbar \sum_{ij} \sum_{\alpha} a_{ij} G_{ji}^{<,\alpha}(t). \quad (3.6)$$

In Matrix Schreibweise kann der Ensemble-Erwartungswert auch über die Spur ausgedrückt werden, wobei $Tr[\dots]$ der Spuroperator ist und A die Matrix des Operators \hat{A} .

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = Tr[A n(t)] \quad (3.7)$$

Am Beispiel des Dichteoperators (3.1) soll skizziert werden, wie ein Erwartungswert bestimmt werden kann. Zunächst werden die Matrixelemente gebildet.

$$\langle s | \hat{c}_{i,\alpha}^{\dagger}(t) \hat{c}_{j,\alpha}(t) | k \rangle = \delta_{i,s}^{\alpha} \delta_{j,k}^{\alpha} \quad (3.8)$$

Aus diesen kann der Ensemble-Erwartungswert nach (3.5) berechnet werden.

$$\langle \hat{c}_{i,\alpha}^{\dagger}(t) \hat{c}_{j,\alpha}(t) \rangle = \sum_{s,k} \sum_{\beta} \delta_{i,s}^{\alpha} \delta_{j,k}^{\alpha} n_{ks}^{\beta}(t) = n_{ji}^{\alpha}(t) \quad (3.9)$$

Dieses Ergebnis entspricht der Definition des Einteilchen-Dichteoperators für eine Spinkomponente, wie nach (3.2). Das beschriebene Vorgehen kann als Leitfaden für die Berechnung von weiteren Observablen aufgefasst werden: Zuerst werden die Matrixelemente der Operatoren bestimmt und aus diesen der Ensemble-Erwartungswert. Analog kann das Verfahren auch für Zweiteilchen-Observablen verwendet werden, wie in Kapitel (3.2) weiter ausgeführt wird.

Kinetische Energie

Die kinetische Energie ergibt sich aus dem Hamiltonoperator der zweiten Quantisierung (2.26) mit $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{W} + \hat{F}$. Dabei ist $\hat{H}^0 = \sum_{i,j} \sum_{\alpha} h_{ij}^{(0)} \hat{c}_{i,\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{j,\alpha}$ der Anteil der kinetischen Energie und kann mithilfe von (3.7) berechnet werden zu

$$E_{kin}(t) = \text{Re} [Tr[h^{(0)} n(t)]]. \quad (3.10)$$

Dabei ist $h^{(0)}$ die Matrix zu den Matrixelementen $h_{ij}^{(0)}$. Im Hubbard-Modell vereinfachen sich dabei die Matrixelemente zu $h_{ij,\alpha}^{(0)} = -J\delta_{\langle i,j \rangle}$, sodass nur nächste Nachbarn $\delta_{\langle i,j \rangle}$ betroffen sind:

$$E_{kin}^{\text{Hub}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha} n_{ji}^{\alpha}. \quad (3.11)$$

Potentielle Energie

Die potentielle Energie ist aus $\hat{F}(t)$ mit $\hat{F}(t) = \sum_{i,j} \sum_{\alpha} f_{ij,\alpha}(t) \hat{c}_{i,\alpha}^{\dagger} \hat{c}_{j,\alpha}$ bestimmbar:

$$E_{pot}(t) = \text{Re} [Tr[f(t) n(t)]]. \quad (3.12)$$

Im Hubbard-Modell wird der Term für die potentielle Energie vereinfacht zu

$$\hat{F}(t) = \sum_i f_i(t) \hat{n}_i, \quad (3.13)$$

wobei $\hat{n}_i = \hat{n}_i^\uparrow + \hat{n}_i^\downarrow$ die Summe aus Spin up und down Elektronen am Gitterplatz i ist. Folglich sind nur die Diagonalelemente von $f(t)$ vorhanden. Für eine bekannte Dichtematrix $n(t)$ und durch die Diagonalität von $f(t)$, kann die Spur bestimmt werden durch:

$$E_{pot}^{\text{Hub}}(t) = \text{Re} [\text{Tr}[f(t)n(t)]] = \sum_i f_i(t) \cdot n_i. \quad (3.14)$$

Die Gleichung (3.14) zeigt, dass auf die besetzten Gitterpunkte ein spezifisches externes Potential wirken kann.

Stromdichte

Die Wahrscheinlichkeitsstromdichte ist eine wichtige Observable für die Dynamik eines Systems. Sie beschreibt die Stromdichte der quantenmechanischen Aufenthaltswahrscheinlichkeit und kann als Transportgröße betrachtet werden. Um die Observable der Stromdichte nach (3.5) zu bestimmen muss diese als Operator vorliegen. Dies ist im Allgemeinen jedoch nicht der Fall. Die Wahrscheinlichkeitsstromdichte mit Spin für ein freies Teilchen ist definiert über [28]

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2M} (\Phi^\dagger \nabla \Phi - \Phi \nabla \Phi^\dagger) - \frac{e}{M} \mathbf{A} \rho, \quad (3.15)$$

wobei Φ Spinoren sind, M die Masse des Teilchens und \mathbf{A} das Vektorpotential. Ohne Spin mit den Wellenfunktionen Ψ und für $\mathbf{A} = 0$ ergibt sich [6]

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2M} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*). \quad (3.16)$$

Außerdem gilt die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} n(t) - \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (3.17)$$

Wie oben beschrieben, kann die Wahrscheinlichkeitsstromdichte bestimmt werden, wenn diese als Operator vorliegt:

$$j(r, t) = \sum_{i,l} \langle i | \hat{j}(r, t) | l \rangle n_{il}(t). \quad (3.18)$$

Dabei ist $\hat{j}(r, t)$ der Stromdichte-Operator. Für homogene Systeme berechnet sich die

Stromdichte zu³

$$j(r) = \frac{\hbar}{MV} \sum_i n_{k_i}(t) \cdot k_i. \quad (3.19)$$

Die Stromdichte in einem diskreten Modell kann nicht durch Gleichung (3.19) bestimmt werden. Die Schwierigkeit liegt im Gradienten der Stromdichte, welcher auf einem diskreten Gitter nicht definiert ist, sodass die bekannte Kontinuitätsgleichung aus (3.17) physikalisch keinen Sinn ergibt.

Stattdessen kann die Stromdichte im Hubbard-Modell durch die Heisenberg Gleichung hergeleitet werden. Für einen einfachen Operator \hat{A}_i gilt nach (2.4)

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_i(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}_i(t)]_-, \quad (3.20)$$

für $\frac{\partial \hat{A}_i}{\partial t} = 0$. Wird der Teilchenzahloperator $\hat{n}_i^\beta = \hat{c}_{i,\beta}^\dagger \hat{c}_{i,\beta}$ für \hat{A}_i eingesetzt, hat die Gleichung die folgende Form

$$\frac{d}{dt} \hat{n}_i^\beta(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{n}_i^\beta(t)]_-. \quad (3.21)$$

Durch Bildung des Erwartungswertes auf beiden Seiten und unter Nutzung von $\langle \hat{n}_i^\beta \rangle = n_i^\beta$, ergibt sich

$$\frac{d}{dt} n_i^\beta(t) = \frac{i}{\hbar} \left\langle [\hat{H}, \hat{n}_i^\beta(t)]_- \right\rangle. \quad (3.22)$$

Gleichung (3.22) besitzt dabei die Form einer Kontinuitätsgleichung $\frac{d}{dt} n = -\nabla j$. Folglich kann durch Vergleich der Gradient des Stromdichte-Operators identifiziert werden:

$$-\nabla j_i^\beta = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{n}_i^\beta(t)]_-. \quad (3.23)$$

Der Kommutator auf der rechten Seite von Gleichung (3.23) kann also als eine diskrete Version des Gradienten von j betrachtet werden. Dies kann als Differenzenquotient mit dem Gitterabstand a interpretiert werden, beispielsweise in 1D:

$$\nabla j = \frac{j(x+a) - j(x)}{a}. \quad (3.24)$$

Im Hubbard-Modell kann $a = 1$ gesetzt werden, sodass nur die Differenz der Ströme zwischen den Gitterpunkten betrachtet wird. Mit dem Hamiltonoperator für das Hubbard-Modell folgt

$$\frac{d}{dt} \hat{n}_i^\beta = \frac{i}{\hbar} \left[\sum_{\langle l,j \rangle_\alpha} J \hat{c}_{l,\alpha}^\dagger \hat{c}_{j,\alpha} + U(t) \sum_l \hat{n}_l^\uparrow \hat{n}_l^\downarrow + \sum_l f_l(t) (\hat{c}_{l,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{l,\uparrow} + \hat{c}_{l,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{l,\downarrow}), \hat{n}_i^\beta \right]_-, \quad (3.25)$$

³Zur Herleitung der Stromdichte für homogene Systeme, siehe Anhang (A).

wobei $\langle l, j \rangle$ die Summe über alle nächsten Nachbarn symbolisiert. Es zeigt sich, dass der Teilchenzahloperator \hat{n}_i^β mit dem Wechselwirkungsterm kommutiert, das heißt es gilt

$$\left[\hat{n}_j^\uparrow \hat{n}_j^\downarrow, \hat{n}_i^\beta \right]_- = 0. \quad (3.26)$$

Der Beweis erfolgt mithilfe der Kommutator-Regel $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}]_- = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]_- + [\hat{A}, \hat{C}]_- \hat{B}$. Es folgt

$$\left[\hat{n}_j^\uparrow \hat{n}_j^\downarrow, \hat{n}_i^\beta \right]_- = \hat{n}_j^\uparrow \left[\hat{n}_j^\downarrow, \hat{n}_i^\beta \right]_- + \left[\hat{n}_j^\uparrow, \hat{n}_i^\beta \right]_- \hat{n}_j^\downarrow. \quad (3.27)$$

Die beiden Kommutatoren $\left[\hat{n}_j^\downarrow, \hat{n}_i^\beta \right]$ und $\left[\hat{n}_j^\uparrow, \hat{n}_i^\beta \right]$ kommutieren für jeden Gitterpunkt $i \neq j$ mit allen Spins:

$$\begin{aligned} \left[\hat{n}_j^\downarrow, \hat{n}_i^\beta \right]_- &= c_{j,\downarrow}^\dagger c_{j,\downarrow} c_{i,\beta}^\dagger c_{i,\beta} - c_{i,\beta}^\dagger c_{i,\beta} c_{j,\downarrow}^\dagger c_{j,\downarrow} \\ &= c_{j,\downarrow}^\dagger c_{i,\beta}^\dagger c_{i,\beta} c_{j,\downarrow} - c_{j,\downarrow}^\dagger c_{i,\beta}^\dagger c_{i,\beta} c_{j,\downarrow} = 0. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Dabei wurden (2.19) sowie (2.20) ausgenutzt. Dieselbe Relation gilt ebenfalls für $\left[\hat{n}_j^\uparrow, \hat{n}_i^\beta \right]$. Für selbe Spins und Gitterpunkte gilt offensichtlich $\left[\hat{n}_j^\uparrow, \hat{n}_j^\uparrow \right]_- = \left[\hat{n}_j^\downarrow, \hat{n}_j^\downarrow \right]_- = 0$. Folglich ist der gesamte Kommutator (3.27) null. Der Wechselwirkungsteil, sowie der Term für die potentielle Energie kommutieren also mit \hat{n}_i^β . Es verbleibt der Kommutator zwischen dem kinetischen Energie-Teil und \hat{n}_i^β und berechnet sich durch den Kommutator

$$\left[\hat{c}_{l,\alpha}^\dagger \hat{c}_{j,\alpha}, \hat{c}_{i,\beta}^\dagger \hat{c}_{i,\beta} \right]_-. \quad (3.29)$$

Unter Ausnutzung der Kommutatorrelation (2.19) und (2.20) ergibt sich:

$$\begin{aligned} \left[\hat{c}_{l,\alpha}^\dagger \hat{c}_{j,\alpha}, \hat{c}_{i,\beta}^\dagger \hat{c}_{i,\beta} \right]_- &= \hat{c}_{l,\alpha}^\dagger \left(\delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} - \hat{c}_{i,\beta}^\dagger \hat{c}_{j,\alpha} \right) \hat{c}_{i,\beta} - \hat{c}_{i,\beta}^\dagger \left(\delta_{il} \delta_{\alpha\beta} - \hat{c}_{l,\alpha}^\dagger \hat{c}_{i,\beta} \right) \hat{c}_{j,\alpha} \\ &= \hat{c}_{i,\beta}^\dagger \hat{c}_{l,\alpha}^\dagger \hat{c}_{i,\beta} \hat{c}_{j,\alpha} - \hat{c}_{l,\alpha}^\dagger \hat{c}_{i,\beta}^\dagger \hat{c}_{j,\alpha} \hat{c}_{i,\beta} + \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \hat{c}_{l,\alpha}^\dagger \hat{c}_{i,\beta} - \delta_{il} \delta_{\alpha\beta} \hat{c}_{i,\beta}^\dagger \hat{c}_{j,\alpha} \\ &= \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \hat{c}_{l,\alpha}^\dagger \hat{c}_{i,\beta} - \delta_{il} \delta_{\alpha\beta} \hat{c}_{i,\beta}^\dagger \hat{c}_{j,\alpha}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Durch Einsetzen in (3.25) folgt weiter

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{n}_i^\beta &= \frac{i}{\hbar} \sum_{\langle l, j \rangle_\alpha} \left(J \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \hat{c}_{l,\alpha}^\dagger \hat{c}_{i,\beta} - J \delta_{il} \delta_{\alpha\beta} \hat{c}_{i,\beta}^\dagger \hat{c}_{j,\alpha} \right) \\ &= \frac{i}{\hbar} \sum_{\langle i, s \rangle} \left(J \hat{c}_{s,\beta}^\dagger \hat{c}_{i,\beta} - J \hat{c}_{i,\beta}^\dagger \hat{c}_{s,\beta} \right). \end{aligned} \quad (3.31)$$

Dabei wird in (3.31) nur die Summe über alle nächsten Nachbarn von i gebildet. Aus dieser Relation und der Überlegung nach (3.24) kann der Operator für die Stromdichte

für Teilchen mit Spin α zwischen zwei Gitterpunkten i und j interpretiert werden als

$$\hat{j}_{ij}^\alpha = \frac{i}{\hbar} \left(J \hat{c}_{i,\alpha}^\dagger \hat{c}_{j,\alpha} - J \hat{c}_{j,\alpha}^\dagger \hat{c}_{i,\alpha} \right) \delta_{\langle i,j \rangle}. \quad (3.32)$$

Hierbei ist wichtig, dass i und j nächste Nachbar sind, ausgedrückt durch $\delta_{\langle i,j \rangle}$. Für die Matrixelemente von \hat{j}_{ij}^α ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle k | \hat{j}_{ij}^\alpha | l \rangle &= \langle k | \frac{i}{\hbar} \left(J \hat{c}_{i,\alpha}^\dagger \hat{c}_{j,\alpha} - J \hat{c}_{j,\alpha}^\dagger \hat{c}_{i,\alpha} \right) \delta_{\langle i,j \rangle} | l \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \left(J \langle k | \hat{c}_{i,\alpha}^\dagger \hat{c}_{j,\alpha} | l \rangle - J \langle k | \hat{c}_{j,\alpha}^\dagger \hat{c}_{i,\alpha} | l \rangle \right) \delta_{\langle i,j \rangle} \\ &= \frac{i}{\hbar} \left(J \delta_{k,i}^\alpha \delta_{j,l}^\alpha - J \delta_{k,j}^\alpha \delta_{i,l}^\alpha \right) \delta_{\langle i,j \rangle}. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Folglich gilt für die Matrixelemente der Stromdichte zwischen den Gitterpunkten i und j :

$$j_{\langle i,j \rangle,kl}^\alpha = \frac{i}{\hbar} \left(J \delta_{k,i}^\alpha \delta_{j,l}^\alpha - J \delta_{k,j}^\alpha \delta_{i,l}^\alpha \right) \delta_{\langle i,j \rangle}. \quad (3.34)$$

Für die Stromdichte zwischen i und j kann erneut (3.5) verwendet werden, sodass

$$\begin{aligned} j_{ij}^\alpha &= \text{Re} \left[\sum_{kl} \sum_{\beta} j_{\langle i,j \rangle,kl}^\alpha n_{lk}^\beta \right] \\ &= \text{Re} \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{kl} \sum_{\beta} \left(J \delta_{k,i}^\alpha \delta_{j,l}^\alpha n_{lk}^\beta - J \delta_{k,j}^\alpha \delta_{i,l}^\alpha n_{lk}^\beta \right) \delta_{\langle i,j \rangle} \right], \end{aligned} \quad (3.35)$$

folgt. Durch den Realteil und dadurch, dass vor der Summe die imaginäre Einheit i steht, wird im Prinzip der negative Imaginärteil gebildet. Es gilt damit

$$\begin{aligned} j_{ij}^\alpha &= \text{Im} \left[-\frac{1}{\hbar} \sum_{kl} \sum_{\beta} \left(J \delta_{k,i}^\alpha \delta_{j,l}^\alpha n_{lk}^\beta - J \delta_{k,j}^\alpha \delta_{i,l}^\alpha n_{lk}^\beta \right) \delta_{\langle i,j \rangle} \right] \\ &= \text{Im} \left[\frac{1}{\hbar} \sum_{kl} \sum_{\beta} \left(J \delta_{k,j}^\alpha \delta_{i,l}^\alpha n_{lk}^\beta - J \delta_{k,i}^\alpha \delta_{j,l}^\alpha n_{lk}^\beta \right) \delta_{\langle i,j \rangle} \right]. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Gleichung (3.36) kann folgendermaßen interpretiert werden: Die Dichtematrix ist auf der Diagonalen reell. Diese Elemente sind die Besetzungen (Dichten) im Hubbard-Modell und können deshalb durch den Realteil abgegriffen werden. Die Nichtdiagonal-Elemente der Dichtematrix sind komplex und beschreiben die Übergangselemente von einem Gitterpunkt zum Nächsten. Sie müssen folglich als Observable aus dem Imaginärteil gewonnen werden. Diese Übergangselemente beschreiben damit Transportprozesse zwischen verschiedenen Gitterpunkten, wie sie bei der Betrachtung der Stromdichte relevant sind. Die Summe wird weiter ausgeführt zu

$$j_{ij}^\alpha = \text{Im} \left[\frac{1}{\hbar} \left(J n_{ij}^\alpha - J n_{ji}^\alpha \right) \delta_{\langle i,j \rangle} \right]. \quad (3.37)$$

Für den Fall, dass J reell ist, gilt

$$j_{ij}^\alpha = \frac{J}{\hbar} \cdot \text{Im} [n_{ij}^\alpha - n_{ji}^\alpha] \delta_{\langle i,j \rangle}. \quad (3.38)$$

Allgemeiner kann die Stromdichte zwischen zwei Gitterpunkten geschrieben werden als

$$j_{ij}^\alpha = \begin{cases} \frac{J}{\hbar} \cdot \text{Im} [n_{ij}^\alpha - n_{ji}^\alpha], & \text{für } \langle i,j \rangle \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}. \quad (3.39)$$

Damit wurde eine Formel für die Stromdichte zwischen zwei Gitterpunkten im Hubbard-Modell gefunden. Die Gesamtstromdichte zwischen zwei Punkten ergibt sich aus der Summe über alle Spins mit

$$j_{ij} = \sum_{\alpha} j_{ij}^{\alpha}. \quad (3.40)$$

Folglich berechnet sich die Gesamtstromdichte von einem Gitterpunkt i zu allen benachbarten Gitterpunkten durch

$$j_{i,tot} = \sum_{j,\alpha} j_{ij}^{\alpha}. \quad (3.41)$$

Dabei entspricht (3.41) gerade dem Erwartungswert der rechten Seite von (3.31) und kann damit gleichzeitig als Gradient der Stromdichte ∇j_i identifiziert werden.

3.2 Zweiteilchen-Observablen

Bestimmung von Zweiteilchen-Erwartungswerten

Zweiteilchen-Observablen können über die Zweiteilchen-Greenfunktion (2.49) für reelle Zeiten t mit den Spins α und β bestimmt werden:

$$G_{ijkl}^{(2),\alpha\beta\alpha\beta}(t) = \frac{1}{(i\hbar)^2} \langle c_{l,\beta}^\dagger(t) c_{k,\alpha}^\dagger(t) c_{i,\alpha}(t) c_{j,\beta}(t) \rangle \quad (3.42)$$

Ähnlich wie bei der Einteilchen-Dichtematrix ergibt sich ein Zusammenhang zwischen der Zweiteilchen-Dichtematrix [29]

$$\langle \hat{c}_{l,\beta}^\dagger \hat{c}_{k,\alpha}^\dagger \hat{c}_{i,\alpha} \hat{c}_{j,\beta} \rangle \equiv n_{ijkl}^{\alpha\beta\alpha\beta} \quad (3.43)$$

und der Zweiteilchen-Greenfunktion. Es gilt

$$n_{ijkl}^{\alpha\beta\alpha\beta}(t) = -\hbar^2 G_{ijkl}^{(2),\alpha\beta\alpha\beta}(t). \quad (3.44)$$

Die Zweiteilchen-Dichtematrix beschreibt dabei den Übergang eines Teilchens von Gitterpunkt i zu k und eines zweiten Teilchens von Gitterpunkt j zu l .

