

A kétcsatornás Kondo-modell vizsgálata numerikus renormálási csoport módszerrel

Ph.D. Tézisfüzet

Tóth Anna

Témavezető: Prof. Zaránd Gergely

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Elméleti Fizika Tanszék

Torontó, 2009

Kutatások előzménye

Az erősen korrelált elektronrendszerek vizsgálata központi szerepet játszik a kondenzált anyagok fizikájának kutatásában. Az ún. kvantum szennyező modellek speciális típusú, alacsony dimenziós, erős korrelációkat mutató rendszerek. Ezek a modellek lokális szabadsági fokok – mint például a spin – és kiterjedt állapotok egy kontinuumára – mint például egy vezetési elektronsáv – közti kölcsönhatásokat írnak le. Prototípusaik az Anderson- és a Kondo-modellek, melyek megmagyaráznak olyan klasszikus kísérleti tényeket, mint a nem mágneses fémekben mágneses szennyezők jelenlétekor tapasztalt ellenállás minimum és hatványfüggvényyszerű viselkedés. Az újabb, a Kondo fizika feltérképezésére irányuló kísérleteket redukált dimenziójú mezoszkópikus rendszereken végzik. Ilyen rendszerekre példák az alacsony koncentrációjú mágneses ötvözetekből készült vékony filmrétegek, illetve vezetékek, fémes pontkontaktusok és nanoszkópikus, elektronikai eszközök, mint például a kvantumdombok, stb. Ezeket túl a kvantum szennyező modellek kutatása kiindulópont összetettebb, erősen korrelált rendszerek viselkedésének megértéséhez a dinamikus átlagtér elmélet keretein belül.

Az elmúlt évtizedek során a kvantum szennyező modellek által leírt fizika megértése sokat fejlődött a vizsgálatukra kifejlesztett megközelítések sokféleségének köszönhetően. A Wilson által, a hetvenes években kifejlesztett ún. numerikus renormálási csoport (NRG) eljárás máig az egyik legmegbízhatóbb és legsokoldalúbb módszer ezen modellek tanulmányozására.

Célkitűzések

Kutatásaim célja a közelmúltban kifejlesztett sűrűségmátrix numerikus renormálási csoport (DM-NRG) eljárással számolt spektrálfüggvények pontosságának növelése volt. Ezt a kutatást főleg az motiválta, hogy egyre nagyobb az igény a kvantum szennyező modellekkel leírható nanoelektronikai eszközök tulajdonságainak megértésére, hiszen ezek az eszközök fontos szerepet játszhatnak a kvantum számítógépek megalkotásában. Elsősorban a feles spinű, kétcsatornás Kondo (2CK) modellel foglalkoztam, ami a nem-Fermi folyadék tulajdonságokat mutató túlárnyékolt Kondo modellek legegyszerűbb változata. Ez a modell releváns lehet nehéz fermion rendszerek anomális tulajdonságainak értelmezésékor. Vizsgálataimnak további aktualitást ad az, hogy a 2CK állapot létezését nemrégiben sikerült kísérletileg igazolni egy ket-tős kvantumdot rendszer segítségével. Annak ellenére, hogy ez a modell paradigmává vált nem-Fermi folyadék jelenségek leírására, dinamikus tulajdonságairól eddig keveset publikáltak. Mindmáig a (DM-)NRG az egyetlen olyan módszer, amellyel a teljes frekvencia tartományban megbízhatóan lehet számolni ezeket a tulajdonságokat. Ugyanakkor a 2CK-fixpont közelében a különböző Green függvények analitikus viselkedése konform térelmélet segítségével is megállapítható. Céлом volt továbbá a fenti két megközelítésben kapott eredmények összevetése.

Új tudományos eredmények

1. Kidolgoztam egy tetszőleges számú, kompakt Lie csoport és diszkrét szimmetria kihasználására alkalmas, flexibilis numerikus renormálási csoport (NRG) eljárást [1, 2].
2. A fenti eljárást struktúrált C++ programozási nyelven bepro-

gramoztam spin- és töltés-SU(2) és U(1) szimmetriákra [3, 2]. Ez a program szabadon letölthető a következő weboldalról: <http://www.phy.bme.hu/~dmnrg/>. Megmutattam, hogy a nem-ábeli szimmetriák használata jelentősen növeli az NRG számítások pontosságát.

3. A fenti NRG program segítségével különböző csatorna anizotropia értékek mellett kiszámoltam a kétcsatornás Kondo-effektus kísérleti igazolására a közelmúltban konstruált kettős kvantumdot rendszer frekvenciafüggő, lineáris vezetőképességét zérus hőmérsékleten. Az NRG számítások során a pontosság növelése érdekében kihasználtam a rendszer $SU_{C_1}(2) \times SU_{C_2}(2) \times SU_S(2)$ szimmetriáját. Így kvantitatíve meg tudtam határozni az univerzális, vezetőképesség-skálagörbéket, melyek a rendszert leíró kétcsatornás Kondo-modell Fermi folyadék, illetve nem-Fermi folyadék fixpontjait kötik össze. Jelenleg a numerikus renormálási csoport eljárás az egyetlen módszer ezen görbék meghatározására [4].
4. Csoportelméleti módszerekkel beláttam, hogy a közelmúltban kidolgozott sűrűségmátrix numerikus renormálási csoport (DM-NRG) eljárás során a redukált sűrűségmátrix megőrzi diagonális alakját a reprezentációs indexekben akkor is, ha a DM-NRG számításokkor figyelembe vesszünk tetszőleges számú, nem-ábeli, kompakt Lie csoport szimmetriát. A DM-NRG eljárást általánosítottam tetszőleges számú nem-ábeli, kompakt Lie csoport szimmetria esetére [2].
5. Beprogramoztam a fenti DM-NRG eljárást tetszőleges számú spin- és töltés-SU(2), és U(1) szimmetria esetére. Ezzel lehetővé vált nagy pontosságú, spektrál összszabályokat kielégítő spektrálfüggvények számolása [3, 2].

