

BACHELORARBEIT

eingereicht an der

Fakultät für Physik

der

Ludwig-Maximilians-Universität München



ANWENDUNG EINER FERMI-LIQUID-THEORIE FÜR
DAS SIAM AUF EINEN FRG-ANSATZ ZUR
BESCHREIBUNG VON QUANTENPUNKTEN

APPLICATION OF A FERMI-LIQUID THEORY FOR
THE SIAM ON AN FRG-APPROACH FOR THE
DESCRIPTION OF QUANTUM DOTS

Philipp Maximilian Rosenberger

Betreuer:

Prof. Dr. Jan von Delft

17. Juli 2015

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	4
2	Eindimensionale Tight-Binding-Ketten	5
3	Streutheorie	7
4	Single-Impurity Anderson Modell (SIAM)	9
4.1	Fermi-Liquid-Theorie für das SIAM	10
5	fRG-Ansatz zur Beschreibung von Quantenpunkten	13
6	Vergleich zwischen fRG und der FL-Theorie für das SIAM	14
6.1	Vorgehen	16
6.1.1	Bestimmung von ε_d	16
6.1.2	Korrekturen durch nicht-verschwindende Phase $\delta_{\sigma,a}$	17
6.2	Ergebnisse	19
6.2.1	Die Phasen der S-Matrix	19
6.2.2	Überprüfung der Friedel-Summenregel und der Landauer-Büttiker- Formel	20
6.2.3	Fermi-Liquid-Theorie	21
7	Fazit	25

1 Einleitung

Quantenpunkte, das sind in allen drei Raumrichtungen beschränkte, physikalische Objekte, die klein genug sind, damit quantenmechanische Effekte auftreten. Als System stellt man sich dabei häufig einen dreidimensionalen quantenmechanischen harmonischen Oszillator vor, was in erster Näherung für ein System gebundener Zustände sicherlich sinnvoll ist. Die einfachste und anschaulichste Beschreibung findet aber im Eindimensionalen statt. Man teilt dazu die Ortsachse in drei Bereiche, den Quantenpunktbereich, in dem sich diskrete Energieniveaus befinden und links und rechts davon zwei Bäder von Elektronen mit den chemischen Potentialen μ_L und μ_R von denen aus Elektronen in den Quantenpunkt hinein und wieder heraus tunneln können (vgl. Abbildung 1). Der Abstand der Energieniveaus im Quantenpunktbereich hängt davon ab, wie sehr das Potential des harmonischen Oszillators gekrümmt ist und davon, wie viele Elektronen sich im Quantenpunkt befinden. Alleine mit diesem Bild lassen sich qualitativ bereits sehr viele Eigenschaften und Phänomene der Quantenpunkte, wie z.B. die Ausbildung der sogenannten Coulomb-Diamanten oder die optischen Eigenschaften, erklären. Quantitative Aussagen aber bedürfen auf dieser Ebene immer noch einer Messung. Es lässt sich beispielsweise keine Aussage über die Leitfähigkeit machen, wenn man die Spinsuszeptibilität χ_s o.Ä. gemessen hat. Außerdem ist es fast sicher, dass durch die stark vereinfachte Beschreibung bestimmte physikalische Effekte keine (also nicht einmal eine qualitative) Erklärung finden¹.

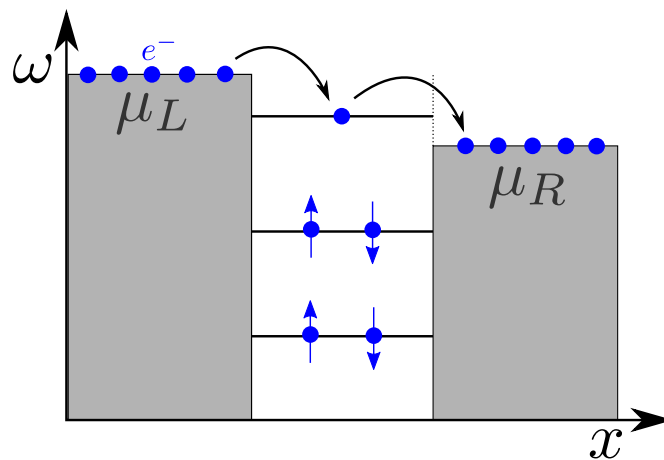


Abb. 1. Schematische Abbildung eines Quantenpunktes. Aufgetragen ist die Energie der Elektronen gegen den Ort. Der mittlere Bereich ist der eigentliche Quantenpunkt mit den verschiedenen Energieniveaus, die beiden äußeren Bereiche stellen die Kontakte dar. Die schwarzen Pfeile sollen das Tunneln der Elektronen andeuten. Die blauen Pfeile stellen den Spin der Elektronen dar. Hinweis: In der gesamten Arbeit gilt $\mu_L = \mu_R \equiv \mu$.