Da im G1-G2 Schema \mathcal{G} zur Propagation verwendet wird, kann die folgende Relation verwendet werden, um die Zweiteilchen-Dichtematrix zu bestimmen [4]:

$$\mathcal{G}_{ijkl}^{\alpha\beta\alpha\beta} = \frac{1}{(i\hbar)^2} \left(n_{ijkl}^{\alpha\beta\alpha\beta} - n_{ik}^{\alpha\alpha} n_{jl}^{\beta\beta} + n_{il}^{\alpha\beta} n_{jk}^{\beta\alpha} \right). \quad (3.45)$$

Außerdem wird deutlich, dass mithilfe der Kommutatorrelationen (2.19) durch Vertauschung der Operatoren die Relation

$$n_{ijkl}^{\alpha\beta\alpha\beta} = n_{jilk}^{\beta\alpha\beta\alpha} \quad (3.46)$$

gilt. Für einen beliebigen Zweiteilchen-Operator in zweiter Quantisierung

$$\hat{A}_{(2)}(t) = \sum_{i,j,k,l} \sum_{\alpha,\beta} \langle ij | a | kl \rangle \hat{c}_{i,\alpha}^\dagger(t) \hat{c}_{j,\beta}^\dagger(t) \hat{c}_{l,\beta}(t) \hat{c}_{k,\alpha}(t), \quad (3.47)$$

wobei $\langle ij | a | kl \rangle = a_{ijkl}^{\alpha\beta\alpha\beta}$ die Matrixelemente darstellen, wird der Erwartungswert zu:

$$\langle \hat{A}_{(2)}(t) \rangle = \sum_{i,j,k,l} \sum_{\alpha,\beta} \langle ij | a | kl \rangle \langle \hat{c}_{i,\alpha}^\dagger(t) \hat{c}_{j,\beta}^\dagger(t) \hat{c}_{l,\beta}(t) \hat{c}_{k,\alpha}(t) \rangle. \quad (3.48)$$

Mit (3.43) ergibt sich

$$\langle \hat{A}_{(2)}(t) \rangle = \sum_{i,j,k,l} \sum_{\alpha,\beta} a_{ijkl}^{\alpha\beta\alpha\beta} n_{klji}^{\alpha\beta\alpha\beta}. \quad (3.49)$$

Aus Gleichung (3.49) können nun die Zweiteilchen-Observablen bestimmt werden.

Paarverteilung

Die Paarverteilung $g(\mathbf{r}_i, \alpha; \mathbf{r}_j, \beta)$ beschreibt die Wahrscheinlichkeit gleichzeitig ein Teilchen am Ort \mathbf{r}_i mit der Spinkomponente α und ein weiteres bei \mathbf{r}_j mit β zu finden.

Im Fall des Hubbard-Modells können die Ortskomponenten \mathbf{r}_i und \mathbf{r}_j durch die Gitterpunkte i und j ersetzt werden. Im Folgenden wird die *nicht normierte Paarverteilung* $g(i, \alpha; j, \beta)$ definiert, welche als eine verallgemeinerte Paarverteilung der Zweiteilchendichte betrachtet und teilweise auch als *density-density correlation function* [30] bezeichnet wird.

$$g(i, \alpha; j, \beta) := \langle \hat{c}_{i,\alpha}^\dagger \hat{c}_{j,\beta}^\dagger \hat{c}_{j,\beta} \hat{c}_{i,\alpha} \rangle. \quad (3.50)$$

Die Matrixelemente ergeben sich zu

$$\langle s, k | \hat{c}_{i,\alpha}^\dagger \hat{c}_{j,\beta}^\dagger \hat{c}_{j,\beta} \hat{c}_{i,\alpha} | l, m \rangle = \delta_{si}^\alpha \delta_{kj}^\beta \delta_{mj}^\beta \delta_{li}^\alpha, \quad (3.51)$$

sodass sich für den Erwartungswert

$$\begin{aligned} g(i, \alpha; j, \beta) &= \sum_{s,k,l,m} \sum_{\gamma,\epsilon} \delta_{si}^\alpha \delta_{kj}^\beta \delta_{mj}^\beta \delta_{li}^\alpha n_{lmsk}^{\gamma\epsilon\gamma\epsilon} \\ &= n_{ijij}^{\alpha\beta\alpha\beta} \end{aligned} \quad (3.52)$$

ergibt. Die nicht normierte Paarverteilung wird also durch die Zweiteilchen-Dichtematrix beschrieben. Da α und β frei wählbar sind, kann die Paarverteilung zum einen für gleiche Spins und zum anderen für entgegengesetzte Spins betrachtet werden. In dieser Arbeit wird mit Spinsymmetrie gerechnet (siehe Kapitel (4.1)), wobei nur $G_{ijij}^{(2),\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}$ und nicht zusätzlich $G_{ijij}^{(2),\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow}$ berechnet wird. Folglich muss die Paarverteilung für selbe Spins anders berechnet werden, wozu folgende sowohl für Greenfunktionen und Dichtematrizen geltende Relation verwendet werden kann:

$$G_{ijij}^{(2),\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} = G_{ijij}^{(2),\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} - G_{ijji}^{(2),\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}, \quad (3.53)$$

$$n_{ijij}^{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} = n_{ijij}^{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} - n_{ijji}^{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}. \quad (3.54)$$

Des Weiteren kann die Paarverteilung in einen HF-Anteil und einen korrelierten Anteil aufgeteilt werden. Dazu können die Relationen

$$\mathcal{G}_{ijij}^{\alpha\beta\alpha\beta} = G_{ii}^{<,\alpha\alpha} G_{jj}^{<,\beta\beta} - G_{ij}^{<,\alpha\beta} G_{ji}^{<,\beta\alpha} + \mathcal{G}_{ijij}^{\text{corr},\alpha\beta\alpha\beta}, \quad (3.55)$$

$$n_{ijij}^{\alpha\beta\alpha\beta} = n_{ii}^{\alpha\alpha} n_{jj}^{\beta\beta} - n_{ij}^{\alpha\beta} n_{ji}^{\beta\alpha} + n_{ijij}^{\text{corr},\alpha\beta\alpha\beta}, \quad (3.56)$$

verwendet werden, welche für alle Spins α und β gelten [4]. Dabei wird der erste Term als

Hartree $n_{ij}^{\text{H},\alpha\beta}$ und der mittlere als Fock $n_{ij}^{\text{F},\alpha\beta}$ Term bezeichnet.

$$n_{ij}^{\text{H},\alpha\beta} := n_{ii}^{\alpha\alpha} n_{jj}^{\beta\beta}, \quad (3.57)$$

$$n_{ij}^{\text{F},\alpha\beta} := n_{ij}^{\alpha\beta} n_{ji}^{\beta\alpha}. \quad (3.58)$$

Es wird schnell deutlich, dass bei unterschiedlichen Spins der Fock Term aufgrund der Definition $n_{ij}^{\uparrow\downarrow} = n_{ij}^{\downarrow\uparrow} = 0$ null wird. Eine wichtige Größe ist auch der korrelierte Anteil der Paarverteilung, welcher hier als *Paarkorrelationsfunktion* $\delta g_{ij}^{\alpha\beta}$ bezeichnet wird. Dieser wird berechnet, indem der HF-Teil von der Paarverteilung subtrahiert wird [1]:

$$\delta g_{ij}^{\alpha,\beta} = n_{ijij}^{\alpha\beta\alpha\beta} - n_{ij}^{\text{HF},\alpha\beta}. \quad (3.59)$$

Die Paarverteilung und die anderen Komponenten können im Grundzustand so normiert werden, dass die gesamte Wahrscheinlichkeit eins ergibt. Die Wahrscheinlichkeit, in einem System mit N Teilchen im Grundzustand auf ein Elektron mit Spin α zu Treffen, ist $p = \frac{N^\uparrow}{N}$. Die Wahrscheinlichkeit ein zweites Elektron an einem anderen Gitterplatz mit unterschiedlichem Spin zu finden ist $p = \frac{N^\downarrow}{N}$, sodass sich die Gesamtwahrscheinlichkeit zu $p_{ges} = \frac{N^\uparrow N^\downarrow}{N^2}$ ergibt. Bei selbem Spin fehlt nun ein Elektron, welches schon für den ersten Platz verwendet wurde, sodass sich die Gesamtwahrscheinlichkeit zu $p_{ges} = \frac{N^\uparrow(N^\uparrow-1)}{N^2}$ ergibt. Damit die Summe aller Wahrscheinlichkeiten eins ergibt, muss die mittlere Wahrscheinlichkeit im Grundzustand $p = \frac{1}{N}$ betragen. Daraus folgen die Normierungskonstanten k für entgegengesetzte und gleiche Spinrichtungen:

$$k^{\uparrow\downarrow} = \frac{N}{N^\uparrow N^\downarrow}, \quad (3.60)$$

$$k^{\uparrow\uparrow} = \frac{N}{N^\uparrow(N^\uparrow-1)} \quad (3.61)$$

Eine weitere Möglichkeit die Paarverteilung zu definieren, ist in [31] gegeben (In der Literatur wird dies oft auch als Paarkorrelationsfunktion bezeichnet):

$$\tilde{g}(i; j) := \sum_{\alpha,\beta} \frac{\langle \hat{c}_{j,\beta}^\dagger \hat{c}_{i,\alpha}^\dagger \hat{c}_{i,\alpha} \hat{c}_{j,\beta} \rangle}{n_i n_j}. \quad (3.62)$$

Zur Unterscheidung von (3.50) wird g hier mit einer \sim versehen. Diese Paarverteilung ist so normiert, dass für ein unendlich großes homogenes Medium $\lim_{|i-j| \rightarrow \infty} \tilde{g}(i; j) = 1$ gilt. Da sie auch größer als eins werden kann beschreibt sie nicht direkt eine Wahrscheinlichkeit, sondern ein Verhältnis. Es kann ebenfalls eine spinaufgelöste Paarverteilung definiert werden als

$$\tilde{g}(i, \alpha; j, \beta) = \frac{\langle \hat{c}_{j,\beta}^\dagger \hat{c}_{i,\alpha}^\dagger \hat{c}_{i,\alpha} \hat{c}_{j,\beta} \rangle}{n_i^\alpha n_j^\beta}, \quad (3.63)$$

sodass die gesamte Paarverteilung über die spinaufgelösten Komponenten durch

$$\tilde{g}(i; j) = \sum_{\alpha, \beta} \frac{\tilde{g}(i, \alpha; j, \beta) n_i^\alpha n_j^\beta}{n_i n_j} \quad (3.64)$$

ausgedrückt werden kann. Weiter kann die Paarverteilung für unkorrelierte Systeme betrachtet werden, also für $U = 0$. Dabei fällt der Korrelationsterm der nicht-normierten Paarverteilung weg, da keine Korrelationen mehr vorhanden sind. Folglich vereinfacht sich (3.62) zu

$$\tilde{g}^{(0)}(i; j) = \sum_{\alpha, \beta} \frac{n_{ii}^{\alpha\alpha} n_{jj}^{\beta\beta} - n_{ij}^{\alpha\beta} n_{ji}^{\beta\alpha}}{n_i n_j}. \quad (3.65)$$

Durch die Definition $n_i^\uparrow + n_i^\downarrow = n_i$ vereinfacht sich die Summe über den Hartree-Teil zu

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha, \beta} \frac{n_{ii}^{\alpha\alpha} n_{jj}^{\beta\beta}}{n_i n_j} &= \frac{n_i^\uparrow n_j^\uparrow + n_i^\uparrow n_j^\downarrow + n_i^\downarrow n_j^\uparrow + n_i^\downarrow n_j^\downarrow}{n_i n_j} \\ &= \frac{n_i^\uparrow n_j + n_i^\downarrow n_j}{n_i n_j} = \frac{n_i n_j}{n_i n_j} = 1. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Außerdem vereinfacht sich unter Verwendung der Eigenschaft $(n_{ij}^{\alpha\beta})^* = n_{ji}^{\beta\alpha}$ Gleichung (3.65) zu [31]

$$\tilde{g}^{(0)}(i; j) = 1 - \sum_{\alpha, \beta} \frac{|n_{ij}^{\alpha\beta}|^2}{n_i n_j} = 1 - \sum_{\alpha, \beta} \frac{|\langle \hat{c}_{i, \alpha}^\dagger \hat{c}_{j, \beta} \rangle|^2}{n_i n_j}. \quad (3.67)$$

Liegen keine Wechselwirkungen vor, gilt stets $\tilde{g}^{(0)}(i, \uparrow; j, \downarrow) = \tilde{g}^{(0)}(i, \downarrow; j, \uparrow) = 1$, da keine Pauli-Korrelationen zwischen unterschiedlichen Spins vorhanden sind. Somit lässt sich die Paarverteilung für $U = 0$ im Grundzustand schreiben als

$$\begin{aligned} \tilde{g}^{(0)}(i; j) &= \frac{\tilde{g}^{(0)}(i, \uparrow; j, \uparrow) + \tilde{g}^{(0)}(i, \uparrow; j, \downarrow)}{2} \\ &= 2 \cdot (n_{ijij}^{(0), \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow} + n_{ijij}^{(0), \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow}) = 1 - 2 \cdot n_{ji}^{\uparrow\uparrow} n_{ij}^{\uparrow\uparrow}. \end{aligned} \quad (3.68)$$

Dabei wurde die Spinsymmetrie ausgenutzt und dass im Grundzustand $n_i = 1$ und $n_i^\uparrow = n_i^\downarrow = 0.5$ für alle i gilt.

Doppelbesetzung

Die Doppelbesetzung beschreibt die Zustände bei denen die Elektronen einen Gitterpunkt doppelt besetzen. Der Operator der Doppelbesetzung ist definiert durch [32]

$$\hat{n}_i^{(2)} = \hat{c}_{i, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{i, \uparrow} \hat{c}_{i, \downarrow}^\dagger \hat{c}_{i, \downarrow}. \quad (3.69)$$

Damit entspricht die Doppelbesetzung gerade den Diagonalelementen der nicht normier-

ten Paarverteilung. Die Matrixelemente ergeben sich zu

$$\langle k, l | \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} \hat{c}_{i,\downarrow} | m, n \rangle = \delta_{ik}^\dagger \delta_{il}^\dagger \delta_{im}^\dagger \delta_{in}^\dagger, \quad (3.70)$$

sodass sich der Erwartungswert

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}_i^{(2)} \rangle &= \sum_{k,l,m,n} \sum_{\alpha,\beta} \delta_{ik}^\dagger \delta_{il}^\dagger \delta_{im}^\dagger \delta_{in}^\dagger n_{mnkl}^{\alpha\beta} \\ &= n_{iiii}^{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} =: n_i^{(2)} \end{aligned} \quad (3.71)$$

ergibt. Nach (3.46) gilt dabei die Symmetrieeigenschaft $n_{iiii}^{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} = n_{iiii}^{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}$. Die gesamte Doppelbesetzung $N^{(2)}$ wird definiert als Summe über alle $n_i^{(2)}$, also durch

$$N^{(2)} := \sum_i n_i^{(2)}. \quad (3.72)$$

Wechselwirkungsenergie

Die Wechselwirkungsenergie ergibt sich aus \hat{E}_{int} des Hamiltonoperator (2.26) in zweiter Quantisierung und kann in einen Hartree-Fock- und korrelierten Anteil aufgeteilt werden:

$$E_{int}(t) = E_{HF}(t) + E_{corr}(t). \quad (3.73)$$

Im G1-G2 Schema kann die Wechselwirkungsenergie direkt über den Hamiltonoperator, ohne die Hilfe der Selbstenergien, gewonnen werden. Dazu wird der Erwartungswert des Wechselwirkungsanteils gebildet:

$$E_{int} = \left\langle \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \sum_{\alpha,\beta} w_{ijkl}^{\alpha\beta\alpha\beta} \hat{c}_{i,\alpha}^\dagger \hat{c}_{j,\beta}^\dagger \hat{c}_{l,\beta} \hat{c}_{k,\alpha} \right\rangle. \quad (3.74)$$

Die Matrixelemente ergeben sich zu

$$\begin{aligned} E_{int,(snmp)} &= \frac{1}{2} \langle s, n | \sum_{i,j,k,l} \sum_{\alpha,\beta} w_{ijkl}^{\alpha\beta\alpha\beta} \hat{c}_{i,\alpha}^\dagger \hat{c}_{j,\beta}^\dagger \hat{c}_{l,\beta} \hat{c}_{k,\alpha} | m, p \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \sum_{\alpha,\beta} w_{ijkl}^{\alpha\beta\alpha\beta} \delta_{i,s}^\alpha \delta_{j,n}^\beta \delta_{k,m}^\alpha \delta_{l,p}^\beta. \end{aligned} \quad (3.75)$$

Mit der Formel für den Erwartungswert von Zweiteilchen-Observablen (3.49) folgt

$$\begin{aligned} E_{int} &= \frac{1}{2} \sum_{s,n,m,p} \sum_{\gamma\epsilon} \sum_{i,j,k,l} \sum_{\alpha,\beta} \omega_{ijkl}^{\alpha\beta\alpha\beta} \delta_{i,s}^\alpha \delta_{j,n}^\beta \delta_{k,m}^\alpha \delta_{l,p}^\beta n_{mpsn}^{\gamma\epsilon\gamma\epsilon} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \sum_{\alpha,\beta} \omega_{ijkl}^{\alpha\beta\alpha\beta} n_{klij}^{\alpha\beta\alpha\beta}. \end{aligned} \quad (3.76)$$

Interessant ist auch die Wechselwirkungsenergie im Hubbard-Modell.

Der Wechselwirkungsterm hat dabei nach (2.27) die Form

$$\hat{E}_{int}(t) = U(t) \sum_i \hat{n}_i^\uparrow \hat{n}_i^\downarrow. \quad (3.77)$$

Der innere Operator kann durch die Kommutatorregeln (2.19) der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren umgeschrieben werden zu

$$\hat{n}_i^\uparrow \hat{n}_i^\downarrow = \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow} = (-1)^2 \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow}, \quad (3.78)$$

sodass die Matrix-Elemente zu

$$E_{int,(k,l,m,p)}(t) = U(t) \langle k, l | \sum_i \hat{n}_i^\uparrow \hat{n}_i^\downarrow | m, p \rangle = U(t) \sum_i \delta_{ik}^\uparrow \delta_{il}^\downarrow \delta_{im}^\uparrow \delta_{ip}^\downarrow \quad (3.79)$$

werden. Der Erwartungswert im Hubbard-Modell ist dann gegeben durch

$$\begin{aligned} E_{int}(t) &= U(t) \sum_i \sum_{klmp} \sum_{\alpha\beta} \delta_{ik}^\uparrow \delta_{il}^\downarrow \delta_{im}^\uparrow \delta_{ip}^\downarrow n_{mpkl}^{\alpha\beta\alpha\beta} \\ &= U(t) \sum_i n_{iii}^{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} = U(t) N^{(2)}. \end{aligned} \quad (3.80)$$

Dabei wurde in (3.80) die Definition (3.72) der Summe über alle Doppelbesetzungen verwendet.

Lokales magnetisches Moment

Das zweite lokale magnetische Moment quantifiziert die lokale magnetische Energie und ist ein Maß für die lokale magnetische Polarisation. Es wird definiert als [5, 33]:

$$\langle \hat{m}_i^2 \rangle = \langle (\hat{n}_i^\uparrow - \hat{n}_i^\downarrow)^2 \rangle. \quad (3.81)$$

Ausmultiplizieren und Umschreiben liefert

$$\begin{aligned} \langle \hat{m}_i^2 \rangle &= \langle (\hat{n}_i^\uparrow - \hat{n}_i^\downarrow)^2 \rangle = \langle (\hat{n}_i^\uparrow)^2 - \hat{n}_i^\uparrow \hat{n}_i^\downarrow - \hat{n}_i^\downarrow \hat{n}_i^\uparrow + (\hat{n}_i^\downarrow)^2 \rangle \\ &= \langle (\hat{n}_i^\uparrow)^2 + (\hat{n}_i^\downarrow)^2 \rangle + \langle -\hat{n}_i^\uparrow \hat{n}_i^\downarrow - \hat{n}_i^\downarrow \hat{n}_i^\uparrow \rangle. \end{aligned} \quad (3.82)$$

Zunächst wird der vordere Term ausgewertet. Durch die Definition der Einteilchen-Dichteoperators (3.1) und die Kommutatorrelation (2.20) kann der Ausdruck für $(\hat{n}_i^\uparrow)^2$ umgeschrieben werden zu

$$(\hat{n}_i^\uparrow)^2 = \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} - \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} \hat{c}_{i,\uparrow}. \quad (3.83)$$

Beim Bilden des Erwartungswertes ergibt sich für den hinteren Term von (3.83) die Zweiteilchen-Dichtematrix für denselben Gitterpunkt mit selbem Spin $\langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle = n_{iii}^{\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow}$. Nach dem Pauli-Prinzip ist diese gerade null und fällt weg. Übrig bleibt der Aus-

druck

$$\langle (\hat{n}_i^\uparrow)^2 \rangle = \langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle = n_i^\uparrow. \quad (3.84)$$

Der Operator $(\hat{n}_i^\uparrow)^2$ ist effektiv ein Einteilchen-Operator. Diese Eigenschaft, dass das Quadrat eines Operators wieder den Operator selbst ergibt, wird als *Idempotenz* bezeichnet. Dieselbe Relation gilt auch für \hat{n}_i^\downarrow , wodurch sich für die beiden Dichte-Matrizen die folgenden Matrix-Elemente ergeben:

$$\langle s | \hat{n}_i^\uparrow | l \rangle = \delta_{i,s}^\uparrow \delta_{i,l}^\uparrow, \quad \langle s | \hat{n}_i^\downarrow | l \rangle = \delta_{i,s}^\downarrow \delta_{i,l}^\downarrow. \quad (3.85)$$

Der Erwartungswert des ersten Terms wird dann zu

$$\begin{aligned} \langle (\hat{n}_i^\uparrow)^2 + (\hat{n}_i^\downarrow)^2 \rangle &= \sum_{ls} \sum_{\alpha\beta} \delta_{i,s}^\uparrow \delta_{i,l}^\uparrow n_{sl}^{\alpha\beta} + \sum_{ls} \sum_{\alpha\beta} \delta_{i,s}^\downarrow \delta_{i,l}^\downarrow n_{sl}^{\alpha\beta} \\ &= n_i^\uparrow + n_i^\downarrow =: n_i, \end{aligned} \quad (3.86)$$

wobei n_i die Gesamtdichte der up und down Teilchen auf dem Gitterplatz i entspricht. Die Matrix-Elemente für den hinteren Term aus (3.82) ergeben sich zu

$$\langle s, k | -\hat{n}_i^\uparrow \hat{n}_i^\downarrow - \hat{n}_i^\downarrow \hat{n}_i^\uparrow | l, m \rangle = -\delta_{is}^\uparrow \delta_{ik}^\downarrow \delta_{il}^\uparrow \delta_{im}^\downarrow - \delta_{is}^\downarrow \delta_{ik}^\uparrow \delta_{il}^\downarrow \delta_{im}^\uparrow, \quad (3.87)$$

sodass sich für den Erwartungswert

$$\begin{aligned} \langle -\hat{n}_i^\uparrow \hat{n}_i^\downarrow - \hat{n}_i^\downarrow \hat{n}_i^\uparrow \rangle &= - \sum_{sklm} \sum_{\alpha\beta} \left(\delta_{is}^\uparrow \delta_{ik}^\downarrow \delta_{il}^\uparrow \delta_{im}^\downarrow + \delta_{is}^\downarrow \delta_{ik}^\uparrow \delta_{il}^\downarrow \delta_{im}^\uparrow \right) n_{lmsk}^{\alpha\beta\alpha\beta} \\ &= - \left(n_{iii}^{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} + n_{iii}^{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow} \right) \end{aligned} \quad (3.88)$$

ergibt. Aufgrund der Symmetrie der Doppelbesetzung $n_{iii}^{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow} = n_{iii}^{\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow}$ durch (3.46), ergibt sich insgesamt für das magnetische Moment

$$\langle \hat{m}_i^2 \rangle = n_i - 2n_i^{(2)}. \quad (3.89)$$

Das (zweite) lokale magnetische Moment beschreibt damit ein Verhältnis zwischen der Dichte und der Doppelbesetzung auf einem Gitterplatz.

