

Kurzfassung der Dissertation

Name des Kandidaten: Patrick Kappl
Namen der Prüfer: Karsten Held, Alexander Lichtenstein, Erik Koch
Titel der Dissertation: Three-particle correlations and where to find them

Stark korrelierte Elektronensysteme bergen spannende und interessante Physik aber auch große theoretische und numerische Herausforderungen. Unabhängige (Quasi-)Teilchen reichen nicht mehr aus um sie zu beschreiben und Vertexkorrekturen, wie sie in der Sprache der Feynman-Diagrammatik heißen, müssen berücksichtigt werden. Bisher sind solche Korrekturen weitestgehend nur auf dem Ein- und Zweiteilchenniveau untersucht worden. Die vorliegende Dissertation blickt jedoch über diesen Tellerrand hinaus und in das Reich der elektronischen Korrelationen der Dreiteilchendiagramme. Dafür werden die Terminologie und die Konzepte, die bereits vom Zweiteilchenniveau bekannt sind, auf drei Teilchen verallgemeinert. Die diagrammatische Darstellung und Zerlegung der Dreiteilchen-Green'schen-Funktion werden untersucht und der volle, verbundene Dreiteilchenvertex wird eingeführt. Weiters wird die Entwicklung der Dreiteilchen-Green'schen-Funktion bezüglich dem vollen Zweiteilchenvertex vorgestellt und die ersten Terme werden berechnet.

Eine Möglichkeit um die Numerik zu vereinfachen ist es, dass wir uns auf bosonische Dreiteilchenkorrelatoren beschränken. Diese haben nur zwei anstatt fünf Frequenz- oder Zeitargumente. Viel wichtiger ist jedoch, dass sie für die Berechnung nichtlinearer Antwortfunktionen verwendet werden können und somit eine physikalische Anwendung für Dreiteilchenkorrekturen darstellen. Mithilfe von numerischen Simulationen werden für ein Anderson-Impurity-Modell und ein Hubbard-Modell Parameterbereiche gesucht in denen die Antwortfunktionen in zweiter Ordnung in den externen Feldern möglichst groß sind. Wie sich herausstellt, sind einfache Approximation die nur aus Green'schen Funktionen bestehen in diesen Bereichen nicht ausreichend. Echte Dreiteilchenkorrekturen müssen berücksichtigt werden.

Im nächsten Kapitel liegt der Fokus auf Dreiteilchenleitern. Nach der Verallgemeinerung der Bethe-Salpeter-Gleichung auf drei Teilchen, wird eine Approximation für die Dreiteilchenleiter vorgestellt. Diese basiert auf einer geometrischen Reihe von irreduziblen Zweiteilchenvertices und Green'schen Funktionslinien. Leider bleiben die numerischen Ergebnisse, die für ein Anderson-Impurity-Modell berechnet wurden, hinter den Erwartungen. Sie sind nur qualitativ gut und das bei kleinen Werten der lokalen Coulomb-Wechselwirkung.

Schließlich wird noch die statistische Fehlerschätzung bei der Weiterverarbeitung von Quantum-Monte-Carlo-Größen untersucht. Genauer gesagt wird die Fehlerfortpflanzung durch diagrammatische Gleichungen am Ein- und Zweiteilchenniveau analysiert. Dies steht nicht in direkter Verbindung zu Dreiteilchenkorrelationen, sondern basiert auf einem früheren PhD-Projekt des Autors. Da jedoch die meisten numerischen Ergebnisse dieser Dissertation auf Berechnungen mit der dynamischen Molekularfeld-Theorie aufbauen, stellt sich die Fehlerschätzung für die Selbstenergie im Allgemeinen als äußerst nützlich heraus.