Aus diesen Gründen ist eine theoretische Beschreibung von Quantenpunkten sehr wünschenswert. Es liegt aber in der Natur von Festkörpern, dass sich typischerweise weit mehr als ein Elektron darin befindet, was den Quantenpunkt zum Vielteilchenproblem und damit potentiell schwer lösbar macht. Man kann jedoch versuchen etwa

¹Siehe z.B. 0.7-Anomalie in Quantenpunktkontakten

eine Beschreibung für niedrige Energien und Wechselwirkung von Elektronen nur im Quantenpunkt selbst zu finden. Diese lokale Wechselwirkung findet man zum Beispiel im Kondo-Modell oder auch im Single-Impurity Anderson Modell. Für niedrige Energien wurde ersteres u.a. 1974 von Nozières [noz74] und zweiteres u.a. von Mora et al. [mora14] 2014 gelöst. Beides sind Ansätze in denen die Beschreibung physikalischer Größen über Streuphasen von Quasiteilchen eines Fermi-Liquids erfolgt.

In beiden Ansätzen hat der Quantenpunkt die Form eines lokalen Wechselwirkungspunktes, der keine räumliche Ausdehnung besitzt. Dadurch können aber experimentell auftretende Effekte, wie asymmetrische Maxima in den Leitfähigkeitskurven $G(V_g)$ (vgl. z.B. [gold98],[crone98]) nicht erklärt werden. Schöner wäre daher eine Beschreibung über einen Hamiltonoperator in dem tatsächlich ein ortsabhängiges Potential steht, das gebundene Zustände ermöglicht. Das würde außerdem die eingangs erwähnte räumliche Beschränkung widerspiegeln, die auch in Experimenten immer endlich bleibt. Mit Hilfe der Methode der funktionalen Renormierungsgruppe (fRG) wurde ein solches System in einer Raumdimension mit räumlicher Diskretisierung² von Bauer et al. [bauer14] und Lukas Weidinger [weid14] näherungsweise gelöst. Diese Simulation liefert zahlreiche physikalische Daten, die im Rahmen dieser Arbeit mit den Aussagen von [mora14] verglichen wurden. Bei Verträglichkeit der beiden Ansätze können dann mit Hilfe der Fermi-Liquid-Theorie Vorhersagen über Leitfähigkeitskoeffizienten generiert werden, die im Rahmen der Matsubara-fRG-Beschreibung nicht möglich sind. Der Vergleich überprüft gleichzeitig die Tauglichkeit des Single-Impurity Anderson Modells zur Beschreibung von Quantenpunkten. Inwiefern dieser Vergleich glückt, wird im Anschluss an einen Überblick über den theoretischen Hintergrund in dieser Arbeit erläutert.

2 Eindimensionale Tight-Binding-Ketten

Im Tight-Binding-Modell geht man, wie der Name vermuten lässt, davon aus, dass die Bindung der (Leitungs-)Elektronen an die Atomrümpfe im Gitter eines Festkörpers so stark ist, dass der Überlapp von Wellenfunktionen von Elektronen benachbarter Atomrümpfe klein ist. Daraus ergibt sich eine lokale, an den jeweiligen Gitterplatz gebundene Beschreibung von elektronischen Zuständen im Festkörper, die durch eine Kopplung der Atomrümpfe ergänzt wird. Was damit gemeint ist, wird klar, wenn man sich ein Beispiel für einen Hamiltonoperator eines solchen Systems in zweiter Quantisierung ansieht:

$$H_{\text{hop}} = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{\sigma} \tau (c_{i+1,\sigma}^{\dagger} c_{i,\sigma} + c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{i+1,\sigma}), \quad \tau \in \mathbb{R}. \quad (1)$$

Hierbei handelt es sich um eine halb-unendliche eindimensionale Kette von Atomrümpfen (im Folgenden Sites genannt), zwischen denen sich Elektronen bewegen können³. Solche halb-unendlichen 1D-Ketten werden in Lukas Weidingers Programm zur Dis-

²Die Diskretisierung erfolgte im Sinne eines Tight-Binding-Modells.