4 Untersuchung der Observablen

In diesem Abschnitt werden die Observablen der Energie, der Stromdichte, Paarverteilung/korrelationsfunktion und des zweiten magnetischen Moments untersucht. Zu Beginn wird in diesem Kapitel über das Setup und über die Simulationen berichtet. Bei der Betrachtung der einzelnen Observablen werden Grundzustandsrechnungen, sowie auch Nichtgleichgewichtsrechnungen (speziell bei der Stromdichte) untersucht. Gleichzeitig werden einige Daten mit exakten Rechnungen, die mit der Methode der *configuration interaction* (CI) [15] akquiriert wurden, verglichen, um die Observablen auf deren Genauigkeit bei verschiedenen Wechselwirkungsenergien U und auf deren Ortsabhängigkeit zu untersuchen.

4.1 Setup

Die folgenden Rechnungen wurden teilweise mit CPU oder GPU Code produziert, welche in der Programmiersprache C++ geschrieben sind. Die Simulationen wurden von der Arbeitsgruppe unter Leitung von M. Bonitz entwickelt. Diese Arbeit nutzt für Systeme mit wenigen Gitterpunkten (6 - 8) den CPU Code und für Systeme mit vielen Gitterpunkten (10 - 40) der GPU Code. Die Verwendung der unterschiedlichen Codes begründet sich in dem Zeitersparnis bei den Rechnungen großer Systeme, da der GPU Code diese Rechnungen weiter beschleunigt. CPU Rechnungen wurden dabei auf dem eigenen Computer des Autors und GPU Rechnungen auf dem Computer Cluster Kepler, dem internen Computer Cluster der Universität Kiel, ausgeführt.

Die Simulationen wurden mithilfe des *Runge-Kuta-Verfahrens vierter Ordnung* (RK4) produziert, weitere Informationen zu RK4 sind in Anhang (B) und [34] gegeben. Die Rechnungen sind *spin-restricted*, was bedeutet, dass alle Gleichungen, Dichtematrizen sowie Greenfunktionen für ausgetauschte Spins ($\uparrow \leftrightarrow \downarrow$) identisch sind. Des Weiteren wurden viele Rechnungen mit DSL und den neu hinzugefügten Funktionen Contraction Consistency (siehe Kapitel (2.3.3)) und Purification (siehe Kapitel (2.3.4)) durchgeführt, um die Genauigkeit noch weiter zu verbessern. Beispielhaft wird dies an den Energien in Kapitel (4.2) sowie in [25] gezeigt.

Teil der Arbeit war es, die Observablen der Stromdichte, Paarverteilung, Paarkorrelationsfunktion (wie sowohl auch der jeweiligen Hartree-Fock Anteile) und des magnetischen Moments in den Code einzuprogrammieren, sodass diese zu jedem Zeitschritt ausgegeben werden können.

Für die Erzeugung der Anfangskorrelationen wurde die sogenannte *adiabtic switching* Methode verwendet, bei welcher langsam die elektrischen Korrelationen erhöht werden. Dies wird erreicht, indem das Wechselwirkungspotential des Hubbard-Hamiltonoperators mit einer zeitabhängigen Funktion multipliziert wird, also $U(t) = U f_{AS}(t)$. Die adiabatic switching Funktion muss dabei glatt von 0 auf 1 übergehen. Es zeigt sich, dass die beste

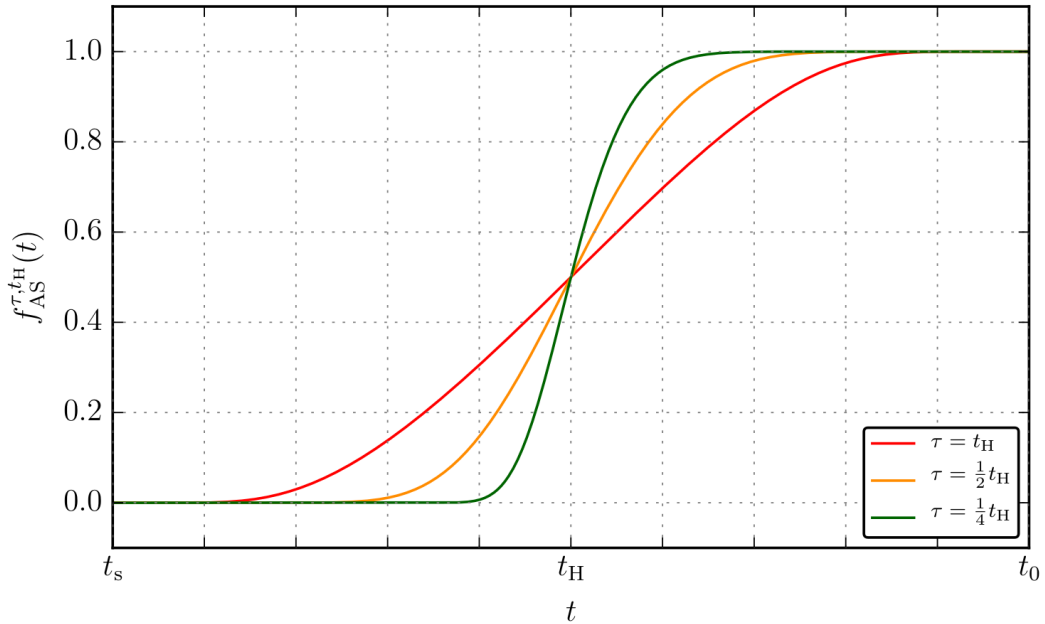


Abbildung 5: Adiabatic switching für verschiedene Werte von τ . Zu erkennen ist, wie $f_{AS}(t)$ vom Startpunkt t_s bis t_0 von null auf eins anwächst. Die Grafik wurde entnommen aus [32]

Wahl für $f_{AS}(t)$ durch die Funktion

$$f_{AS}(t) = \exp\left(-\frac{A}{t_1/(2t_H)} \exp\left(\frac{B}{t_1/(2t_H) - 1}\right)\right). \quad (4.1)$$

gegeben ist [35]. Die Konstanten sind gegeben durch

$$B = \frac{t_H}{\tau \ln(2)} - \frac{1}{2}, \quad A = \frac{\ln(2)}{2} \exp(2B). \quad (4.2)$$

Dabei ist t_H die Halbwertszeit des adiabatic switching und τ die Steilheit. In dieser Arbeit wurden die Konstanten auf $t_H = 25.0t_0$ und $\tau = 19.0t_0$ festgelegt. Abbildung (5) zeigt die grundlegende adiabatic switching Funktion für verschiedene Werte von τ .

4.2 Energien

Die verschiedenen Energien (HF-, Korrelations-, Kinetische-, Potentielle- und Gesamtenergie), die in Kapitel (3.1) und (3.2) vorgestellt wurden, sind bereits ausführlich untersucht worden [36]. Anhand der Korrelationsenergie und der Gesamtenergie wird hier nun begründet, dass für Grundzustandsrechnungen die Kombination von DSL mit CC und Pur die genauesten Ergebnisse liefern: Abbildung (6) zeigt die Korrelationsenergie sowie die Gesamtenergie einer Kette mit sechs Gitterpunkten für verschiedene U in verschiedenen Näherungen. Zu sehen ist, dass die Abweichungen zu den exakten Daten mit steigendem U wächst. Grundsätzlich ist die Näherung ohne CC bei beiden Plots schlechter als die Näherung mit CC, was besonders deutlich wird, wenn die Rechnung der Korrelationsenergie

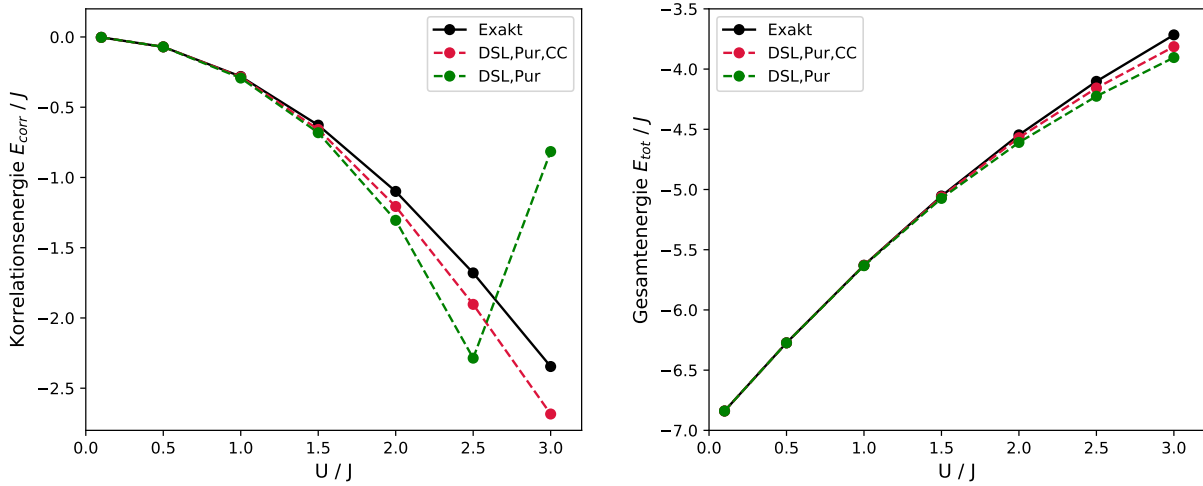


Abbildung 6: **Links:** Korrelationsenergie einer Kette mit sechs Gitterpunkten im Grundzustand für verschiedene U (in Einheiten von J). Die schwarze Linie stellt die CI Daten dar. Die grüne Linie zeigt eine Simulation für DSL mit Pur und die rote Linie eine für DSL mit Pur und CC. **Rechts:** Gesamtenergie für eine Kette mit sechs Gitterpunkten im Grundzustand für verschiedene U . Die schwarze Linie stellt CI Daten dar, die grüne Linie zeigt eine Simulation für DSL mit Pur und die rote Linie für DSL mit Pur und CC.

betrachtet wird. Hier bricht die Näherung nur mit DSL und Pur bei $U = 3$ zusammen und weicht besonders stark ab. Trotz Purification bricht die Näherungen bei großen Energien auseinander, folglich ist die Wahl, mit zusätzlichem CC zu rechnen, gerechtfertigt. Bei der Gesamtenergie tritt dieses Problem nicht auf, da diese in der Simulationen erhalten bleibt und die stark abweichenden Werte, wie beispielsweise in der Korrelationsenergie, von denen der anderen Energien ausgeglichen werden.

4.3 Stromdichte

Für die Stromdichte sind Nicht-Gleichgewichtsprozesse relevant, da dies eine dynamische Größe ist. Zum Test wird die Anregung einer Kette im Grundzustand betrachtet. Abbildung (7) zeigt vier orts aufgelöste Plots zu verschiedenen Zeiten einer Kette mit sechs Gitterpunkten im Grundzustand, bei welchem auf dem vierten Gitterpunkt eine Kick-Anregung, bei $10 J/\hbar$ mit einer Amplitude von $15 J$ für die Dauer von $1 J/\hbar$ durchgeführt wurde. Bei einer Kick-Anregung wird für einen Augenblick die potentielle Energie auf dem Gitterpunkt erhöht. Zu sehen ist, dass die Gesamtstromdichte, definiert in (3.41), bei $10.1 \hbar/J$ auf dem Gitterpunkt, auf dem die Kick-Anregung stattfindet, negativ wird. Hier liegt also ein starker Fluss zu den äußeren Gitterpunkten vor. Gleichzeitig steigt der Fluss bei den Nachbarn, was bedeutet, dass Teilchen auf die Gitterpunkte fließen. Dieses Verhalten der Stromdichte ist zu erwarten, da die Teilchen durch das erhöhte Potential auf dem Kick-Gitterpunkt auf die benachbarten Gitterpunkte fließen. Bei höheren Zeiten wird deutlich, dass der Fluss auf die benachbarten Gitterpunkte vom Vierten mit der Zeit langsam abnimmt. Stattdessen fließen diese weiter auf die nächsten Gitterpunkte, sodass

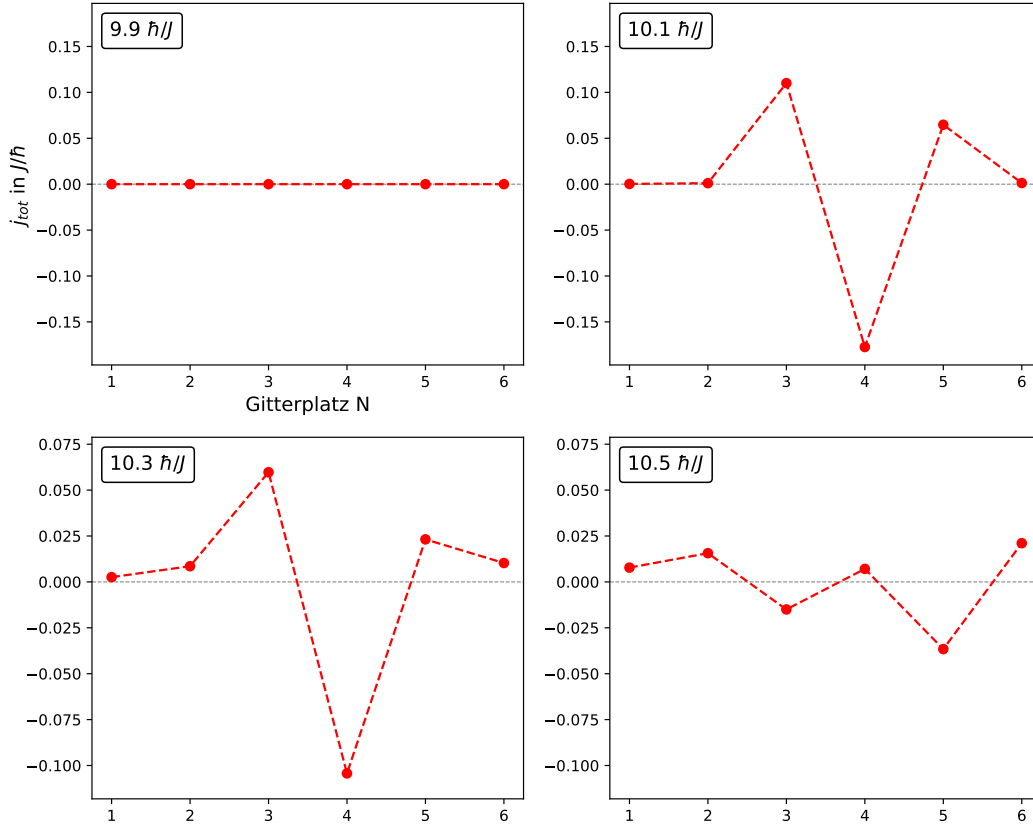


Abbildung 7: Ortsaufgelöste Plots für eine Kick-Anregung im Grundzustand bei $10 \hbar/J$ mit einer Amplitude von $15 J$ für die Dauer von $1 \hbar/J$. Der Kick wurde auf dem vierten Gitterpunkt einer Kette mit sechs Gitterpunkten, bei $U = 1$ ausgeführt. Auf den Abszissen sind die Gitterpunkte der Kette aufgetragen und auf den Ordinaten die Gesamtstromdichte.

sich die Teilchen immer weiter auf die äußersten Gitterpunkte zubewegen und dort am Ende wieder reflektiert werden. Die Stromdichte produziert damit physikalisch korrekte Ergebnisse. Diese Erkenntnis kann nun verwendet werden für weitere Untersuchungen.

Relevant ist ebenfalls die in (3.17) definierte Kontinuitätsgleichung. Im Hubbard-Modell ist ∇j gerade definiert durch die Gesamtstromdichte j_{tot} . Zu erwarten ist, dass die Kontinuitätsgleichung auf jedem Gitterplatz erfüllt ist, da die Stromdichte aus dieser Gleichung abgeleitet wurde. Abbildung (8) zeigt die Kontinuitätsgleichung im zeitlichen Verlauf für den zweiten Gitterplatz einer 1D Kette mit sechs Gitterpunkten. Dabei wurde ein sogenanntes *Akbari-Setup* verwendet, bei welchem sich zwei Elektronen mit unterschiedlichen Spins auf den ersten drei Gitterplätzen und keine Elektronen auf den übrigen Gitterpunkten befinden. Outrat bezeichnet, wie viele Zeitschritte weggelassen wurden, bedeutet bei Outrat 10 wird jeder 10 Schritt für die Kontinuitätsgleichung verwendet und alle anderen werden ignoriert. Die Ableitung der Dichte $\frac{\partial}{\partial t} \rho$ wird über den Differenzenquotient

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_i \right|_{t_0} \approx \frac{\rho_i(t_0 + \Delta t) - \rho_i(t_0)}{(t_0 + \Delta t) - t_0} \quad (4.3)$$

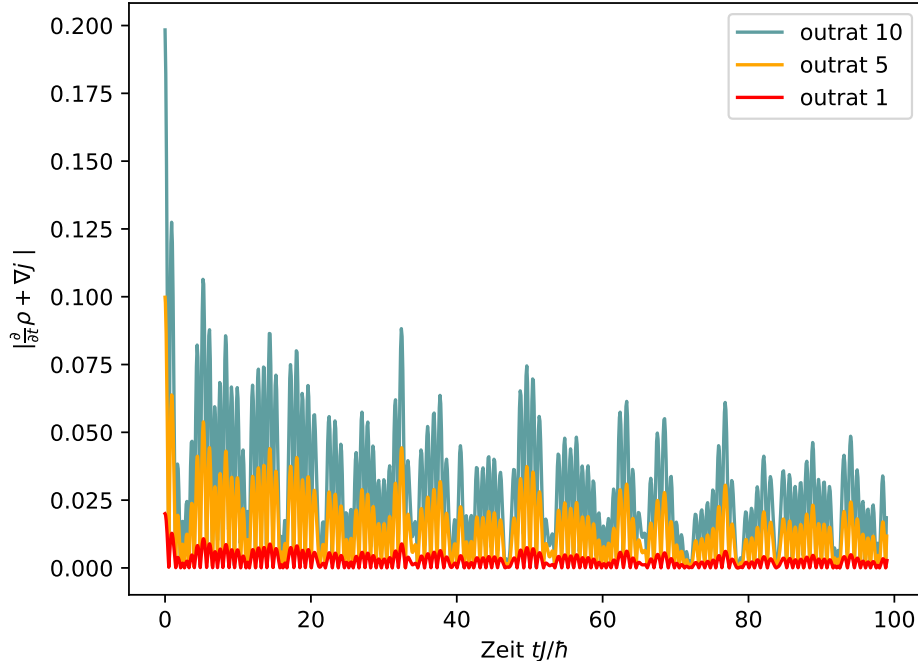


Abbildung 8: Betrag der Kontinuitätsgleichung (Summe aus der zeitlichen Ableitung der Dichte und Gradienten der Stromdichte) auf dem zweiten Gitterplatz für ein Akbari-Setup mit sechs Elektronen auf einer 1D Kette mit sechs Gitterpunkten, bei $U = 1$. Outrat bezeichnet die Ausgabe der Daten, bei Outrat 10 wird bei jedem zehnten, bei Outrat 5 bei jedem fünften und bei Outrat 1 bei jedem Zeitschritt die Observablen berechnet und ausgegeben.

zu einer Zeit t_0 und für ein Zeitintervall Δt auf dem Gitterplatz i berechnet. Dabei entspricht ρ_i dem Diagonaleintrag der Dichtematrix $n_i = n_i^\uparrow + n_i^\downarrow$. Der Gradient der Stromdichte wird über (3.41) bestimmt. In Abbildung (8) ist zu erkennen, dass die Kontinuitätsgleichung in guter Näherung erfüllt ist und entspricht damit der beschriebenen Erwartung. Für kleinere Outrat werden die Fehler der Kontinuitätsgleichung kleiner, da auch $\frac{\partial}{\partial t}\rho$ genauer wird.

Die Kontinuitätsgleichung birgt außerdem Möglichkeiten zur Untersuchung der verschiedenen Simulationsschemata, was im Folgenden näher erläutert werden soll. In allen Rechnungen wurde als Simulationsschema RK4 verwendet, welches sich als numerisch stabil für lange Zeiten und sehr exakt bei Polynomen bis zur vierten Ordnung herausstellt. Das einfachste und numerisch fehlerhafteste Simulationschema nennt sich *Euler-Verfahren*. Dies ist ein Verfahren erster Ordnung, es kann also nur lineare Systeme exakt berechnen. Eine kurze Erläuterung des Euler- sowie des klassischen Runge-Kuta-Verfahrens findet sich in Anhang (B).