6. Konform térelméleti módszerekkel az $SU(2)_{spin} \times SU(2)_{töltés} \times SU(2)_{töltés}$ csoport szerint osztályoztam az elektron-lyuk szimmetrikus, feles spinű, kétcsatornás Kondo-modell (2CKM) lokális, primér tereit a kétcsatornás Kondo-fixpontban, illetve a fixpont Hamilton operátor releváns és vezető irreleváns perturbációit. Valamint DM-NRG-vel kiszámoltam zérus hőmérsékleten a 2CKM lokális, legnagyobb súlyú operátorainak retardált Green függvényeit a kétcsatornás Kondo-fixpontban és a releváns perturbációk jelenlétekor [5].
7. Skálaérvek és konform térelméleti megfontolások alapján kifejtettem a 2CKM nem-Fermi folyadék fixpontbeli legnagyobb súlyú operátorait a szabad elmélet operátoraival, valamint megadtam az univerzális skálagörbék analitikus alakját a fixpontok közelében. Minden esetben az analitikus elvárásoknak megfelelő univerzális skálagörbét kaptam a DM-NRG számításaimból [5].
8. Azt találtam, hogy a kétcsatornás Kondo-fixpont körüli skálatartomány nemcsak a perturbáció alakjától, hanem a vizsgált operátortól is függ, valamint hogy a releváns szupravezető járuléka a kompozit csatornából származik. Ezen utóbbi megfigyelés többszennyezős, nehéz fermion rendszerekre nézve is releváns lehet. Továbbá megfigyeltem egy univerzális rezonanciát a lokális fermionok spektrálfüggvényében kis mágneses terek jelenlétekor [5].

A tézispontokhoz kapcsolódó tudományos közlemények

- [1] Ö. Legeza, C. P. Moca, A. I. Tóth, I. Weymann, G. Zaránd, *Manual for the Flexible DM-NRG code*, [arXiv:0809.3143]
- [2] A. I. Tóth, C. P. Moca, Ö. Legeza, G. Zaránd, *Density matrix numerical renormalization group for non-Abelian symmetries*, Phys. Rev. B **78**, 245109 (2008), Editors' Suggestion
- [3] Ö. Legeza, C. P. Moca, A. I. Tóth, I. Weymann, G. Zaránd, *Flexible Density Matrix Numerical Renormalization Group Code*, public C++ code, distributed under GNU LGPL, <http://www.phy.bme.hu/~dmnrg/>
- [4] A. I. Tóth, L. Borda, J. von Delft, G. Zaránd, *Dynamical conductance in the two-channel Kondo regime of a double dot system*, Phys. Rev. B **76**, 155318 (2007)
- [5] A. I. Tóth, G. Zaránd, *Dynamical correlations in the spin-half two-channel Kondo model*, Phys. Rev. B **78**, 165130 (2008), Editors' Suggestion

További tudományos közlemények

- [6] F. Csikor, G. I. Egri, Z. Fodor, S. D. Katz, K. K. Szabó, A. I. Tóth: *Equation of State at Finite Temperature and Chemical Potential, Lattice QCD Results*, JHEP **0405**, 046 (2004)

- [7] K. K. Szab , A. I. T th: *Quasiparticle Description of the QCD Plasma, Comparison with Lattice Results at Finite T and μ* , JHEP **0306**, 008 (2003)
- [8] Z. Fodor, S. D. Katz, K. K. Szab , A. I. T th: *Grand Canonical Potential for a Static Quark–Anti-Quark Pair at $\mu \neq 0$* , Nucl. Phys. Proc. Suppl. **140** 508-510 (2005)
- [9] F. Csikor, G. I. Egri, Z. Fodor, S. D. Katz, K. K. Szab , A. I. T th: *The QCD Equation of State at Finite T / μ on the Lattice*, Prog. Theor. Phys. Suppl. **153** 93-105 (2004)
- [10] F. Csikor, G. I. Egri, Z. Fodor, S. D. Katz, K. K. Szab , A. I. T th: *Lattice QCD at Non-vanishing Density: Phase Diagram, Equation of State*, SEWM 2002, Heidelberg, Germany
- [11] F. Csikor, G. I. Egri, Z. Fodor, S. D. Katz, K. K. Szab , A. I. T th: *The QCD Equation of State at Finite T and μ* , Nucl. Phys. Proc. Suppl. **119** 547-549 (2003)