Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Theorie der Kondensierten Materie

Übungen zur Theorie der Kondensierten Materie II SS 11

Prof. A. Mirlin

Dr. P. Schmitteckert, M. Schütt

Blatt 11

Abgabe 30.06.11, 14:00

1. Der Zusammenhang zwischen Anderson- und Kondo-Modell (30 Punkte)

In dieser Aufgabe werden wir den Zusammenhang zweier Modelle aufzeigen und deren physikalischen Eigenschaften diskutieren. Wir beginnen damit, das Anderson-Modell zu diskutieren,

$$H = H_0 + H_1, \quad H_0 = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k n_{k,\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_d n_{d,\sigma} + U n_{d,\uparrow} n_{d,\downarrow}, \quad H_1 = \sum_{k,\sigma} V_k c^\dagger_{k,\sigma} d_\sigma + V_k^* d^\dagger_\sigma c_{k,\sigma} \tag{1}$$

Hierbei sind $c_{k,\sigma}$, $c^\dagger_{k,\sigma}$ die Fermi-Operatoren eines Drahtes und d_σ,$d^\dagger_\sigma$ die Fermi-Operatoren eines atomaren Orbitals, das über H_1 mit dem Draht hybridisiert. Wie üblich sind $n_{k,\sigma} = c^\dagger_{k,\sigma} c_{k,\sigma}$ und $n_{d,\sigma} = d^\dagger_\sigma d_\sigma$ die Dichte-Operatoren für den Draht und das atomare Orbital.

Abbildung 1: Schematische Darstellung eines atomaren Orbitals gekoppelt an einen Draht.

(a) Erklären Sie den Zusammenhang von Gleichung (1) mit Bild 1.

(b) Bestimmen Sie im ungestörten Fall ($H_1 = 0$) die möglichen Energieniveaus des atomaren Orbitals für $U \simeq 2|\epsilon_d|$. Überlegen Sie sich anschließend, wie sich die Energie des atomaren Orbitals ändern kann, wenn genau ein, von H_1 induzierter, Wechselwirkungsprozess stattfindet. Erklären Sie Ihre Beobachtung.
Hinweis: Atomare Orbitale haben eine Bindungsenergie. Nehmen Sie daher an, dass $\epsilon_d \ll 0$ *gilt.*

Im nächsten Schritt werden wir die sogenannte **Schrieffer-Wolff-Transformation** durchführen. Diese Transformation ist so konzipiert, dass auf Kosten der Wechselwirkung H_1 eine neue Wechselwirkung, die quadratisch in V ist, generiert wird.

$$\tilde{H} = e^S H e^{-S} \tag{2}$$

(c) Überlegen Sie sich im Kontext von Aufgabenteil 1b, warum man auf die lineare Ordnung von V verzichten möchte.

(d) Verwenden Sie die erweiterte Baker-Campbell-Hausdorff-Formel, um eine Bedingung an S zu erhalten.

$$e^x y e^{-x} = y + [x,y] + \frac{1}{2!}[x,[x,y]] + \frac{1}{3!}[x,[x,[x,y]]] + \dots \tag{3}$$

Hinweis: Sie sollten $[H_0, S] = H_1$ *erhalten.*

(e) Zeigen Sie, dass folgendes antihermitesches S diese Bedingung erfüllt.

$$S = \sum_{k,\sigma} \frac{V_k}{\epsilon_k - \epsilon_d - U} n_{d,-\sigma} c^\dagger_{k,\sigma} d_\sigma + \frac{V_k}{\epsilon_k - \epsilon_d}(1 - n_{d,-\sigma}) c^\dagger_{k,\sigma} d_\sigma - h.c. \tag{4}$$

(f) Nähern Sie den neuen Hamilton-Operator, indem Sie die Reihe, die Sie in Aufgabenteil 1d erhalten haben, nach den Termen, die quadratisch in V sind, abbrechen. Zeigen Sie, dass $\tilde{H} = H_0 + H_2 = H_0 + \frac{1}{2}[S, H_1]$ gilt.

(g) Berechnen Sie H_2. Verwenden Sie hierzu $\psi_k = (c_{k,\uparrow}, c_{k,\downarrow})^T$ und $\psi_d = (d_\uparrow, d_\downarrow)^T$ und bringen Sie H_2 auf folgende Form:

$$H_2 = H_{\text{ex}} + H_{\text{dir}} + H_{0'} + H_{\text{ch}} \tag{5}$$

$$H_{\text{ex}} = -\sum_{k,k'} J_{k',k} (\psi^\dagger_{k'} \vec{S} \psi_k)(\psi^\dagger_d \vec{S} \psi_d) \tag{6}$$

$$H_{\text{dir}} = \sum_{k,k'} \left[W_{k',k} + \frac{1}{2} J_{k',k} \psi^\dagger_d \psi_d \right] \psi^\dagger_{k'} \psi_k \tag{7}$$

$$H_{0'} = -\sum_{k,\sigma} \left[W_{k,k} + \frac{1}{2} J_{k,k} d^\dagger_{-\sigma} d_{-\sigma} \right] d^\dagger_\sigma d_\sigma \tag{8}$$

$$H_{\text{ch}} = \sum_{k,k',\sigma} J_{k',k} c^\dagger_{k',-\sigma} c^\dagger_{k,\sigma} d_\sigma d_{-\sigma} + h.c. \tag{9}$$

Hinweis: Hier ist $\vec{S} = \frac{1}{2}\vec{\sigma}$ *Außerdem sollten Sie folgendes für* $J_{k',k}$ *und* $W_{k',k}$ *erhalten*

$$J_{k',k} = V_{k'} V^*_k \left[\frac{1}{\epsilon_k - \epsilon_d - U} + \frac{1}{\epsilon_{k'} - \epsilon_d - U} - \frac{1}{\epsilon_k - \epsilon_d} - \frac{1}{\epsilon_{k'} - \epsilon_d} \right] \tag{10}$$

$$W_{k',k} = \frac{1}{2} V_{k'} V^*_k \left[\frac{1}{\epsilon_k - \epsilon_d} + \frac{1}{\epsilon_{k'} - \epsilon_d} \right] \tag{11}$$

(h) Das atomare Orbital ist aufgrund von $U \simeq 2|\epsilon_d|$ regulär einfach besetzt. Welcher Hamiltonoperator ist demnach vernachlässigbar? Und welcher kann als Redefinition der Energie in den ungestörten Hamilton-Operator absorbiert werden?

(i) Das Kondo-Modell beschreibt die Wechselwirkung einer Fermi-Flüssigkeit mit einer magnetischen Störstelle. Welcher der obigen Hamilton-Operatoren ist der sogenannte Kondo-Hamilton-Operator?

(j) Ist $J_{k,k} > 0$ (ferromagnetisch) oder $J_{k,k} < 0$ (antiferromagnetisch)? Erklären Sie physikalisch ausgehend vom Anderson-Modell wie es zu einer Kondo-Wechselwirkung kommt.