Da nach der Herleitung der Stromdichte die Kontinuitätsgleichung erfüllt sein muss, entspricht ∇j zu einem Zeitpunkt t_0 dem exakten Wert (in der jeweiligen Näherung) von $\frac{\partial}{\partial t}\rho$ und kann so im Programm ausgegeben werden. Die totale Stromdichte beschreibt also die exakte Ableitung, beziehungsweise die zeitliche Steigung der Dichte zum Zeitpunkt t_0 . Die Fehler, welche in Abbildung (8) zu erkennen sind, ergeben sich also durch den berechneten Differenzenquotienten (4.3). Dagegen wird die Dichte in der Simulation durch RK4

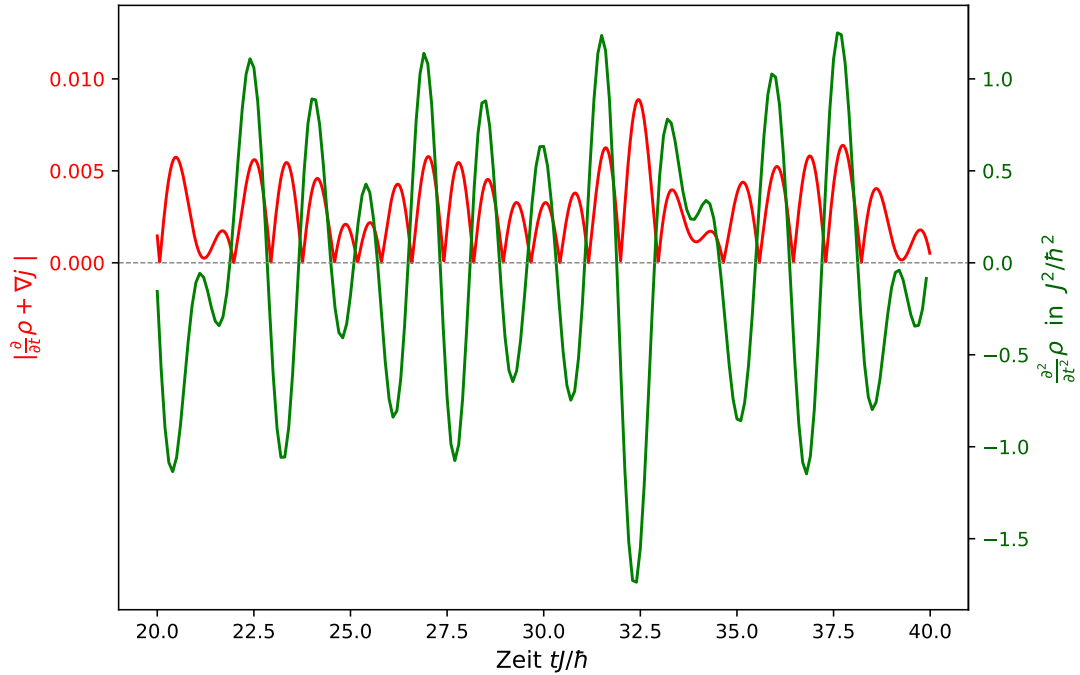


Abbildung 9: Vergleich der zweiten zeitlichen Ableitung der Dichte zur berechneten Kontinuitätsgleichung für ein Zeitintervall von $20 \hbar/J$ bis $40 \hbar/J$. Die grüne Kurve stellt die zweite zeitliche Ableitung der Dichte dar und die rote Kurve den Betrag der berechneten Kontinuitätsgleichung, bei Outrat eins, beim zweiten Gitterplatz eines Akbari-Setups mit sechs Elektronen für eine 1D Kette mit sechs Gitterpunkten, bei $U = 1$.

berechnet. Dieses Verfahren verwendet nicht wie das Euler-Verfahren die exakte Steigung zum Zeitpunkt t_0 zur Propagation, sondern eine angepasste Steigung Φ , indem Schritte vorher ausgeführt werden und damit die zukünftige Entwicklung besser bestimmt werden kann.

Bei der Berechnung der Kontinuitätsgleichung in Abbildung (8) wird also die exakte Steigung von der angepassten Steigung des RK4 Verfahrens abgezogen. Da die exakte Steigung im Euler-Verfahren verwendet wird, kann die berechnete Kontinuitätsgleichung als Maß für die Modifikation, zwischen Euler und RK4, angesehen werden. Die Kontinuitätsgleichung kann folglich ebenfalls für andere Verfahren (Heun-Verfahren, Runge-Kuta 5 und mehr) verwendet werden, um diese auf ihre Modifikation hin zu untersuchen.

Die Modifikation ist genau dort besonders groß, wo die Ableitung der Dichte stark von einem linearen Zusammenhang abweicht (da bei diesem das Euler-Verfahren exakt ist), das heißt dort, wo die Krümmung, beziehungsweise die zweite Ableitung der Dichte, besonders groß ist. Abbildung (9) zeigt einen Ausschnitt vom Verlauf der zweiten zeitlichen Ableitung im direkten Vergleich zur Kontinuitätsgleichung. Zu sehen ist, dass die Extrema der zweiten Ableitung mit den Peaks der Kontinuitätsgleichung übereinstimmen. Entsprechend sind diese Bereiche damit besonders kritisch für das Euler-Verfahren, sodass hier Fehler zum RK4 entstehen. Die Kontinuitätsgleichung ist dabei ein Maß, für die Fehlerstärke beim Vergleich zu RK4. Durch einsetzende Dynamik sind die Fehler besonders zu

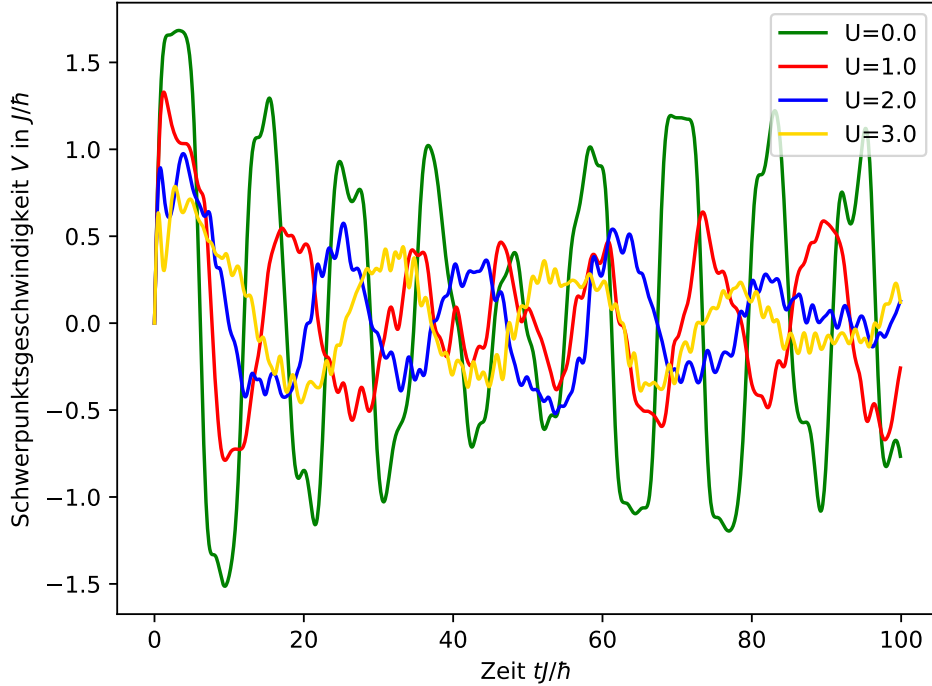


Abbildung 10: Schwerpunktschwindigkeit für eine Kette mit 10 Gitterpunkten für verschiedene U (in Einheiten von J). Es wurde eine Akbari-Setup mit zwei Elektronen auf dem ersten Gitterpunkt verwendet. Der Gitterabstand a wurde auf $a = 1$ gesetzt.

Beginn groß, werden aber durch die gedämpfte Bewegung bei größeren Zeiten kleiner.

Weiterhin besteht großes Interesse an der Untersuchung des Transportes größerer Ansammlungen von Fermionen. Dabei wurden schon einige Untersuchungen durchgeführt, welche beispielsweise die Expansionsgeschwindigkeit kleiner Ansammlungen von Elektronen im NEGF Schema betrachteten und gute Übereinstimmungen mit Experimenten lieferten [37]. Eine verallgemeinerte Größe ist die *Schwerpunktschwindigkeit* V , die die Geschwindigkeit der Schwerpunktskoordinate beschreibt. Für eine 1D-Kette kann diese durch die Stromdichte berechnet werden über

$$V = 2 \frac{a}{N} \sum_{i=1}^{N_{lat}-1} j_{i,i+1}^{\uparrow}. \quad (4.4)$$

Dabei ist a der Gitterabstand, N_{lat} die Anzahl der Gitterpunkte und N die Anzahl der Teilchen. Für eine Herleitung von Formel (4.4) sei auf Anhang (D) verwiesen.

Die Schwerpunktschwindigkeit über die Stromdichte auszudrücken, birgt den Vorteil, dass diese zum einen sehr leicht zu berechnen ist durch das einfache Abgreifen der Observable mithilfe der Dichtematrix und dass zum anderen keine numerische Differentiation der Schwerpunktskoordinate damit notwendig ist. Des Weiteren kann die Schwerpunktschwindigkeit sogar für jeden Zeitpunkt exakt (in der jeweiligen Näherung) berechnet werden, da auch die Stromdichte zu jedem Zeitpunkt in der Simulation ausgegeben wer-

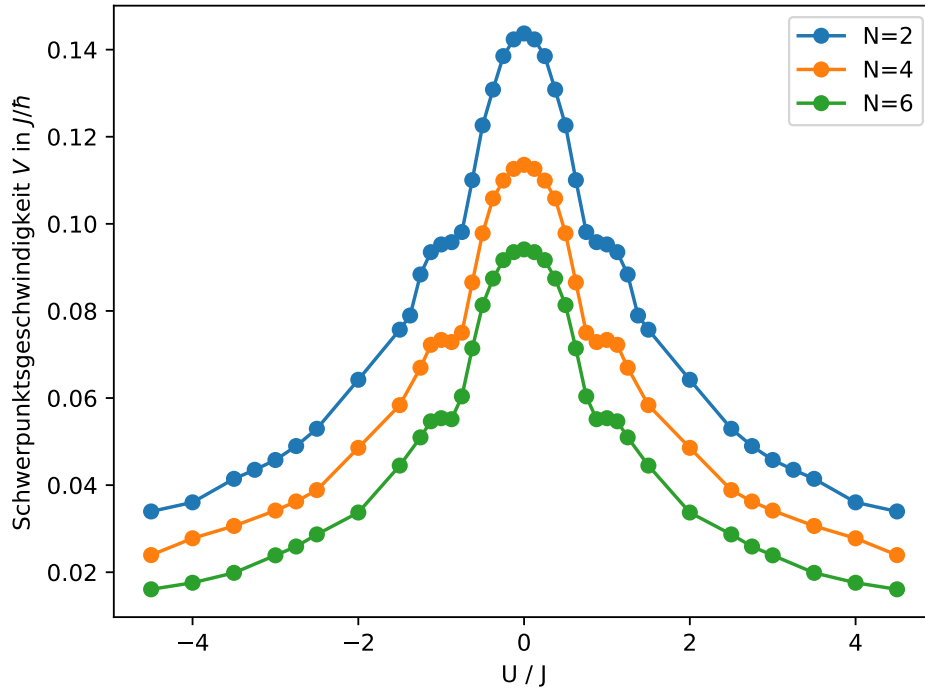


Abbildung 11: Mittlere Schwerpunktschwindigkeit von $0.5tJ/\hbar$ bis zum Nulldurchgang für verschiedene Werte von U (in Einheiten von J). Es wurden Akbari-Setups mit N Elektronen auf den ersten Gitterpunkten, einer Kette mit zehn Gitterpunkten, verwendet. Der Gitterabstand a wurde auf $a = 1$ gesetzt.

den kann. In Abbildung (10) ist der zeitliche Verlauf der Schwerpunktschwindigkeit für eine Kette mit zehn Gitterpunkten für verschiedene U dargestellt. Es wurde ein Akbari-Setup mit zwei Elektronen auf dem ersten Gitterplatz verwendet. Deutlich wird, dass die Bewegung anfangs schnell einsetzt und die Schwerpunktschwindigkeit danach periodisch schwingt, sodass sich der Massenschwerpunkt von einer Seite der Kette zur anderen hin und her bewegt. Für größere U werden die Perioden der Schwingung größer und die Geschwindigkeiten insgesamt kleiner. Diese Beobachtung ist zu erwarten, da durch größere U die Bewegung stärker gedämpft ist, sodass auch die Dynamik des Schwerpunktes langsamer und länger verläuft. Es besteht nun die Frage, wie genau sich die Schwerpunktschwindigkeit mit anwachsendem U verändert. Dazu wurde die Geschwindigkeit auf einem Intervall von $0.5tJ/\hbar$ (dies wurde so gewählt, um die zu Beginn anwachsenden Korrelationen nicht mitzubetrachten) bis zur ersten Ruhelage des Schwerpunktes, also bis zum ersten Nulldurchgang der Geschwindigkeit, gemittelt. Die gemittelte Schwerpunktschwindigkeit ist in Abbildung (11) für positive und negative U abgebildet. Dabei wurden Akbari-Setups mit 2, 4 und 6 Teilchen für eine Kette mit zehn Gitterpunkten betrachtet. Sichtbar ist stets, dass die Geschwindigkeit bei $U = 0$ einen endlichen Wert annimmt und für anwachsende bzw. abnehmende U schnell sinkt. Um $|U| = 1$ bildet sich ein Plateau, bei welchem die Geschwindigkeit kaum absinkt, bis die Geschwindigkeit für steigende/fallende U zunächst schnell und danach immer langsamer abfällt. Aufgrund des Verlaufes

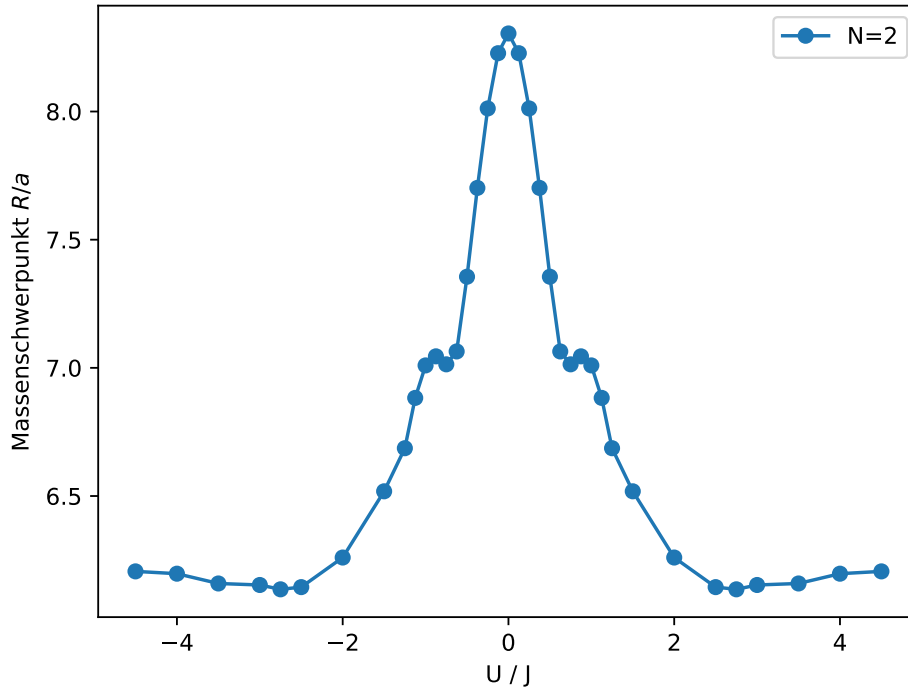


Abbildung 12: Schwerpunktskoordinate, in Einheiten des Gitterabstandes a , beim ersten Umkehrpunkt, für verschiedene U (in Einheiten von J). Es wurde ein Akbari-Setup mit $N = 2$ Elektronen auf dem ersten Gitterpunkt einer Kette mit zehn Gitterpunkten verwendet.

ist zu erwarten, dass für noch weiter ansteigende Wechselwirkungspotentiale die gemittelte Geschwindigkeit gegen einen endlichen Wert konvergiert. Interessant ist dagegen das Plateau, welches um $|U| = 1$ entsteht. Dieses Verhalten kann bei allen Setups beobachtet werden. Die Graphen für unterschiedliche Teilchenzahlen besitzen dabei alle einen nahezu identischen Verlauf, wobei die gesamte Schwerpunktschwindigkeit mit steigender Elektronenzahl geringer wird. Dies kann vermutlich auf die eingeschränkte Propagation durch Pauli-Blocking zurückgeführt werden. Beispielsweise können sich bei $N = 6$ zu Beginn nur die Elektronen auf dem dritten Gitterplatz bewegen, für die anderen ist durch den noch fast voll besetzten dritten Gitterplatz die Bewegung durch das Pauli-Prinzip eingeschränkt.

Das Plateau, welches bei der Schwerpunktschwindigkeit beobachtet werden kann, entsteht ebenfalls bei der Untersuchung die Schwerpunktskoordinate für den ersten Umkehrpunkt. In Abbildung (12) ist diese Schwerpunktskoordinate für dasselbe Setup mit zwei Elektronen dargestellt. Dabei ist die Koordinate R in Einheiten des Gitterabstandes und der erste Gitterpunkt liegt bei $R = 0$. Es ist ein ähnliches Verhalten wie in (11) zu beobachten, wobei die Koordinate sogar für große Wechselwirkungspotentiale ($U > 3$) beziehungsweise kleine Wechselwirkungspotentiale ($U < 3$) anwächst, also der Schwerpunkt dort beim ersten Durchlauf noch dichter zum Ende der Kette gelangt. Das typische Plateau ist in einem etwas früheren, aber schon überlappenden, U Bereich auch hier zu beobachten. Bedeutet für einen kleinen U Abschnitt erreicht der Schwerpunkt fast die-

selbe Koordinate und hat dabei dieselbe mittlere Geschwindigkeit. Dieses Plateau bedarf weiterer Untersuchungen und wird als Aufgabe für die Zukunft gesehen.

4.4 Paarverteilung & Paarkorrelationsfunktion

Bei der Paarverteilung und Paarkorrelationsfunktion werden 1D-Ketten mit unterschiedlicher Anzahl an Gitterpunkten im Grundzustand untersucht. Als Erstes wird die Paarkorrelationsfunktion für eine Kette mit 20 Gitterpunkte betrachtet. In Abbildung (13) ist die Paarkorrelationsfunktion für entgegengesetzte Spins in Bezug auf den ersten Gitterpunkt ($\delta g_{1,i}(\uparrow, \downarrow)$) für diese Kette gezeigt. Zu erkennen ist, dass die Korrelationsfunktion um Null herum oszilliert. Der korrelierte Anteil der Paarverteilung spielt dabei erst bei Wechselwirkungstärken, die größer als null sind, also $U > 0$, eine Rolle. Weiter ist bekannt, dass sich mit wachsendem U im Hubbard-Modell eine Art antiferromagnetischer Zustand ausbildet, bei der eine Spindichtewelle entsteht. Dieser Effekt tritt besonders in sogenannten *bipartite* (zweigeteilten) Gittern auf, bei welchen das System in zwei Untergitter \mathcal{A} und \mathcal{B} aufgeteilt werden kann, sodass die nächsten Nachbarn von \mathcal{A} nur Gitterpunkte von \mathcal{B} sind und umgekehrt [2]. Abbildung (14) zeigt Beispiele solcher bipartite Gitter. Die 1D Kette gehört ebenfalls dazu.

Der Effekt des Antiferromagnetismus kann besonders einfach durch den Hubbard-Dimer erklärt werden, welcher im Kapitel (2.2) behandelt wurde. Im Grundzustand befindet sich das System im Zustand Ψ^- , was ein überlagerter Zustand aus $|\uparrow, \downarrow\rangle, |\downarrow, \uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow, \cdot\rangle$ und

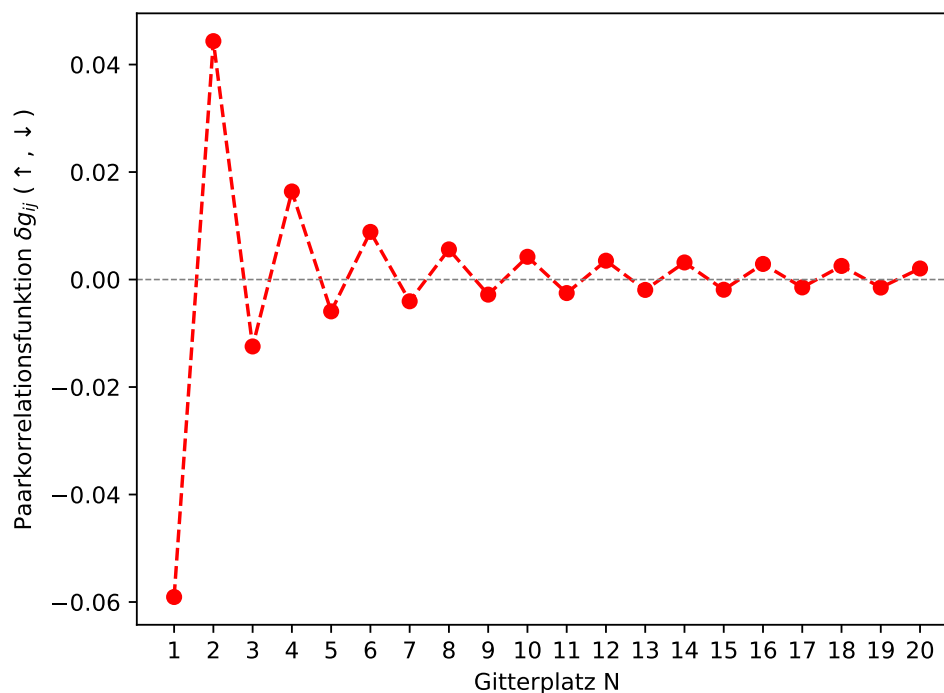


Abbildung 13: Paarkorrelationsfunktion einer Kette mit 20 Gitterpunkten im Grundzustand bei $U=1$ für unterschiedliche Spins in Bezug auf den ersten Gitterpunkt.