³ $c_{i+1,\sigma}^{\dagger} c_{i,\sigma}$ vernichtet ein Elektron mit Spin σ auf Site i und erzeugt eines mit Spin σ auf Site $i + 1$.

diskretisierung der Ortsachse verwendet, sind dort aber aufgrund der Anzahl der Sites⁴ tatsächlich eher als Diskretisierung statt als Modell für Atomrümpfe zu betrachten. Es wäre auch problemlos möglich eine unendlich lange Kette zu betrachten, was aber für spätere Rechnungen nicht benötigt wird, weshalb an dieser Stelle darauf verzichtet sei. Aus demselben Grund wird das System zunächst auch ohne äußeres Potential und ohne Wechselwirkung zwischen den Elektronen behandelt. Der Parameter τ bestimmt, wie sehr die Elektronen an die Sites gebunden sind. Durch Einsetzen des Ansatzes

$$|\psi_{k,\sigma}\rangle = \sum_{j=1}^{\infty} \sin(kj)|j,\sigma\rangle \quad (2)$$

stellt man fest, dass es sich um die Eigenzustände des Hamiltonians handelt:

$$H_{\text{hop}}|\psi_{k,\sigma}\rangle = 2\tau \cos k|\psi_{k,\sigma}\rangle. \quad (3)$$

Die Dispersionsrelation lautet also $\omega(k) = 2\tau \cos k$.

Der nächste Schritt soll die Berechnung der Zustandsdichte der ersten Site der Kette sein. Das Ergebnis dieser Rechnung wird im nächsten Kapitel benötigt werden. Dazu soll der Hamiltonian in die beiden Spinspezies zerlegt werden $H_{\text{hop}} = H_{\uparrow} + H_{\downarrow}$. Für H_{σ} möchte man jetzt die retardierte Green'sche Funktion G ⁵ berechnen, da deren Imaginärteil mit der Zustandsdichte zusammenhängt. Für die nachfolgende Berechnung siehe auch [zilly10]. Sie funktioniert folgendermaßen: Man füge ein weiteres Kettenglied am Beginn der Kette ein, wodurch die Form des Hamiltonians unverändert bleibt. Die halb-unendliche Kette bleibt eine halb-unendliche Kette, das Hopping von und zum ersten Kettenglied werde jetzt aber als Störung V betrachtet. g ist die ungestörte Green'sche Funktion. Explizit sind G, g und V von folgender Form:

$$G = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & \cdots \\ G_{21} & G_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad g = \begin{pmatrix} g_{11} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & G_{11} & G_{12} & \cdots \\ 0 & G_{21} & G_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad V = \begin{pmatrix} 0 & \tau & 0 & \cdots \\ \tau & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (4)$$

mit $g_{11} = \frac{1}{\omega}$, der Green'schen Funktion $g_{11} = [w - H_0]^{-1}$ einer einzigen Site ($H_0 = 0$). Nach der Dyson-Gleichung

$$G = g + gVG \quad (5)$$

gilt für die Komponenten G_{11} und G_{21} :

$$G_{11} = g_{11} + (gVG)_{11} = g_{11} + g_{11}V_{12}G_{21}, \quad (6)$$

$$G_{21} = g_{21} + (gVG)_{21} = g_{21} + g_{22}V_{21}G_{11}. \quad (7)$$

Daraus folgt nach Einsetzen eine quadratische Gleichung für G_{11} :

$$G_{11} = g_{11} + g_{11}\tau^2G_{11}^2, \quad (8)$$

⁴Der Quantenpunkt besteht im fRG-Programm aus ca. 100 Sites, experimentell realisierte Quantenpunkte sind jedoch weit mehr als 100 Atome groß.

⁵Die Spinabhängigkeit wurde für einfachere Notation weggelassen.

mit der Lösung

$$G_{11} = \frac{\omega}{2\tau^2} \pm \frac{1}{2\tau^2} \sqrt{\omega^2 - 4\tau^2}. \quad (9)$$

Die lokale, spinabhängige Zustandsdichte im Randglied der halb-unendlichen Tight-Binding-Kette ergibt sich daher zu

$$\rho^\sigma(\omega) = -\frac{1}{\pi} \Im(G_{11}^{\sigma,R}) = \frac{1}{2\pi\tau^2} \sqrt{4\tau^2 - \omega^2}. \quad (10)$$

Das Vorzeichen wurde dabei so gewählt, dass die Dichte positiv ist, womit man automatisch die retardierte Green'sche Funktion erhält. Bemerkenswert ist, dass dieser Ausdruck sowie die Dispersionsrelation die Bedingung $|\omega| \leq 2\tau$ impliziert.