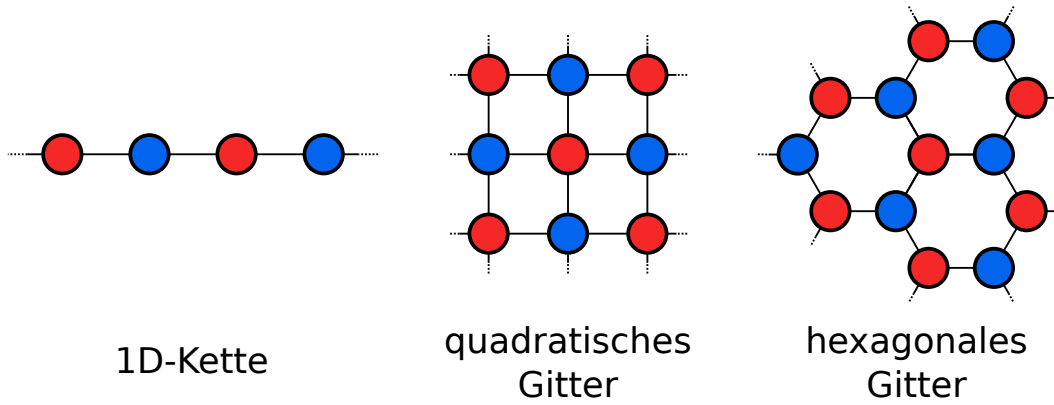


Abbildung 14: Darstellung verschiedener bipartite Gitter. Die roten Gitterpunkte gehören zum Untergitter \mathcal{A} und die blauen zum Untergitter \mathcal{B} .

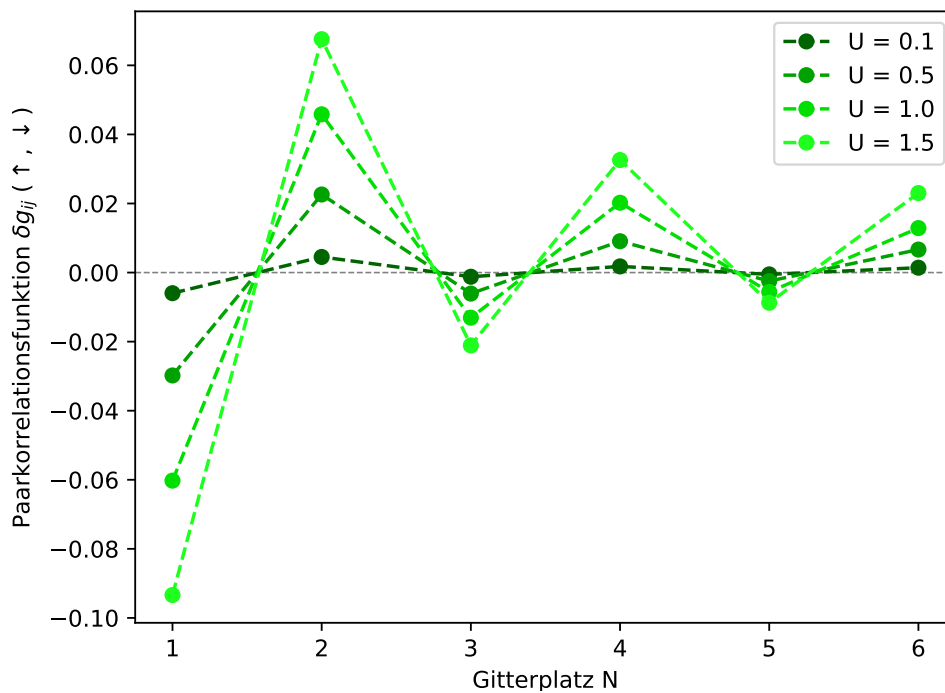


Abbildung 15: Paarkorrelationsfunktion für verschiedene U (in Einheiten von J) einer Kette mit sechs Gitterpunkten im Grundzustand für unterschiedliche Spins in Bezug auf den ersten Gitterpunkt.

$|\cdot, \uparrow\downarrow\rangle$ ist, siehe dazu (2.36). Bei $U = 0$ wird deutlich, dass alle Zustände mit dem gleichen Anteil eingehen, der Hubbard-Dimer befindet sich also in einem rein paramagnetischen Zustand. Für den Grenzfall $U \rightarrow \infty$ dagegen, geht die Energie E^- gegen null, was dazu führt, dass die Einträge, welche die Doppelbesetzung charakterisieren im Eigenvektor Ψ^- verschwinden. Übrig bleiben nur noch die Zustände mit entgegengesetzten Spins, also ein "antiferromagnetischer" Zustand. Der anwachsende Zustand, bei welchem die abwechselnd entgegengesetzten Spins anfangen zu dominieren, ist in Abbildung (13) zu erkennen. Beim ersten Gitterpunkt nimmt der Korrelationseffekt ab, da der doppelt besetzte Zustand ebenfalls abnimmt. Im Gegensatz dazu steigt der Korrelationsanteil auf dem zweiten Gitterpunkt an, da sich dort mit einer höheren Wahrscheinlichkeit ein Elektron mit entgegengesetztem Spin befindet. Dieses Muster setzt sich in der Kette so fort, wobei die

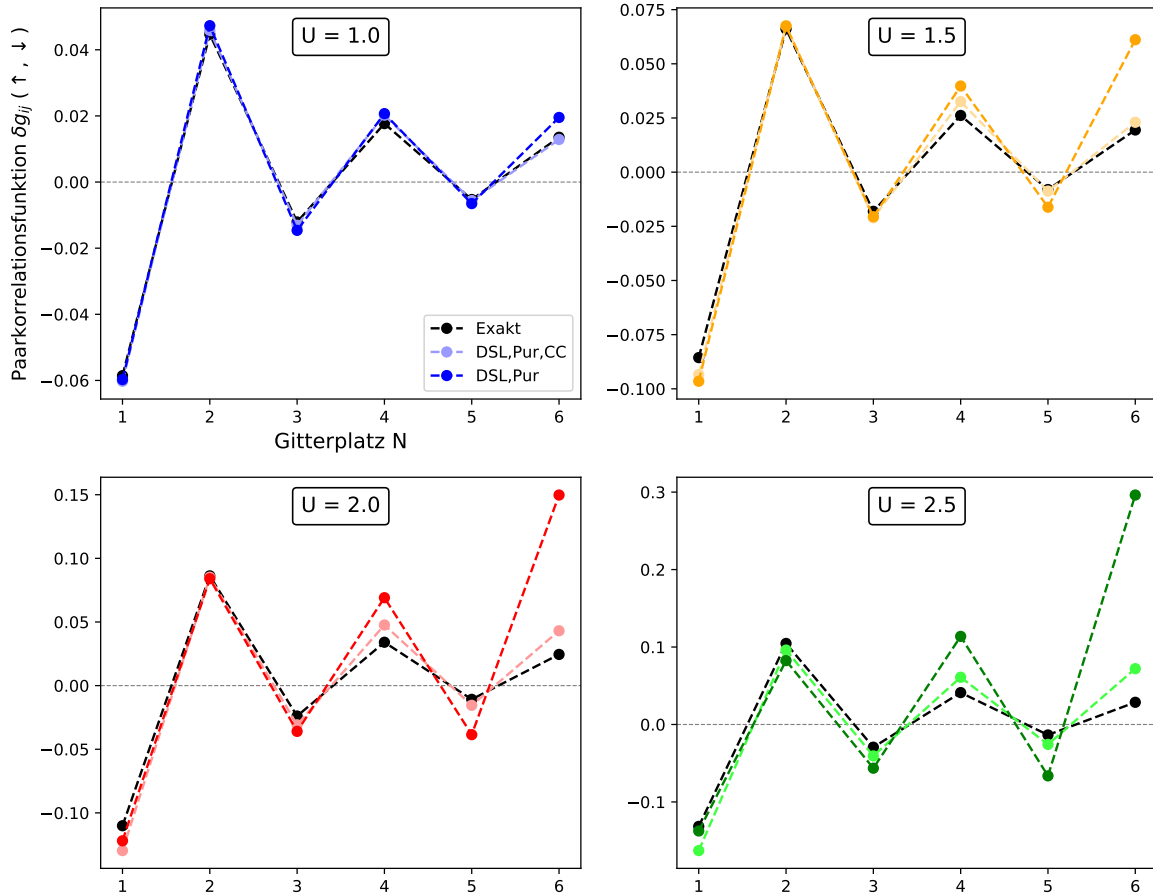


Abbildung 16: Plots der Paarkorrelationsfunktion für unterschiedliche Spins in Bezug auf den ersten Gitterpunkt, einer Kette mit sechs Gitterpunkten im Grundzustand und unterschiedlichem U (in Einheiten von J) für jeden Plot. Die schwarzen sind die exakten CI Daten, die helleren Farben die Daten für DSL, CC und Pur und die dunkleren Punkte und Striche sind die Näherung ohne CC. Auf den Abszissen sind die Gitterpunkte der Kette aufgetragen und auf den Ordinaten die Paarkorrelationsfunktion.

Korrelationseffekte für weit entfernte Gitterpunkte stark abnehmen. In Abbildung (15) ist die Paarkorrelationsfunktion für eine Kette mit sechs Gitterpunkten bei verschiedenen Wechselwirkungspotentialen dargestellt. Zu erkennen ist, wie bei kleinem U kaum Korrelationen vorhanden sind und für größere U die Korrelationen vor allem an den geraden Gitterpunkten anwachsen und bei den ungeraden Gitterpunkten abnehmen. Dies zeigt nochmal deutlich den anwachsenden antiferromagnetischen Zustand für große Wechselwirkungspotentiale. Weiter ist die Entwicklung des Fehlers der Paarkorrelationsfunktion interessant. In Abbildung (16) ist ein Setup mit sechs Gitterpunkten im Grundzustand gezeigt. In vier Plots werden für unterschiedliche U die Näherungen mit DSL, CC und Pur, sowie dieselbe nur ohne CC verglichen. Es wird deutlich, dass der Fehler besonders bei weit entfernten Gitterpunkten, im Bezug auf den ersten, größer wird. Besonders die Paarkorrelationsfunktionen, welche ohne CC berechnet wurden, weichen bei den hinteren Gitterpunkten für große U deutlich von den CI Daten ab. Dies ist dahingehend relevant, dass bei größeren Wechselwirkungspotentialen die Korrelation nach hinten sogar anstei-

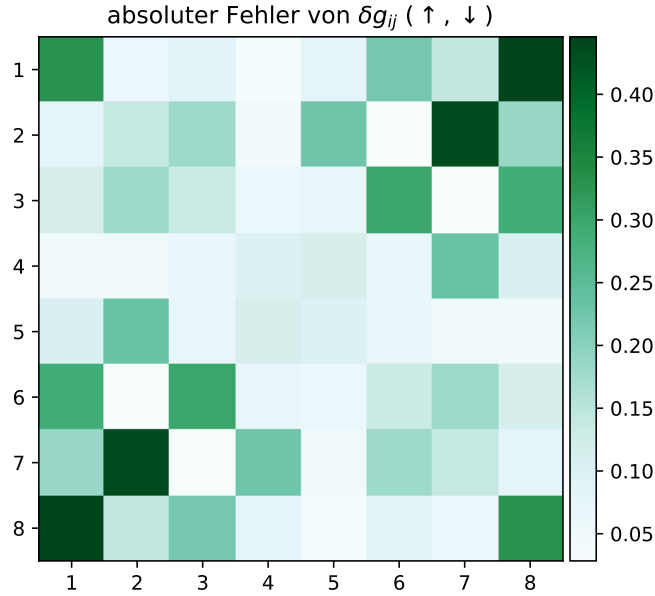


Abbildung 17: Absoluter Fehler der Paarkorrelationsfunktion für unterschiedliche Spins dividiert durch die Vergleichswerte δg_{ii} der jeweiligen Zeile i , für eine Kette mit acht Gitterpunkten im Grundzustand bei $U = 2.5$.

gen können, anstatt wie in den exakten Daten abzufallen. Die Vermutung liegt nahe, dass im Allgemeinen der Fehler größer wird für weit entfernte Paarkorrelationen. In Abbildung (17) ist ein Matrix Plot für den absoluten Fehler der Paarkorrelationsfunktion dargestellt. Es wird deutlich, dass der absolute Fehler besonders an den Ecken unten links und oben rechts stärker ausgeprägt ist als in der Diagonalen, wo die Gitterpunkte nah beieinander liegen. Auffällig ist außerdem, wie die Matrixelemente ganz oben links (1-1) und ganz unten rechts (8-8) von der Diagonalen abweichen.

Diese Gitterpunkte entsprechen gerade dem Korrelationsanteil der Doppelbesetzung (für die Definition der Doppelbesetzung siehe Kapitel (3.2)). Der größere Fehler der Doppelbesetzung an den Rändern kann ebenfalls bei der Observable des magnetischen Moments beobachtet werden und wird in Abschnitt (4.5) näher erläutert. Damit konnte die Hypothese bestätigt werden, dass die Fehler für weit entfernte Gitterpunkte größer werden.

Ebenfalls interessant ist, wie sich die Paarkorrelationsfunktion für selbe Spins verhält. In Abbildung (18) ist die Entwicklung der Paarkorrelationsfunktion für selbe Spins bei anwachsendem U abgebildet. Zu sehen ist, dass die Werte für selbe Spinrichtung zu denen mit entgegengesetzten Spins abgeschwächt gespiegelt sind, bedeutet, dort wo diese für selbe Spins positiv sind, sind die mit entgegengesetzter Spinrichtung negativ. Dies ist zu erwarten, da wie zuvor beschrieben der antiferromagnetische Zustand langsam einsetzt und die Korrelationen mit selben Spins auf den übernächsten Gitterplätzen zunehmen. Ausnahme bildet dabei der erste Gitterpunkt, bei welchem durch das Pauli-Prinzip keine Korrelationen entstehen.

Als Nächstes wurde die Paarverteilung, die für unendlich große Abstände auf eins normiert

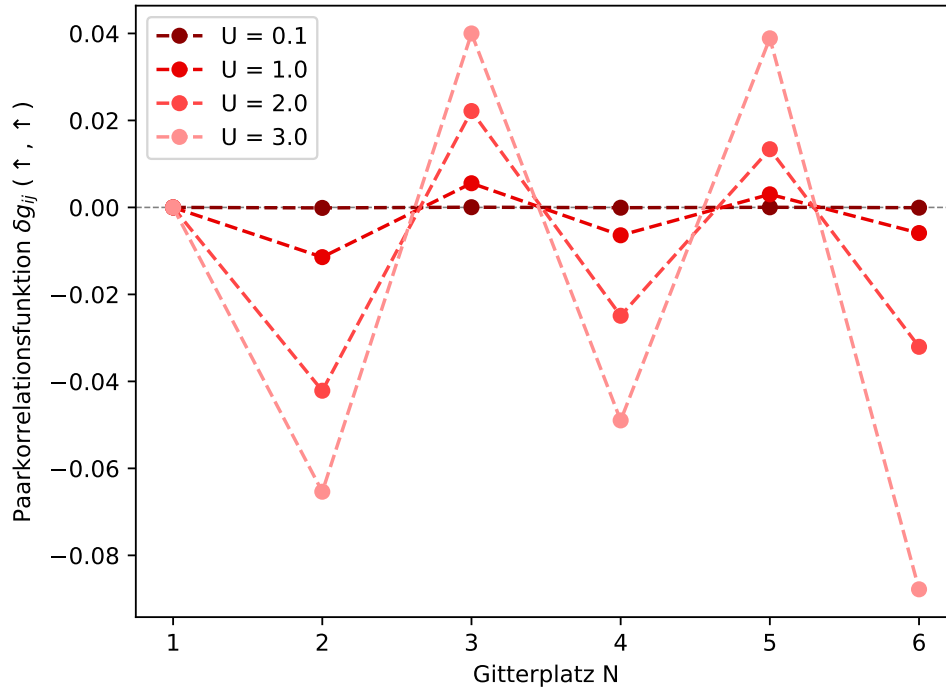


Abbildung 18: Paarkorrelationsfunktion für verschiedene U (in Einheiten von J), einer Kette mit sechs Gitterpunkten im Grundzustand für selbe Spins in Bezug auf den ersten Gitterpunkt.

ist und in (3.62) definiert ist, untersucht. Dazu wurde eine 1D Kette mit 10 Gitterpunkten gewählt sowie ein Wechselwirkungspotential von $U = 0$. In Abbildung (19) ist die Paarverteilung für diese Kette (blaue Daten) im direkten Vergleich mit zwei anderen Systemen abgebildet. Zu erkennen ist, dass die Paarverteilung auf dem ersten Gitterpunkt 0.5 beträgt, beim zweiten Gitterpunkt langsam ansteigt und danach beim dritten Gitterpunkt eins wird. Nachfolgend ist eine Oszillation zu erkennen, bei welcher an jedem ungeraden Gitterpunkt die Paarverteilung eins wird und die lokalen Minima an den geraden Gitterpunkten mit wachsendem Abstand zum ersten an eins konvergieren. Dieser Effekt ist typisch für sogenannte *Fermi-Gase*, bei welchen ein sogenanntes *Austauschkorrelationsloch* beziehungsweise *Fermi-Loch* entsteht [31]. Dies ist eine Auswirkung der antisymmetrischen Wellenfunktionen der Elektronen, sodass sich beim Elektronengas durch Pauli-Blocking ein Loch bildet, bei welchem sich weniger Elektronen aufhalten. Zu betonen ist, dass dieses Loch nicht durch Wechselwirkungen wie beispielsweise die Coulomb-Kraft erzeugt wird, sondern allein durch die Antisymmetrie. Dies wird besonders daran deutlich, dass das Loch für $U = 0$ also für keine Wechselwirkungspotentiale entsteht. Die Oszillationen, die sich nach dem Austauschloch entwickeln haben einen *Friedel-Oszillationsartigen* Charakter. Friedel-Oszillationen entstehen normalerweise durch eine Ladungsstörung, wie beispielsweise ein Ion, in einem homogenen Elektronenmedium und beschreiben periodisch schwankende Elektronendichten [38]. Sie sind ein quantenmechanisches Analogon zu elektronischen Screening-Effekten und können durch Streuungsprozesse an der Fermi-Kante erklärt werden. Hier zeigt sich ein ähnliches Verhalten für die Paarverteilung, durch die

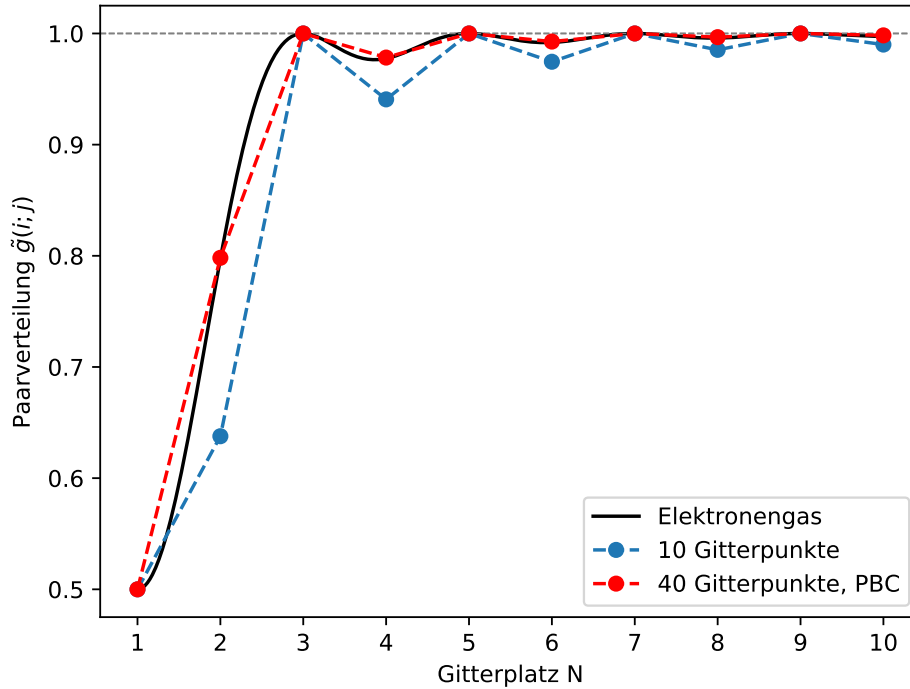


Abbildung 19: Vergleich der Paarverteilung $\tilde{g}(i; j)$ bei keinen Korrelationen ($U = 0$) zwischen dem freien Elektronengas mit dem Fermiwellenvektor nach (4.6) (schwarz), einer endliche Kette mit zehn Gitterpunkten im Grundzustand (blau) und einer Kette mit 40 Gitterpunkten im Grundzustand und periodischen Randbedingungen (rot).

"Störung" eines Elektrons mit einem anderen Spin. Die analytischen Formeln der Paarverteilung und der tatsächlichen Dichte Friedel-Oszillation haben ein ähnlichen Aufbau, bei dem eine trigonometrische Funktion mit einer reziproken Abstands-Abhängigkeit multipliziert wird (siehe Formel Dichteschwankungen der Friedel-Oszillationen [39, 38] und analytische Formeln Paarverteilung [31]). Aus diesem Grund werden diese Oszillationen teilweise als Friedel-Oszillationen bezeichnet [40]. Um hier Irreführungen zu vermeiden werden Anführungszeichen bei den "Friedel-Oszillationen" für die Paarverteilung verwendet.

Überraschend ist dagegen, dass die "Friedel-Oszillationen" ebenfalls in diskreten Gittersystemen entstehen und dass das Austauschkorrelationsloch dabei ebenfalls eine endliche Breite besitzt. Da sich die Elektronen in diesem System auf gegebenen Gitterplätzen befinden, ist es nicht trivial anzunehmen, dass dieser Effekt auch hier auftritt. Es zeigt sich jedoch, dass die "Friedel-Oszillationen" genauso im Hubbard-Modell durch die Basis entstehen, die beispielsweise beim Elektronengas durch ebene Wellen definiert ist. Die Eigenvektoren im Hubbard-Modell für eine endliche 1D Kette bei $U = 0$ haben sinusförmige Einträge [41], wodurch eine starke Ähnlichkeit zu der Basis vom freien Elektronengas besteht, sodass beim Aufsummieren die ähnlichen "Friedel-Oszillationen" entstehen. Für eine endliche 1D Kette kann die Paarverteilung sogar analytisch berechnet werden. Siehe

dazu Anhang (C).

Die in Abbildung (19) angebildete "Friedel-Oszillation" für eine 1D Kette mit 10 Gitterpunkten besitzt dabei eine Periode von zwei Gitterpunkten. Um dies mit dem freien Elektronengas vergleichen, muss der Fermi-Wellenvektor bekannt sein. Die Fermi-Energie in einem 1D-System beträgt [42]

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \rho^2. \quad (4.5)$$

Dabei ist m die Masse und ρ die eindimensionale Teilchendichte. Aus der allgemeinen Dispersionsrelation $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ und der Dichte für die 1D Kette im Grundzustand (1 Elektron pro Gitterplatz) kann der Fermi-Wellenvektor berechnet werden zu

$$k_F = \frac{\pi}{2a}, \quad (4.6)$$

wobei a den äquidistanten Abstand der Gitterpunkte in der Kette beschreibt. Dass a zwischen allen Gitterpunkten gleich groß ist, kann damit begründet werden, dass die Sprungamplitude J ebenfalls überall gleich ist.

Der Fermi-Wellenvektor kann nun verwendet werden, um die Paarverteilung der 1D Kette mit der des freien Elektronengases zu vergleichen. Die Paarverteilung des freien Elektronengases kann ebenfalls analytisch gelöst werden. Siehe dazu [31]. In Abbildung (19) wird die Paarverteilung verglichen für die schon vorher erwähnte Kette mit 10 Gitterpunkten, eine Kette mit 40 Gitterpunkten und periodischen Randbedingungen (PBC) und für das freie Elektronengas mit dem Fermi-Wellenvektor aus (4.6). Zu erkennen ist, dass die Periode der "Friedel-Oszillationen" übereinstimmt, sodass bei jedem ungeraden Gitterplatz (ausgenommen des ersten) die eins berührt wird. Für die endliche Kette wird deutlich, dass das Austauschkorrelationsloch und die "Friedel-Oszillation" qualitativ erhalten bleiben. Die Werte weichen jedoch deutlich bei den geraden Gitterpunkten ab. Dies sind Effekte, die durch die Endlichkeit der Kette auftreten (sogenannte *finit size effects*). So wäre beispielsweise zu erwarten, dass die Werte vom Elektronengas mit denen einer unendlich langen Kette übereinstimmen. Dies kann hinreichend gut für eine lange Kette mit PBC erreicht werden, wie in der Abbildung bei der Kette mit 40 Gitterpunkten zu beobachten ist.

Weiter wird in Abbildung (19) deutlich, dass der Effekt, der für das Austauschkorrelationsloch und die "Friedel-Oszillationen" verantwortlich ist, alleine im **Fock-Anteil** der Paarverteilung für selbe Spins sitzt. Da keine Korrelation vorhanden sind, also die Paarkorrelationsfunktion null ist, der Hartree-Anteil bei beiden Paarverteilung dauerhaft konstant ist ($n_i^\uparrow = n_i^\downarrow = 0.5$) und der Fock-Anteil für die Paarverteilung mit entgegengesetztem Spin nicht vorhanden ist, kann nur der andere Fock-Anteil dafür verantwortlich sein. Folglich ist eine weitere Untersuchung des Hartree-Fock-Anteils, sowie der Paarverteilung für entgegengesetzte Spins sinnvoll. In Abbildung (20) ist der HF-Anteil für eine Kette mit sechs

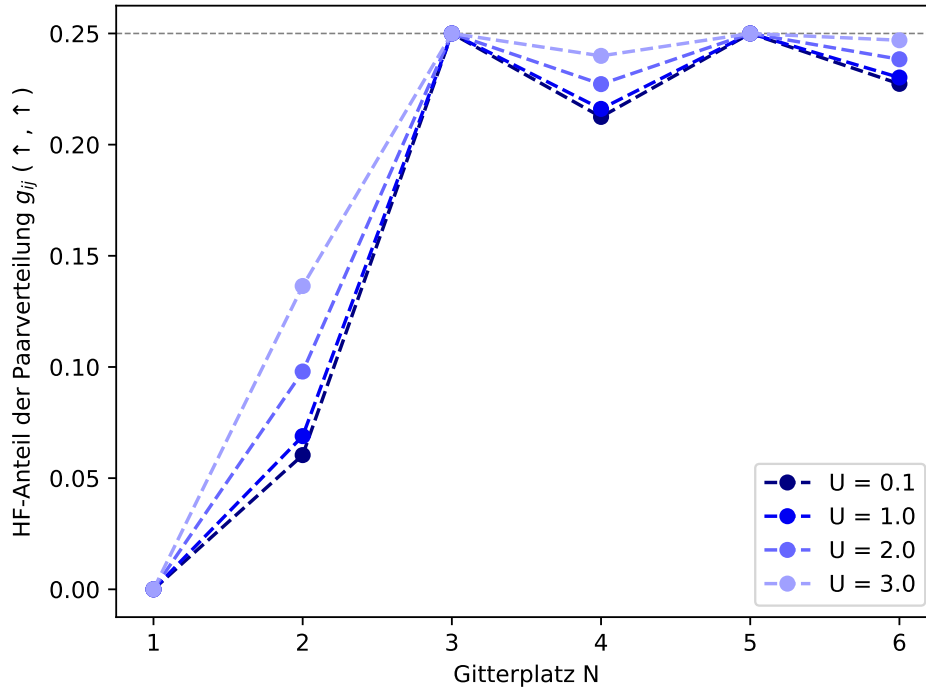


Abbildung 20: HF-Anteil der Paarverteilung für verschiedene U (in Einheiten von J), einer Kette mit sechs Gitterpunkten im Grundzustand, für selbe Spins in Bezug auf den ersten Gitterpunkt.

Gitterpunkten für verschiedene U abgebildet. Es wird deutlich, dass sich für anwachsende Wechselwirkungspotentiale die Oszillationen und das Austauschkorrelationsloch langsam zurückbilden. Alle Werte, bis auf der zum ersten Gitterpunkt sowie die bereits maximalen, steigen an. Der Wert zum ersten Gitterpunkt steigt dabei aufgrund des Pauli-Prinzips nicht an. Für $U \rightarrow \infty$ ist zu erwarten, dass alle bis auf der erste Gitterpunkt gegen 0.25 konvergieren, bedeutet die Effekte des Fock-Anteils verschwinden überall. Für sehr große U ist der durch die Antisymmetrie verursachte Effekt folglich vernachlässigbar. Dem gegenüber steht die Entstehung des antiferromagnetischen Zustandes, welcher durch die schon angesprochene Paarkorrelationsfunktion in Abbildung (18) verdeutlicht wird.

Zusammen ergibt sich die (auf eins normierte) Paarverteilung in Abbildung (21). Die stärker anwachsenden Oszillationen werden auch hier sichtbar, wobei wie zu erwarten die Paarverteilung auf dem ersten Gitterpunkt null bleibt. Es entstehen also zwei entgegenwirkende Effekte, wobei der antiferromagnetische Effekt scheinbar dominiert. Dies wird durch die immer stärker werdenden Oszillationen deutlich. Dass dieses Zusammenspiel zwischen den beiden Effekten jedoch empfindlich ist, wird erkennbar, wenn die Paarverteilung auf dem zweiten Gitterplatz untersucht wird. In Abbildung (22) ist die Paarverteilung auf dem zweiten Gitterplatz für verschiedene U abgebildet. Beim Vergleich mit exakten Daten wird deutlich, dass bei der DSL,CC,Pur Näherung Probleme entstehen. Die CI Daten zeigen, dass der Effekt des antiferromagnetischen Zustandes den der Antisymmetrie übertrifft, sodass die Summe mit größerem U sinkt. Durch Fehler in der DSL,CC,Pur Nähe-

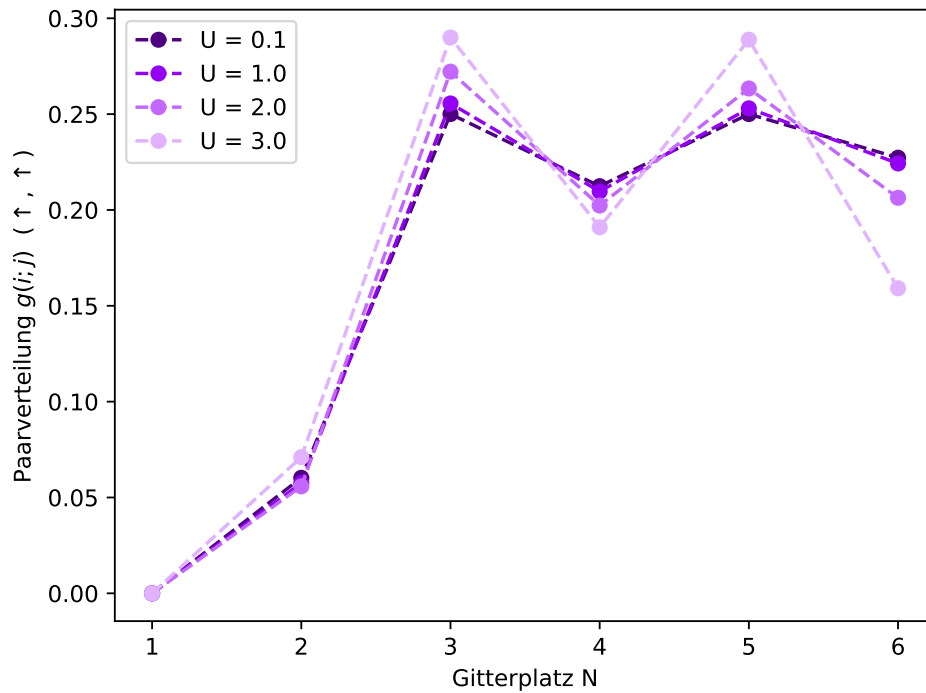


Abbildung 21: Paarverteilung für verschiedene U (in Einheiten von J), einer Kette mit sechs Gitterpunkten im Grundzustand und für selbe Spins in Bezug auf den ersten Gitterpunkt.

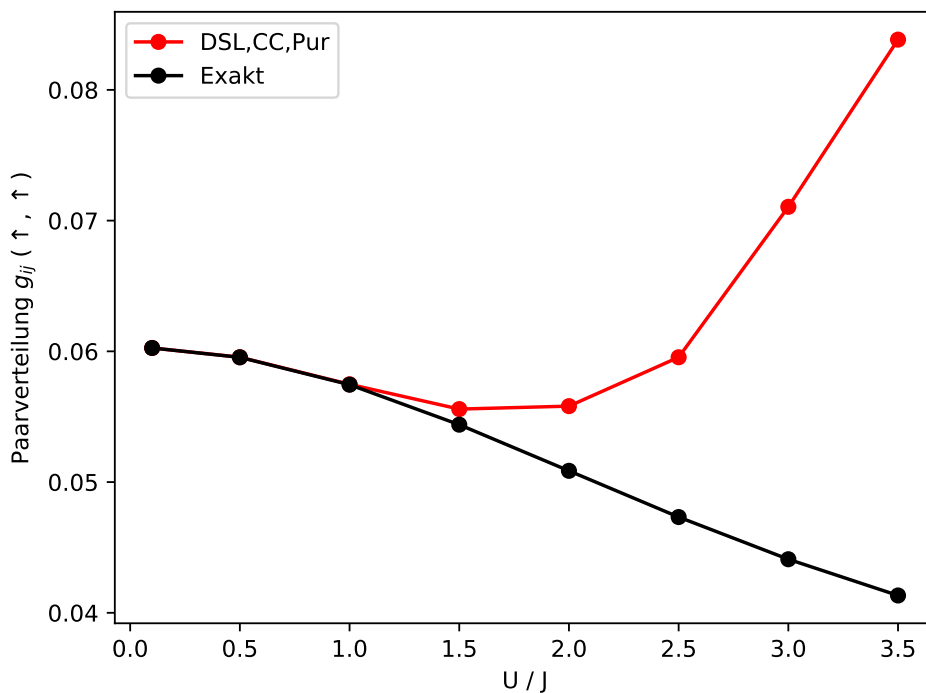


Abbildung 22: Vergleich der Paarverteilung zwischen exakten Daten und der DSL, CC und Pur Näherung, auf dem zweiten Gitterplatz einer Kette mit sechs Gitterpunkten im Grundzustand, für selbe Spins in Bezug auf den ersten Gitterpunkt. Die schwarzen Werte sind die exakten CI Daten und die roten Werte die Daten der DSL, CC und Pur Näherung.

rung, die in der Paarkorrelationsfunktion und auch in dem HF-Anteil auftreten, entsteht ein gänzlich unphysikalisches Verhalten, bei welchem zunächst die Paarverteilung sinkt, ein Minimum bildet und danach weiter stark anwächst. Zu erwarten wäre, dass sich auch dort der antisymmetrische Zustand ausbildet, wie es bei den exakten Daten zu sehen ist. Gleichzeitig ist zu beobachten, dass für anwachsende U die Paarverteilung beim Gitterplatz sechs deutlich schneller abfällt, als sie beim dritten Gitterplatz wächst. Dort kann ein nahezu lineares Verhalten beobachtet werden. Zwischen $U = 1$ und $U = 2$ sowie $U = 2$ und $U = 3$ wächst die Paarverteilung auf dem dritten Gitterplatz um denselben Wert. So ist beim zweiten Gitterpunkt das Wachstum noch schwächer als der lineare Verlauf und damit sogar rückläufig. Die Vermutung liegt nahe, dass sich damit die Summe der Paarverteilung, welche erhalten bleibt, wieder ausgleicht, um weiterhin konstant zu bleiben. Das System balanciert damit die nach außen zu stark anwachsenden Korrelationen auf Kosten eines unphysikalischen Verhaltens auf dem zweiten Gitterplatz aus.

4.5 Magnetisches Moment

Für die Untersuchung des lokalen magnetischen Moments wird zunächst eine Kette mit 20 Gitterpunkten betrachtet, welche im Grundzustand für $U = 1$ berechnet wurde. Abbildung (23) zeigt das magnetische Moment dieser Kette, wobei deutlich zu erkennen ist, dass an den Rändern beim ersten und letzten Gitterpunkt das magnetische Moment im Vergleich zur Mitte erhöht ist. Zwischen den Gitterpunkten 6 und 15 ist das Moment weitestgehend gleich groß. Dieser Effekt des erhöhten magnetischen Moments konnte auch schon in GW Rechnungen für Graphen-Nanoribbons beobachtet werden [5].

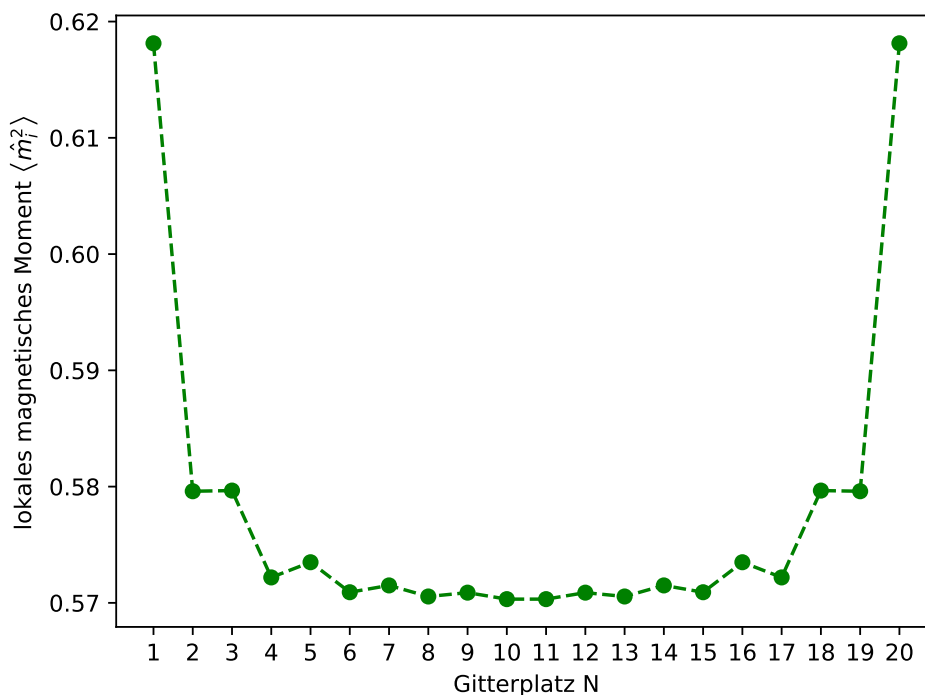


Abbildung 23: Ortsaufgelöster Plot des magnetischen Moments für eine Kette mit 20 Gitterpunkten im Grundzustand bei $U = 1$.

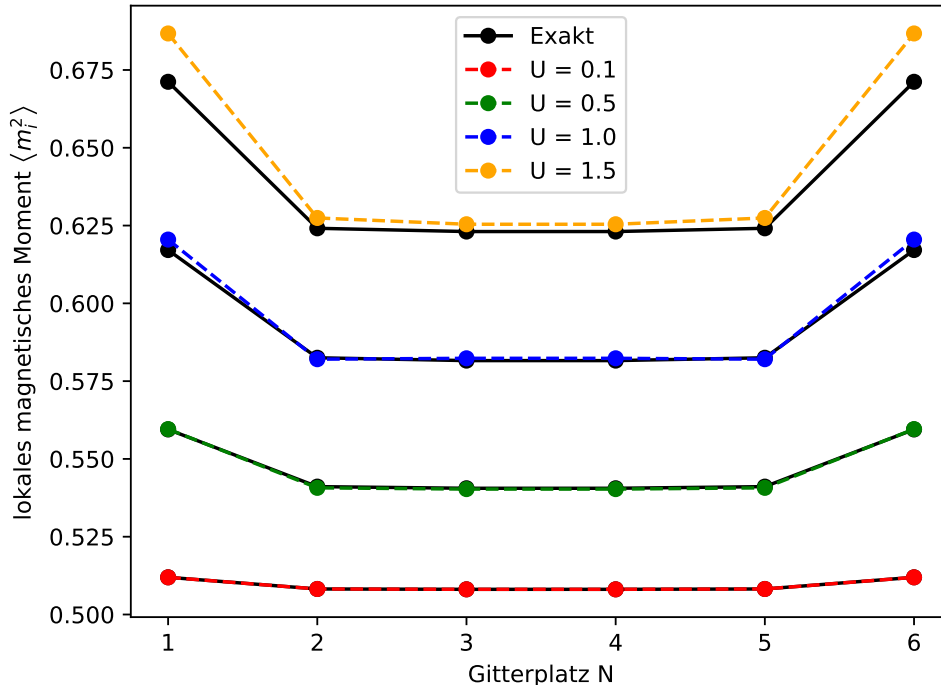


Abbildung 24: Magnetisches Moment für eine Kette mit sechs Gitterpunkten im Grundzustand für verschiedene U (in Einheiten von J). Die farbige gestrichelten Linien und Punkte sind die mit DSL, CC und Pur berechneten Werte und die schwarzen Linien und Punkte die exakten CI Daten.

Die erhöhten Peaks des magnetischen Moments an den Rändern sind durch starke Korrelationseffekte zu erklären. Da das magnetische Moment in Formel (3.89) von der Dichte an dem jeweiligen Gitterpunkt und der Doppelbesetzung abhängt, welche wiederum besonders stark durch Korrelationseffekte beeinflusst werden, kann darauf geschlossen werden, dass besonders an den Rändern diese Effekte auftreten. Die Dichte im System verändert sich in Grundzustandsrechnungen nicht, stattdessen muss die Doppelbesetzung an den Rändern kleiner als in der Mitte des Systems werden. Dies bedeutet, dass bei den überlagerten quantenmechanischen Zuständen, besonders die mit nur einem Spin an den äußeren Gitterpunkten, also $|\uparrow, \dots, \downarrow\rangle$ und $|\downarrow, \dots, \uparrow\rangle$, an Gewicht gewinnen. Der langsam entstehende antiferromagnetische Zustand bildet sich damit also zuerst an den Rändern aus. Die Ursache für diesen Effekt ist topologischer Natur und wird in [5] näher erläutert. Dabei sollte erwähnt werden, dass das *erste magnetische Moment* $\langle \hat{n}_i^\uparrow - \hat{n}_i^\downarrow \rangle$ für alle U konstant null bleibt. Zwar sinken an den Rändern die Doppelbesetzungen, doch dies wird durch die stärker ins Gewicht fallende Zustände mit den einzelnen Spins ausgeglichen, sodass durchgehend n_i^\uparrow und n_i^\downarrow erhalten bleiben. Folglich ist das zweite magnetische Moment auch weitaus interessanter, da es etwas über die Entwicklung der quantenmechanischen Zustände und damit über das Verhältnis zwischen einfach und doppelt besetzten Zuständen aussagt.