3 Streutheorie

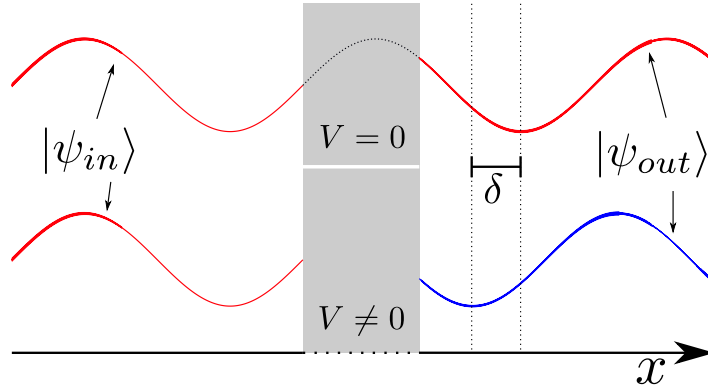


Abb. 2. Schematische Abbildung eines Streuvorganges mit ebenen Wellen als freie Zustände. Im Fall eines verschwindenden Potentials $V = 0$ ändert sich die Phase der ebenen Welle beim Streuvorgang nicht. Ist ein Potential $V \neq 0$ präsent, so tritt eine Phasenverschiebung δ auf. Hinweis: Die Darstellung berücksichtigt nur Transmission, Reflexion sei vernachlässigt.

Streuvorgänge in der Quantenmechanik können durch den Streuoperator (S-Matrix) beschrieben werden. Die S-Matrix liefert die Antwort auf die Frage, wie sich ein freier Zustand⁶ bei $t = -\infty$ in einen freien Zustand bei $t = \infty$ entwickelt. Im betrachteten Fall der fRG-Simulation von Lukas Weidinger gibt es zwei halb-unendliche Tight-Binding-Ketten, die von links und rechts an eine Zentralregion von komplizierterer Gestalt koppeln. Wie oben erwähnt sind die Kettenanteile dieses Hamiltonoperators exakt lösbar, weshalb es Sinn macht, die S-Matrix in der Basis von Eigenzuständen der linken und rechten Kette darzustellen:

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \lim_{\substack{t \rightarrow \infty \\ t' \rightarrow -\infty}} \begin{pmatrix} \langle \psi_L | \hat{U}(t, t') | \psi_L \rangle & \langle \psi_L | \hat{U}(t, t') | \psi_R \rangle \\ \langle \psi_R | \hat{U}(t, t') | \psi_L \rangle & \langle \psi_R | \hat{U}(t, t') | \psi_R \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{LL} & S_{LR} \\ S_{RL} & S_{RR} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Da die Koeffizienten A, B, C und D komplexe Zahlen sind, wird neben der Information, wie sich die Amplitude durch den Streuvorgang verändert, auch Information über

⁶frei im Sinne des Wechselwirkungsbildes ($H = H_0 + V$). Eigenzustände von H_0 sind freie Zustände.

mögliche Phasenverschiebung in der Streumatrix codiert. Diese Phasenverschiebung wird sich als zentrale Größe dieser Arbeit herausstellen. Es sei angemerkt, dass nur elastische Streuvorgänge betrachtet werden. Das bedeutet, dass die S-Matrix nur von der Energie der einlaufenden Zustände abhängt. Es ist nun allerdings so, dass der Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t, t')$ in der fRG-Simulation nicht explizit berechnet wird. Eine sich als nützlich erweisende Identität zur Berechnung der S-Matrix (vgl. z.B.: [taylor72], Kapitel 8) ist daher:

$$S^\sigma = \mathbb{1} - 2\pi i \tau^2 \rho_0^\sigma(0) \begin{pmatrix} G_{-N,-N}^{\sigma,R} & G_{-N,N}^{\sigma,R} \\ G_{N,-N}^{\sigma,R} & G_{N,N}^{\sigma,R} \end{pmatrix}. \quad (12)$$

wobei τ die Kopplungskonstante benachbarter Sites, $G_{j,i}^{\sigma,R}$ die retardierte Green'sche Funktion am chemischen Potential von Site i nach Site j und $\rho_0^\sigma(0)$ die Zustandsdichte in den Kontakten am chemischen Potential μ ist. Letztere ist analog zu Gleichung (10) bei endlichem Magnetfeld gegeben durch:

$$\rho_0^\sigma(0) = -\frac{1}{\pi} \Im(G_{k,k}^{\sigma,R}) = \frac{1}{2\pi\tau^2} \sqrt{4\tau^2 - (\mu + \sigma B/2)^2} \text{ mit } |k| = N + 1. \quad (13)$$