Zur weiteren Untersuchung der Genauigkeit wurde ein kleines 1D System bei verschiedenen U betrachtet. In Abbildung (24) ist das magnetische Moment für eine Kette mit

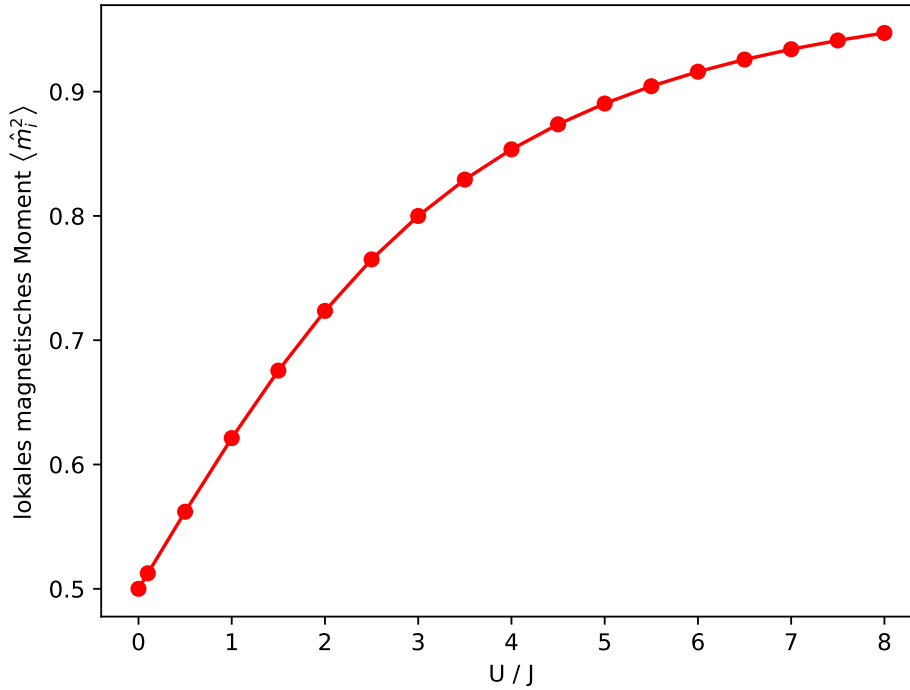


Abbildung 25: Entwicklung des magnetischen Moments eines Hubbard-Dimer im Grundzustand für anwachsende U (in Einheiten von J) mit exakten CI Daten.

sechs Gitterpunkten im Grundzustand für verschiedene U zum einen mit DSL, CC und Pur (farbige Linien) und zum anderen mit den jeweiligen exakten CI Daten (schwarze Linien) abgebildet. Zu erkennen ist, dass für größere U das magnetische Moment überall ansteigt. Dies ist eine Ursache des sich langsam ausbildenden antiferromagnetischen Zustandes, welcher in Kapitel (4.4) für die Paarverteilung schon besprochen wurde. Durch die Spindichtewelle sinkt die Doppelbesetzung überall, da das System einen Zustand anstrebt, in welchem nur abwechselnd unterschiedliche Spinrichtungen vertreten sind. Für $U = 0$ befindet sich das magnetische Moment bei $\langle \hat{m}_i^2 \rangle = 0.5$, da die Doppelbesetzung ohne Korrelationen nur aus dem HF-Teil besteht und dieser konstant 0.5 im Grundzustand ist. Für große U strebt das magnetische Moment $m \rightarrow 1$ an, da die Dichte unverändert bleibt und die Doppelbesetzungen verschwinden. In Abbildung (25) wird der qualitative Verlauf des ansteigenden magnetischen Moments am Beispiels des Hubbard-Dimer (siehe Kapitel (2.2)) verdeutlicht.

Des Weiteren ist in Abbildung (24) zu erkennen, dass für größere U das magnetische Moment an den Rändern schneller ansteigt, als bei den inneren Gitterpunkten. Beim Vergleich mit den CI Daten wird ersichtlich, dass der Fehler bei den inneren Gitterpunkten sehr viel geringer ist als der Fehler an den Rändern und dieser dort anscheinbar deutlich stärker ansteigt. In Abbildung (26) ist zu dieser Kette der relative Fehler in Bezug auf die CI-Daten zum einen auf einem der äußersten und zum anderen auf einem mittleren Gitterplatz für anwachsende U dargestellt. Noch einmal wird deutlich, dass der relative Fehler tatsächlich stärker bei den äußeren Gitterpunkten als bei den inneren anwächst. Gleichzeitig wird erkennbar, dass bei ungefähr $U = 3.0$ ein Plateau entsteht, bei welchem

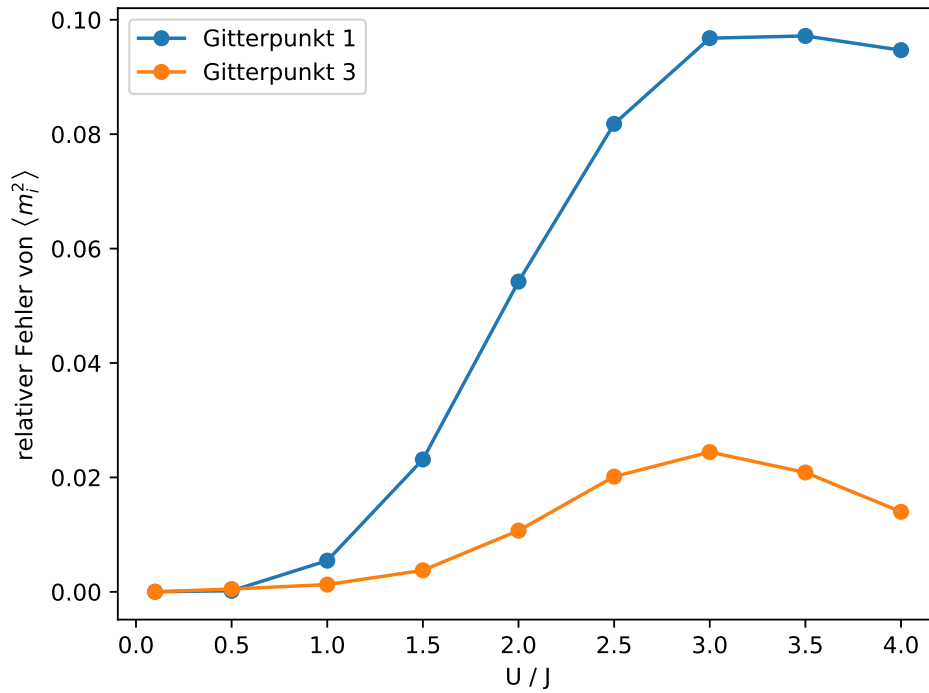


Abbildung 26: Relativer Fehler des magnetischen Moments im Vergleich zu CI Daten für verschiedene U (in Einheiten von J) einer Kette mit sechs Gitterpunkten im Grundzustand. Die blauen Daten stellen den relativen Fehler auf dem ersten und die orangen auf dem dritten Gitterpunkt dar.

der Fehler am größten ist. Für noch größere Wechselwirkungspotentiale fällt dieser wieder ab. Durch die in (25) sichtbare Konvergenz gegen eins, kann der absolute Fehler lediglich einen endlichen Wert annehmen, welcher mit größerem U immer kleiner werden muss. Folglich sinkt auch der relative Fehler. Zusammenfassend kann beobachtet werden, dass sich der Fehler an den Rändern stärker als im Zentrum entwickelt, und bei schwachen, sowie besonders starken Wechselwirkungspotentialen wenig ausgeprägt ist.

5 Fazit und Ausblick

Fazit

In dieser Arbeit wurden verschiedene Einteilchen- und Zweiteilchen-Observablen auf deren Genauigkeit und Effekte bei verschiedenen Wechselwirkungsenergien untersucht. Am Beispiel der Wechselwirkungsenergie und der Gesamtenergie wurde zunächst gezeigt, welchen Einfluss Purification und Contraction Consistency in der DSL Näherung auf Grundzustandsrechnungen haben. Aufbauend wurde mit CC und Pur das lokale magnetische Moment, die Paarverteilung, Paarkorelationsfunktion und die Stromdichte für verschiedene Setups untersucht.

Dabei konnte in dieser Arbeit ein Ausdruck für die Stromdichte in diskreten Gittersystemen abgeleitet werden, welcher den Strom zwischen zwei Gitterpunkten beschreibt und sich aus dem Imaginärteil der Übergangselemente der Zweiteilchen-Dichtematrix berechnen lässt. Mithilfe der Kontinuitätsgleichung konnte eine Methode gefunden werden, um Simulationsschemata mit dem Euler-Verfahren zu vergleichen, um so in dynamischen Systemen Bereiche besonders starker Fehler zu untersuchen. Des Weiteren ist es möglich mithilfe der Stromdichte die Schwerpunktgeschwindigkeit effizient zu berechnen. Dabei zeigt sich, dass für ein Akbari-Setup ein U Plateau entsteht, bei welchem die Schwerpunktgeschwindigkeit konstant bleibt.

Bei der Observable des magnetischen Moments konnte der schon in [5] beobachtete Effekt der starken Korrelationen an Rändern von diskreten Systemen und das dort ansteigende magnetische Moment an einer 1D Kette beobachtet werden. Dabei zeigt sich, dass besonders Fehler zu exakten Werten an diesen Rändern auftreten. Des Weiteren ist ein Plateau für das Wechselwirkungspotential U erkennbar, bei welchem der Fehler des magnetischen Moments ein Maximum erreicht. Die Entstehung eines "antiferromagnetischen" Zustandes bei hohen Wechselwirkungspotentialen im Hubbard-Modell konnte ebenfalls durch Untersuchung des magnetischen Moments beobachtet werden.

Die Paarverteilung und Paarkorrelationsfunktion, welche durch das G1-G2 Schema nun zugänglich gemacht wurden, konnten konkret die Spindichtewelle bzw. den antiferromagnetischen Zustand direkt darstellen. Dabei konnte die Paarverteilung für explizite Spinrichtungen, wie auch für Teilchen ohne spezifischen Spin, berechnet und dargestellt werden. Zudem konnte gezeigt werden, dass besonders für weit entfernte Gitterpunkte der Fehler der Paarkorrelationsfunktion stark ansteigt, was teilweise dazu führt, dass die Korrelationen weit entfernter Teilchen größer wird als für nahe. Weiterhin zeigt sich, dass ohne Wechselwirkungen ein Austauschkorrelationsloch und eine Friedel-Oszillationsartige Struktur sich auch in der Paarverteilung für diskrete Gittersysteme bildet, welche sonst sehr typisch für Fermi-Gase und Fermi-Flüssigkeiten sind. Diese Effekte haben ihren Ursprung im Fock-Teil der Paarverteilung, was zu einem Konkurrieren zwischen den Effekten der Antisymmetrie im Fock-Teil und der Ausbildung einer antiferromagnetischen Phase in der Paarkorrelationsfunktion führt.

Ausblick

Die Auseinandersetzung mit den Observablen in dieser Arbeit entsprechen einer grundlegenden Betrachtung, die noch weiter ausgeführt werden sollte. Dabei sind weitere Untersuchungen hinsichtlich der grundlegenden Eigenschaften von Interesse, genauso wie die Analyse der Observablen bei größeren Systemen:

- Diese Arbeit verwendete explizit das Hubbard-Modell, jedoch gibt es auch noch das sogenannte Pariser-Parr-Pople-Modell (PPP-Modell), welches oft verwendet wird und gute Ergebnisse bei der Beschreibung von Graphen Systemen liefert [43]. Im PPP-Modell ist der Hamiltonoperator weitestgehend identisch mit dem des Hubbard-Modells, wobei im Wechselwirkungsterm das konstante Wechselwirkungspotential U durch ein Matrixelement V_{ij} ausgetauscht wird (mehr zum PPP-Modell siehe [44]). Die Untersuchung der Observablen im PPP-Modell, wie auch der Vergleich der Observablen zwischen diesem und dem Hubbard-Modell, sind von weiterem Interesse.
- Auch höherdimensionale Systeme, wie 2D Gitter, können noch weiter auf Genauigkeit und physikalische Effekte hin untersucht werden.
- Wie in Kapitel (4.5) beschrieben konnten Effekte des lokalen magnetischen Moments schon in Graphen Nanoribbons beobachtet werden. Die Untersuchung von Graphen (Nanoribbons) ist weiterhin ein großes Forschungsgebiet. Folglich sind die betrachteten Observablen in dieser Arbeit, besonders die Stromdichte als Transporteigenschaft, spannend für verschiedene Graphen Systeme und Ausgangspunkt für mögliche Untersuchungen.
- Des Weiteren ist die Untersuchung der Observablen in homogenen Systemen, wie dem freien Elektronengas, von großem Interesse. Die Ableitung der Stromdichte für homogene Systeme in Anhang (A) stellt einen Anfang dar.
- Interessant zu untersuchen ist auch die Observable des Strukturfaktors, welche zunächst im Rahmen eines diskreten, finiten Systems sinnvoll zu definieren ist. So kann vermutlich durch eine diskrete Fouriertransformation über die Paarverteilung der Strukturfaktor gewonnen und untersucht werden.

Literaturverzeichnis

- [1] N. Schlünzen, J.-P. Joost, and M. Bonitz, “Achieving the Scaling Limit for Nonequilibrium Green Functions Simulations,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 124, p. 076601, Feb 2020.
- [2] R. T. Scalettar, “An Introduction to the Hubbard Hamiltonian.” <https://www.cond-mat.de/events/correl16/manuscripts/scalettar.pdf>. Accessed: 12-11-2021.
- [3] S. D. Kerem Y. Camsari, Shuvro Chowdhury, “The Non-Equilibrium Green Function (NEGF) Method.” <https://arxiv.org/abs/2008.01275>, Jan 2021. Accessed: 15-12-2021.
- [4] J.-P. Joost, N. Schlünzen, and M. Bonitz, “G1-G2 scheme: Dramatic acceleration of nonequilibrium Green functions simulations within the Hartree-Fock generalized Kadanoff-Baym ansatz,” *Phys. Rev. B*, vol. 101, p. 245101, Jun 2020.
- [5] J.-P. Joost, A.-P. Jauho, and M. Bonitz, “Correlated Topological States in Graphene Nanoribbon Heterostructures,” *Nano Letters*, vol. 19, no. 12, pp. 9045–9050, 2019.
- [6] F. Schwabl, “Zweite Quantisierung,” in *Quantenmechanik für Fortgeschrittene (QM II)*, pp. 3–32, Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2008.
- [7] T. Fließbach, *Quantenmechanik: Lehrbuch zur Theoretischen Physik III*. Jan 2018.
- [8] J. Kanamori, “Electron Correlation and Ferromagnetism of Transition Metals,” *Progress of Theoretical Physics*, vol. 30, pp. 275–289, Sep 1963.
- [9] M. C. Gutzwiller, “Effect of Correlation on the Ferromagnetism of Transition Metals,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 10, pp. 159–162, Mar 1963.
- [10] J. Hubbard and B. H. Flowers, “Electron correlations in narrow energy bands,” *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, vol. 276, no. 1365, pp. 238–257, 1963.
- [11] F. H. L. Essler, H. Frahm, F. Göhmann, A. Klümper, and V. E. Korepin, *The One-Dimensional Hubbard Model*. Cambridge University Press, 2005.
- [12] R. T. Scalettar, “Elementary Introduction to the Hubbard Model.” <https://scalettar.physics.ucdavis.edu/michigan/hubbard7.pdf>. Accessed: 17-12-2021.
- [13] A. J. Daley, C. Kollath, U. Schollwöck, and G. Vidal, “Time-dependent density-matrix renormalization-group using adaptive effective Hilbert spaces,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2004, p. P04005, Apr 2004.
- [14] J. E. Hirsch, “Two-dimensional Hubbard model: Numerical simulation study,” *Phys. Rev. B*, vol. 31, pp. 4403–4419, Apr 1985.
- [15] E. Dagotto, “Correlated electrons in high-temperature superconductors,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 66, pp. 763–840, Jul 1994.
- [16] J.-P. Joost, “Spectral Properties of Excited Hubbard Clusters: A Nonequilibrium Green Functions Approach,” Master thesis (Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Germany, Dec. 2017).

- [17] N. Schlünzen, J.-P. Joost, F. Heidrich-Meisner, and M. Bonitz, “Nonequilibrium dynamics in the one-dimensional Fermi-Hubbard model: Comparison of the nonequilibrium Green-functions approach and the density matrix renormalization group method,” *Phys. Rev. B*, vol. 95, p. 165139, Apr 2017.
- [18] K. Balzer and M. Bonitz, “Nonequilibrium Green’s Functions,” in *Nonequilibrium Green’s Functions Approach to Inhomogeneous Systems*, pp. 15–38, Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2013.
- [19] L. V. Keldysh, “Diagram technique for nonequilibrium processes,” *Sov. Phys. JETP*, vol. 20, p. 1018, 1965. [*Zh. Eksp. Theor. Fiz.* **47**, 1515 (1964)].
- [20] L. Kadanoff and G. Baym, *Quantum Statistical Mechanics: Green’s Function Methods in Equilibrium and Nonequilibrium Problems*. Mar 2018.
- [21] M. Bonitz, “The method of reduced density operators,” in *Quantum Kinetic Theory*, pp. 29–69, Cham: Springer International Publishing, 2016.
- [22] P. Lipavský, V. Špička, and B. Velický, “Generalized Kadanoff-Baym ansatz for deriving quantum transport equations,” *Phys. Rev. B*, vol. 34, pp. 6933–6942, Nov 1986.
- [23] N. Schlünzen and M. Bonitz, “Nonequilibrium Green Functions Approach to Strongly Correlated Fermions in Lattice Systems,” *Contributions to Plasma Physics*, vol. 56, no. 1, pp. 5–91, 2016.
- [24] F. Lackner, “Time-dependent two-particle reduced density matrix theory: application to multi-electron atoms and molecules in strong laser pulses,” Doctoral thesis (Technischen Universität Wien, Germany, 2017).
- [25] J.-P. Joost, N. Schlünzen, H. Ohldag, M. Bonitz, F. Lackner and I. Brezinova, to be published.
- [26] D. A. Mazziotti, “Purification of correlated reduced density matrices,” *Phys. Rev. E*, vol. 65, p. 026704, Jan 2002.
- [27] M. Bonitz, “Introduction to Quantum Field Theory and Quantum Statistics.” unveröffentlichtes Skript, 2022.
- [28] M. Nowakowski, “The quantum mechanical current of the Pauli equation,” *American Journal of Physics*, vol. 67, p. 916–919, Oct 1999.
- [29] G. Stefanucci and R. van Leeuwen, *Nonequilibrium Many-Body Theory of Quantum Systems: A Modern Introduction*. Cambridge University Press, 2013.
- [30] M. Holzmann and Y. Castin, “Pair correlation function of an inhomogeneous interacting Bose-Einstein condensate,” *The European Physical Journal D - Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics*, vol. 7, pp. 425–432, 1999.
- [31] G. Giuliani and G. Vignale, *Quantum Theory of the Electron Liquid*. Cambridge University Press, 2005.
- [32] N. Schlünzen and M. Bonitz, “Nonequilibrium Green Functions Approach to Strongly Correlated Fermions in Lattice Systems,” *Contributions To Plasma Physics*, vol. 56, pp. 5–91, 2016.

- [33] J.-P. Joost, N. Schlünzen, S. Hese, M. Bonitz, C. Verdozzi, P. Schmitteckert, and M. Hopjan, “Löwdin’s symmetry dilemma within Green functions theory for the one-dimensional Hubbard model,” *Contributions to Plasma Physics*, 2021. e202000220 ctp.202000220.
- [34] E. Hairer, S. P. Nørsett, and G. Wanner, “Runge-Kutta and Extrapolation Methods,” in *Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems*, pp. 127–301, Springer Berlin Heidelberg, 1987.
- [35] M. Watanabe and W. P. Reinhardt, “Direct dynamical calculation of entropy and free energy by adiabatic switching,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 65, pp. 3301–3304, Dec 1990.
- [36] N. Schlünzen, S. Hermanns, M. Scharnke, and M. Bonitz, “Ultrafast dynamics of strongly correlated fermions—nonequilibrium Green functions and selfenergy approximations,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 32, p. 103001, Dec 2019.
- [37] N. Schlünzen, S. Hermanns, M. Bonitz, and C. Verdozzi, “Dynamics of strongly correlated fermions: Ab initio results for two and three dimensions,” *Phys. Rev. B*, vol. 93, p. 035107, Jan 2016.
- [38] J. Friedel, “Metallic alloys,” *Il Nuovo Cimento (1955-1965)*, vol. 7, pp. 287–311, Sep 1958.
- [39] R. Gross and A. Marx, *Festkörperphysik*. De Gruyter Oldenbourg, 2014.
- [40] F. M. D. Pellegrino, G. G. N. Angilella, N. H. March, and R. Pucci, “Statistical correlations in an ideal gas of particles obeying fractional exclusion statistics,” *Phys. Rev. E*, vol. 76, p. 061123, Dec 2007.
- [41] C. Makait, “Vereinfachte Tight-Binding-Modellierung des Ladungstransferprozesses bei Streuung von H⁺ an Al,” Bachelor thesis (Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Germany, Sept. 2018).
- [42] W. Demtröder, “Elektronen im Festkörper,” in *Experimentalphysik 3: Atome, Moleküle und Festkörper*, pp. 421–443, Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2016.
- [43] K. Gundra and A. Shukla, “Band structure and optical absorption in multilayer armchair graphene nanoribbons: A Pariser-Parr-Pople model study,” *Phys. Rev. B*, vol. 84, p. 075442, Aug 2011.
- [44] K. Gundra and A. Shukla, “A Pariser–Parr–Pople Model Hamiltonian-Based Approach to the Electronic Structure and Optical Properties of Graphene Nanostructures,” in *Topological Modelling of Nanostructures and Extended Systems* (A. R. Ashrafi, F. Cataldo, A. Iranmanesh, and O. Ori, eds.), pp. 199–227, Dordrecht: Springer Netherlands, 2013.
- [45] G. M. Wysin, “Probability Current and Current Operators in Quantum Mechanics.” <https://www.phys.ksu.edu/personal/wysin/notes/qmcurrent.pdf>, 2011. Accessed: 12-11-2021.
- [46] HilberTraum, “Euler two steps.” https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Euler_two_steps.svg, 2017. Accessed: 12-01-2022.

-
- [47] HilberTraum, “Runge-Kutta slopes.” https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Runge-Kutta_slopes.svg, 2017. Accessed: 12-01-2022.
- [48] L. Euler, *Institutionum calculi integralis*. No. Bd. 1 in *Institutionum calculi integralis*, imp. Acad. imp. Saent., 1768.
- [49] W. Dahmen and A. Reusken, “Gewöhnliche differentialgleichungen,” in *Numerik für Ingenieure und Naturwissenschaftler*, pp. 375–454, Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2008.

Anhang

A) Herleitung der Stromdichte für homogene Systeme

Für die Spin unabhängige Wahrscheinlichkeitsstromdichte gilt

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -\frac{i\hbar}{2M} (\Psi^\dagger \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^\dagger). \quad (5.1)$$

Um die Stromdichte im Ensemble-Erwartungswert zu bestimmen, muss diese als Operator vorliegen, was mit (5.1) jedoch nicht gegeben ist. Die Stromdichte ist im Allgemeinen definiert über $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$, wobei ρ die Dichte und \mathbf{v} die Geschwindigkeit ist. Aus dieser Definition lässt sich \mathbf{j} so schreiben, dass ein Stromdichte Operator definiert werden kann [45]:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \text{Re} \left[\Psi^* \frac{\hat{\mathbf{P}}}{M} \Psi \right] = \Psi^* \hat{\mathbf{j}} \Psi. \quad (5.2)$$

Dabei ist $\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar \nabla$ gilt und $\hat{\mathbf{j}}$ der Stromdichteoperator ist. $\hat{\mathbf{P}}/M$, mit der Masse M , erzeugt die Geschwindigkeit aus der Wellenfunktion und durch $\Psi^* \Psi$ wird die Dichte gebildet. Dabei wird noch der Realteil genommen, damit die Stromdichte als Observable stets reell ist. Der Ausdruck (5.2) wird nun erweitert, indem die Eigenschaft $\text{Re}[z] = \frac{z+z^*}{2}$ von komplexen Zahlen verwendet wird:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2M} (\Psi^* [\hat{\mathbf{P}} \Psi] + \Psi [\hat{\mathbf{P}} \Psi]^*). \quad (5.3)$$

In Dirac-Notation kann dies umgeschrieben werden zu

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2M} (\langle \Psi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{P}} | \Psi \rangle + \langle \mathbf{r} | \Psi \rangle [\langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{P}} | \Psi \rangle]^*) \\ &= \frac{1}{2M} (\langle \Psi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{P}} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{\mathbf{P}}^\dagger | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \Psi \rangle). \end{aligned} \quad (5.4)$$

Damit kann der Stromdichte Operator $\hat{\mathbf{j}}$ identifiziert werden als

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2M} (|\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{P}} + \hat{\mathbf{P}}^\dagger |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r} |). \quad (5.5)$$

Aufgrund der Hermitizität von $\hat{\mathbf{P}}$ ist ebenfalls der Ausdruck (5.5) für die Stromdichte hermitesch. Hier ist es ebenfalls möglich den Operator für minimale Kopplung anzugeben ($\hat{\mathbf{P}} \rightarrow \hat{\boldsymbol{\pi}} = \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}}$), nämlich

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2M} (|\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r} | \hat{\boldsymbol{\pi}} + \hat{\boldsymbol{\pi}}^\dagger |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r} |). \quad (5.6)$$

Im Folgenden wird jedoch ohne minimale Kopplung, also mit $\hat{\mathbf{A}} = \hat{0}$ gerechnet.

Um die Stromdichte zu berechnen, muss die Spur $\text{Tr}[\hat{\mathbf{j}} \hat{n}]$ ausgewertet werden. Für den

Dichteoperator im k -Raum

$$\hat{n}_{\mathbf{k}} = \sum_i p_i |\mathbf{k}_i\rangle \langle \mathbf{k}_i| \quad (5.7)$$

kann das Produkt aus $\hat{\mathbf{j}}$ und $\hat{n}_{\mathbf{k}}$ berechnet werden zu

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})\hat{n}_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{2M} \left(\sum_i p_i (|\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| \hbar \mathbf{k}_i |\mathbf{k}_i\rangle \langle \mathbf{k}_i| + \hat{\mathbf{P}} |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| \mathbf{k}_i \langle \mathbf{k}_i|) \right) \\ &= \frac{1}{2M} \left(\sum_i p_i \langle \mathbf{r}|\mathbf{k}_i\rangle (\hbar \mathbf{k}_i + \hat{\mathbf{P}}) |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{k}_i| \right). \end{aligned} \quad (5.8)$$

Dabei sind p_i die statistischen Gewichte des Dichteoperators. Wenn die Spur im k -Raum mit $Tr[\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})\hat{n}_{\mathbf{k}}] = \sum_k \langle k|\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})\hat{n}_{\mathbf{k}}|k\rangle$ ausgeführt wird, bleiben nur die Terme übrig, bei denen die k Vektoren übereinstimmen. Da $\hat{\mathbf{P}}$ hermitesch ist, kann dieser auch auf den bra Zustand wirken.

$$\begin{aligned} Tr[\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})\hat{n}_{\mathbf{k}}] &= \frac{1}{2M} \left(\sum_{\mathbf{k}} \sum_i p_i (\langle \mathbf{r}|\mathbf{k}_i\rangle \langle \mathbf{k}|\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{k}_i|\mathbf{k}\rangle \hbar \mathbf{k}_i + \langle \mathbf{r}|\mathbf{k}_i\rangle \langle \mathbf{k}|\hat{\mathbf{P}}|\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{k}_i|\mathbf{k}\rangle) \right) \\ &= \frac{1}{2M} \left(\sum_i p_i (|\langle \mathbf{r}|\mathbf{k}_i\rangle|^2 (\hbar \mathbf{k}_i + \hbar \mathbf{k}_i)) \right) \\ &= \frac{\hbar}{M} \sum_i p_i (|\langle \mathbf{r}|\mathbf{k}_i\rangle|^2 \mathbf{k}_i) \end{aligned} \quad (5.9)$$

Die k Eigenfunktion in der Ortseigenbasis $\langle \mathbf{r}|\mathbf{k}\rangle$ ergibt sich aus

$$\langle \mathbf{r}|\mathbf{k}\rangle = C \cdot e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (5.10)$$

Die Konstante C kann aus der Definition der ebenen Welle bestimmt werden durch

$$\Psi = C \cdot e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}. \quad (5.11)$$

Für \mathbf{j} gilt mit dem Beispiel der ebenen Wellen

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \text{Re} \left[\Psi^* \frac{\hat{\mathbf{P}}}{M} \Psi \right] = \frac{\hbar \mathbf{k}}{M} |C|^2. \quad (5.12)$$

Durch Vergleich mit der allgemeinen Definition der Stromdichte $\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$, wird ersichtlich, dass die Teilchendichte $\rho = |C|^2$ (für ein Teilchen) ist. Die Konstante C berechnet sich dann zu

$$C = \frac{1}{\sqrt{V}}. \quad (5.13)$$

Einsetzen von Ausdruck (5.10) mit der Konstante C in (5.9), liefert

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{MV} \sum_i n_{k_i} \cdot \mathbf{k}_i, \quad (5.14)$$

wobei n_{k_i} dem Matrixelement der Dichtematrix im k -Raum entspricht. Die k -Verteilung kann schließlich durch Fouriertransformation gewonnen werden:

$$n_k = \frac{1}{N} \sum_{ij} e^{-ik(i-j)} n_{ij}. \quad (5.15)$$

B) Euler- und klassisches Runge-Kutta-Verfahren

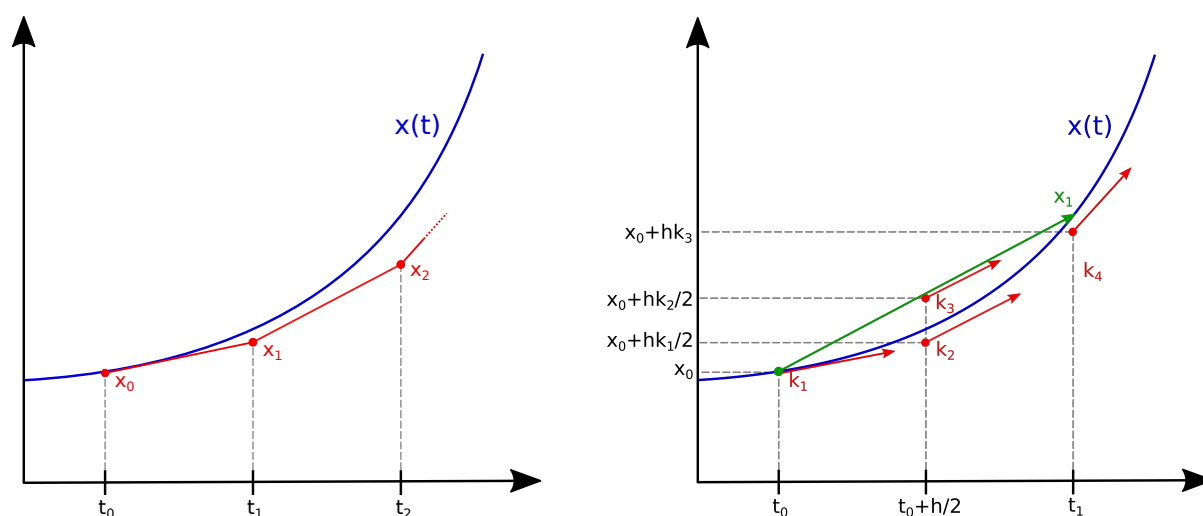


Abbildung 27: **Links:** Euler-Verfahren mit zwei Schritten. Die blaue Linie kennzeichnet die exakten Werte für eine Funktion $x(t)$, die roten Punkte zeigen die durch das Euler-Verfahren berechneten Werte. **Rechts:** Runge-Kutta 4 Verfahren mit einem Schritt. Die blaue Linie kennzeichnet die exakten Werte für eine Funktion $x(t)$, der grüne Pfeil den durch RK4 berechneten Wert und die roten Pfeile kennzeichnen die Zwischenberechnungen k_1, k_2, k_3 und k_4 , die RK4 verwendet. Eigene Darstellung nach [46] und [47].

Das *explizite Euler-Verfahren* ist das einfachste numerische Verfahren zur Lösung von Differentialgleichungen mit Anfangswerten, das 1768 von Leonhard Euler entwickelt wurde [48].

Sei ein Anfangswertproblem gegeben durch

$$x(t_0) = x_0, \quad \dot{x} = f(t, x). \quad (5.16)$$

Die Zeitschritte werden berechnet durch

$$t_i = t_0 + i \cdot h, \quad (5.17)$$

wobei h die Schrittweite ist und $i \in \mathbb{N}_0$. Werte für x können nun berechnet werden über

$$x_{i+1} = x_i + h \cdot f(t_i, x_i). \quad (5.18)$$

Diese approximierten Werte werden genauer, je kleiner h wird. Als Verfahren erster Ordnung fällt der globale Fehler dabei linear mit h , bedeutet halbe Schrittweite führt zu einem halben Fehler. Abbildung (27) zeigt links die Ausführung des Euler-Verfahrens für zwei Schritte der dargestellten Funktion $x(t)$. Zu erkennen ist, dass die Werte schon nach wenigen Schritten stark von der tatsächlichen Kurve abweichen.

Das *klassische Runge-Kutta-Verfahren* (oft auch kurz RK4 genannt) ist ein vierstufiges

Verfahren zur Lösung von gewöhnlichen Differentialgleichungen mit Anfangswerten. Da RK4 ein Verfahren der vierten Ordnung ist, kann es Lösungen bis zur vierten Potenz exakt berechnen. Sei wieder ein Anfangswertproblem wie in (5.16) gegeben, dann können die x -Werte berechnet werden über

$$x_{i+1} = x_i + h \cdot \Phi(t_i, x_i, h, f). \quad (5.19)$$

Dabei ist Φ eine angepasste Steigung, die folgendermaßen definiert wird:

$$\Phi(t_i, x_i, h, f) = \frac{1}{6}k_1 + \frac{1}{3}k_2 + \frac{1}{3}k_3 + \frac{1}{6}k_4. \quad (5.20)$$

Die Parameter k_1, k_2, k_3 und k_4 sind definiert durch

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t_i, x_i), \\ k_2 &= f(t_i + h/2, x_i + h/2 \cdot k_1), \\ k_3 &= f(t_i + h/2, x_i + h/2 \cdot k_2), \\ k_4 &= f(t_i + h, x_i + h \cdot k_3). \end{aligned}$$

Dabei entspricht k_1 gerade der Ableitung an der Stelle x_i und damit auch der Steigung, die für das Euler-Verfahren verwendet wird. Es ist damit notwendig, in jedem Propagationsschritt vier Auswertungen der Funktion f zu berechnen. Abbildung (27) rechts zeigt, wie das RK4 Verfahren funktioniert. Die roten Pfeile stellen die berechneten k Werte zu den jeweiligen Zeitwerten dar, an welchen die Funktionen von f ausgewertet werden. Zusammen wird die angepasste Steigung berechnet, dargestellt durch den grünen Pfeil. Als Verfahren vierter Ordnung fällt der globale Fehler mit der vierten Potenz von h , bedeutet halbe Schrittweite führt zu einem sechzehntel Fehler. Für mehr Informationen zum Euler- und Runge-Kutta-Verfahren sei auf [34, 49] verwiesen.

C) Analytische Berechnung der Paarverteilung

Die Paarverteilung bei einem Wechselwirkungspotential von $U = 0$ kann für eine finite 1D Kette analytisch berechnet werden. Dazu kann die Formel (3.67) verwendet werden:

$$g_{ij}^{(0)} = 1 - \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \frac{|\langle \hat{c}_{j,\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma_2} \rangle|^2}{n_i n_j}. \quad (5.21)$$

Sei $\{|\lambda\rangle\}$ eine allgemeine Basis mit den Operatoren \hat{c}_λ^\dagger und \hat{c}_λ , dann kann ein Basiswechsel für die Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren durchgeführt werden [6]:

$$\hat{c}_\lambda^\dagger = \sum_{\tilde{i}} \langle \tilde{i} | \lambda \rangle \hat{c}_{\tilde{i}}^\dagger, \quad \hat{c}_\lambda = \sum_{\tilde{i}} \langle \lambda | \tilde{i} \rangle \hat{c}_{\tilde{i}}. \quad (5.22)$$

Dabei ist eine andere Basis $\{|\tilde{i}\rangle\}$ und die Operatoren $\hat{c}_{\tilde{i}}^\dagger$ und $\hat{c}_{\tilde{i}}$ gegeben. Nun kann (5.22) verwendet werden, um einen Basiswechsel von der Hubbardbasis $\{|j, \sigma\rangle\}$ mit dem Spin σ zur Energiebasis $\{|E, \sigma\rangle\}$ durchzuführen.

$$\hat{c}_{j,\sigma}^\dagger = \sum_{E, \sigma'} \langle E, \sigma' | j, \sigma \rangle \hat{c}_{E, \sigma'}^\dagger, \quad \hat{c}_{i,\sigma} = \sum_{E, \sigma'} \langle i, \sigma | E, \sigma' \rangle \hat{c}_{E, \sigma'} \quad (5.23)$$

Die Erzeugung- und Vernichtungs-Operatoren aus (5.23) eingesetzt in (5.21) ergeben

$$g_{ij}^{(0)} = 1 - \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \frac{|\sum_{E_1, E_2} \langle i, \sigma_1 | E_1, \sigma_1 \rangle \langle E_2, \sigma_2 | j, \sigma_2 \rangle \langle \hat{c}_{E_2, \sigma_2}^\dagger \hat{c}_{E_1, \sigma_1} \rangle|^2}{n_i n_j}. \quad (5.24)$$

Der Ausdruck $\langle \hat{c}_{E_2, \sigma_2}^\dagger \hat{c}_{E_1, \sigma_1} \rangle$ berechnet sich zu

$$\langle \hat{c}_{E_2, \sigma_2}^\dagger \hat{c}_{E_1, \sigma_1} \rangle = \Theta(E_F - E_1) \Theta(E_F - E_2) \delta_{E_1 E_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_1}. \quad (5.25)$$

Dabei ist E_F die Fermi-Energie und Θ die Heaviside-Funktion⁴. Der Ausdruck (5.25) eingesetzt in (5.24) ergibt die Formel

$$g_{ij}^{(0)} = 1 - \sum_{\sigma} \frac{|\sum_{E \leq E_F} \langle i, \sigma | E, \sigma \rangle \langle E, \sigma | j, \sigma \rangle|^2}{n_i n_j}. \quad (5.26)$$

⁴Die Heaviside-Funktion ist definiert als $\Theta : \mathbb{R} \rightarrow \{0, 1\}; x \mapsto \begin{cases} 0 & : x < 0 \\ 1 & : x \geq 0 \end{cases}$.

Die Terme mit $\langle i, \sigma | E, \sigma \rangle$ und $\langle E, \sigma | j, \sigma \rangle$ können aus den Eigenvektoren in der Energiebasis mit dem Hubbard-Hamiltonoperator für $U = 0$ in Matrix-Darstellung gewonnen werden:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & J & 0 & \dots & 0 & 0 \\ J & 0 & J & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & J & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & J \\ 0 & 0 & 0 & \dots & J & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.27)$$

Es gilt $\hat{H} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ mit einer Gittergröße N für reelle J . Die Eigenvektoren (ohne Normierung) für diese Matrix zu den Energie-Eigenwerten ϵ_m ergeben sich zu [41]

$$x_m = \left(\sin\left(\frac{\pi}{N+1}m\right), \sin\left(2\frac{\pi}{N+1}m\right), \dots, \sin\left((N-1)\frac{\pi}{N+1}m\right), \sin\left(N\frac{\pi}{N+1}m\right) \right). \quad (5.28)$$

Die Einträge von (5.28) sind stets reell, sodass unter Berücksichtigung der Spin-Symmetrie Ausdruck (5.26) geschrieben werden kann als

$$g_{ij}^{(0)} = 1 - 2 \left(\sum_{E_m \leq E_F} k^2 \cdot \sin\left(\frac{\pi}{N+1} \cdot i \cdot m\right) \sin\left(\frac{\pi}{N+1} \cdot j \cdot m\right) \right)^2. \quad (5.29)$$

Dabei wurde ausgenutzt, dass im Grundzustand $n_i = n_j = 1$ gilt. Die Normierungskonstante k berechnet sich durch

$$k = \frac{1}{\sqrt{\sum_i^N \sin^2\left(\frac{\pi}{N+1}i\right)}}. \quad (5.30)$$

D) Berechnung der Schwerpunktgeschwindigkeit aus der Stromdichte

Die Schwerpunktgeschwindigkeit einer 1D-Kette mit N_{lat} Gitterpunkten kann durch die in (3.39) definierte Stromdichte zwischen zwei Gitterpunkten berechnet werden. Die Schwerpunktskoordinate R wird definiert durch

$$R = \frac{\sum_i r_i \cdot n_{i,tot}}{N}. \quad (5.31)$$

Dabei ist $N = N^\uparrow + N^\downarrow$ die Gesamtteilchenzahl, bestehend aus der Teilchenzahl für Spin-up Teilchen N^\uparrow und für Spin-down Teilchen N^\downarrow , sowie r_i die Position des i -ten Gitterpunktes und $n_{i,tot} = n_i^\uparrow + n_i^\downarrow$ die Gesamtdichte auf dem Gitterpunkt i .

Die Schwerpunktgeschwindigkeit V berechnet sich durch

$$V = \frac{d}{dt} R = \frac{\sum_i r_i \frac{d}{dt} n_{i,tot}}{N}. \quad (5.32)$$

Für spin-restricted Rechnungen (mehr dazu siehe Kapitel (4.1)) gilt der Zusammenhang $n_i^\uparrow = n_i^\downarrow$, wodurch sich die Schwerpunktgeschwindigkeit zu

$$V = 2 \frac{\sum_i r_i \frac{d}{dt} n_i^\uparrow}{N} \quad (5.33)$$

vereinfacht. Die zeitliche Ableitung der Dichte kann durch die Kontinuitätsgleichung $\frac{\partial}{\partial t} n + \nabla j = 0$ bestimmt werden. Dabei kann der Gradient der Stromdichte in einem diskreten System berechnet werden durch (3.41). In einer 1D-Kette ergibt sich für ∇j_i^α

$$\nabla j_i^\alpha = \begin{cases} j_{1,2}^\alpha & \text{für } i = 1 \\ j_{N_{lat}, N_{lat}-1}^\alpha & \text{für } i = N_{lat} \\ j_{i,i+1}^\alpha + j_{i,i-1}^\alpha & \text{sonst} \end{cases} \quad (5.34)$$

Damit lässt sich Gleichung (5.33) weiter umschreiben zu

$$\begin{aligned} V &= -2 \frac{\sum_i r_i \nabla j_i^\uparrow}{N} \\ &= -2 \frac{r_1 j_{1,2}^\uparrow + r_2 (j_{2,3}^\uparrow + j_{2,1}^\uparrow) + \dots + r_{N_{lat}-1} (j_{N_{lat}-1, N_{lat}}^\uparrow + j_{N_{lat}-1, N_{lat}-2}^\uparrow) + r_{N_{lat}} j_{N_{lat}, N_{lat}-1}^\uparrow}{N}. \end{aligned} \quad (5.35)$$

Durch die Definition (3.41) folgt sofort die Relation $j_{l,k}^\uparrow = -j_{k,l}^\uparrow$ für alle l und k . Folglich ergibt sich (5.35) zu

$$V = -2 \frac{j_{1,2}^\uparrow (r_1 - r_2) + \dots + j_{N_{lat}-1, N_{lat}}^\uparrow (r_{N_{lat}-1} - r_{N_{lat}})}{N}. \quad (5.36)$$

Für äquidistante Gitterabstände a gilt $r_{i+1} - r_i = a$, sodass sich Gleichung (5.36) drastisch vereinfacht zu

$$V = 2 \frac{a}{N} \sum_{i=1}^{N_{\text{lat}}-1} j_{i,i+1}^{\uparrow}. \quad (5.37)$$

Die Schwerpunktgeschwindigkeit kann also durch die Summe der gerichteten Stromdichten entlang der Kette berechnet werden.

Danksagung

Ich möchte mich zuerst bei Prof. Dr. Michael Bonitz für die Möglichkeit, in seiner Arbeitsgruppe meine Bachelorarbeit in einem solchen forschungsnahen Thema zu schreiben, bedanken.

Des Weiteren möchte ich mich besonders bei Jan-Philip Joost für die unglaublich gute Betreuung und Unterstützung bei der Arbeit bedanken, sowie auch bei Christopher Makait, welcher mir bei einigen Fragen gut weiter geholfen hat.

Ich möchte mich außerdem bei allen bedanken, die mir bei der Fehlersuche geholfen haben!

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig und ohne fremde Hilfe angefertigt und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.

Weiterhin versichere ich, dass diese Arbeit noch nicht als Abschlussarbeit an anderer Stelle vorgelegen hat.

Ort, Datum

Unterschrift