Zur Berechnung der interessanten physikalischen Größen soll die S-Matrix nun diagonalisiert werden. Die Streumatrix ist unitär⁷ $S^{-1} = S^\dagger$ und im Fall symmetrischer Potentiale auch symmetrisch $S^T = S$. Diese Bedingung ist für den Fall des Hamiltonoperators aus Lukas Weidingers Simulation erfüllt. Dadurch lässt sich die S-Matrix durch Anwendung von $W = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ diagonalisieren:

$$W^\dagger S^\sigma W = \begin{pmatrix} e^{i\delta_{\sigma,s}} & 0 \\ 0 & e^{i\delta_{\sigma,a}} \end{pmatrix} = e^{i\delta_{\text{ref}}} \begin{pmatrix} e^{i2\delta_{\sigma,1}} & 0 \\ 0 & e^{i2\delta_{\sigma,2}} \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Die Eigenphasen der S-Matrix wurden dabei mit Hilfe einer prinzipiell beliebig wählbaren Referenzphase δ_{ref} ausgedrückt. Diese besitzt keinen Index für den Spin, da sie später bei $B = 0$ gewählt werden und somit spinunabhängig sein wird. Hat man die Referenzphase festgelegt und damit die Phasen

$$\delta_{\sigma,+} = \delta_{\sigma,1} + \delta_{\sigma,2} = \frac{1}{2}(\delta_{\sigma,s} + \delta_{\sigma,a} - 2\delta_{\text{ref}}) \quad (15a)$$

und

$$\delta_{\sigma,-} = \delta_{\sigma,1} - \delta_{\sigma,2} = \frac{1}{2}(\delta_{\sigma,s} - \delta_{\sigma,a}) \quad (15b)$$

bestimmt, so lässt sich durch Anwenden der Landauer-Büttiker Formel die Leitfähigkeit g des Systems folgendermaßen berechnen:

$$g = G/G_Q = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sin^2(|S_{LR}^\sigma|^2) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sin^2(\delta_{\sigma,-}). \quad (16)$$

⁷Unitarität gilt nur, falls die Wahrscheinlichkeitsdichte erhalten bleibt, also gestreute Teilchen das Streuzentrum auch wieder verlassen können, was im Fall des verwendeten Potentials (Abbildung 4) erfüllt ist.

Dabei ist $G_Q = 2e^2/h$ das Leitfähigkeitsquantum. Somit ist g eine dimensionslose Größe. g sei im Folgenden auch immer gemeint, wenn über Leitfähigkeit gesprochen wird. Aber nicht nur $\delta_{\sigma,-}$ kann mit einer physikalischen Größe in Verbindung gebracht werden. Die Friedel-Summenregel macht eine Aussage darüber, wie die Summe der Eigenphasen (modulo δ_{ref}) der S-Matrix mit der Ladung im Streuzentrum zusammenhängt. Die (nach Spin unterschiedene) Ladung n_σ ist gegeben durch: $n_\sigma = \frac{1}{\pi}\delta_{\sigma,+}$. Also lauten die Formeln für die Ladung n und die Magnetisierung m des Streuzentrums:

$$n = n_\uparrow + n_\downarrow = \frac{1}{\pi}(\delta_{\uparrow,+} + \delta_{\downarrow,+}), \quad (17a)$$

$$m = \frac{1}{2}(n_\uparrow - n_\downarrow) = \frac{1}{2\pi}(\delta_{\uparrow,+} - \delta_{\downarrow,+}). \quad (17b)$$

Hier wird deutlich, wie wichtig die Wahl der richtigen Referenzphase ist, wenn man quantitative Aussagen generieren will. Während $\delta_{\sigma,-}$ unabhängig von δ_{ref} ist, hängt $\delta_{\sigma,+}$ sehr wohl davon ab. Im Folgenden wird δ_{ref} derart gewählt sein, dass die Friedel-Summenregel an einem Punkt im Konfigurationsraum aller gewählten Gate-Spannungen und Magnetfeldstärken erfüllt ist und es wird sich herausstellen, dass sie dann in der Tat auch für die restlichen Konfigurationen gilt⁸.

4 Single-Impurity Anderson Modell (SIAM)

Das Single-Impurity Anderson Modell, oder kurz SIAM, wurde ursprünglich geschaffen, um die Auswirkungen von Störstellen in Metallgittern besser verstehen zu können. Betrachtet wird nur eine einzige Störstelle (Impurity), die an zwei Kontakte (links und rechts) koppelt. Es hat sich herausgestellt, dass auch Quantenpunkte recht gut durch dieses Modell beschrieben werden können. Der Hamiltonian des eindimensionalen Single-Impurity Anderson Modells ist gegeben durch:

$$H_{\text{SIAM}} = H_L + H_R + H_{\text{hop}} + H_{\text{dot}}. \quad (18)$$

Die Terme H_L und H_R beschreiben dabei die Kontakte, die links (L) und rechts (R) des Impurity-Levels über den Term H_{hop} an das Level bzw. den Quantenpunkt koppeln. H_{dot} beschreibt den Energiebeitrag durch Teilchen, die sich auf dem Quantenpunkt befinden sowie die Wechselwirkung zweier Elektronen auf demselben. Die einzelnen Beiträge zum Hamiltonian haben folgende Gestalt:

$$H_{L/R} = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c_{L/R,k\sigma}^\dagger c_{L/R,k\sigma}, \quad (19a)$$

$$H_{\text{hop}} = \sum_{k,\sigma} (\tau (c_{L,k\sigma}^\dagger c_d + c_{R,k\sigma}^\dagger c_d) + h.c.), \quad (19b)$$

$$H_{\text{dot}} = \sum_{\sigma} \varepsilon_d c_{d,\sigma}^\dagger c_{d,\sigma} + U c_{d,\uparrow}^\dagger c_{d,\uparrow} c_{d,\downarrow}^\dagger c_{d,\downarrow}. \quad (19c)$$

Dabei beschreiben die Operatoren $c_{\alpha,\sigma}$ und $c_{\alpha,\sigma}^\dagger$ fermionische Vernichter- und Erzeugeroperatoren. L/R kennzeichnen dabei wieder Zustände auf der linken bzw. rechten Seite

⁸Siehe dazu Tabelle 1

der Störstelle. Der Parameter ε_d heißt Impurity-Level oder Energieniveau der Störstelle und die Quantenzahl k steht für den Impuls. Die Wechselwirkungsstärke U ist eine positive reelle Zahl für repulsive und eine negative Zahl für attraktive Wechselwirkung. Im Fall von Elektronen gilt daher $U > 0$.

Trotz der relativ einfachen Form des Hamiltonoperators ist es nicht einfach eine Lösung für das System⁹ zu finden. Was natürlich versucht werden kann, ist durch das Betrachten von Spezialfällen dennoch einfache Formeln zu generieren. Die Fermi-Liquid-Theorie nach [mora14] beschreibt das SIAM bei niedrigen Energien und ist somit genau ein solcher Ansatz.

4.1 Fermi-Liquid-Theorie für das SIAM

Die Fermi-Liquid-Theorie für das Single-Impurity Anderson Modell nach [mora14] macht Aussagen über die Leitfähigkeit $g(V, T, B)$ im SIAM mit endlicher Source-Drain-Spannung V , endlicher Temperatur T und endlichem Magnetfeld B . Im nachfolgenden Abschnitt werden die Hauptaussagen aus [mora14] zusammengefasst.

Die Fermi-Liquid-Theorie ist ein störungstheoretischer Ansatz. Betrachtet werden Zustände des SIAM, die sich nahe am Grundzustand befinden. Daraus folgt eine Beschreibung durch Quasiteilchen, die an der Störstelle des SIAM streuen können und dabei eine Phase aufsammeln. Aufgrund der Symmetrie des Problems geschieht das aber nur bei Zuständen, die bezüglich des Streuzentrums symmetrisch sind. Die Wellenfunktion antisymmetrischer Zustände verschwindet am Streuzentrum, wodurch solche Zustände frei darüber hinweg propagieren können ohne eine Phasenverschiebung zu erleiden. Es gilt $\delta_{\sigma,a} = 0$ und damit $\delta_{\sigma,-} = \delta_{\sigma,+}$. Der Ansatz ist deshalb, die Phase $\delta_{\sigma,-}$ in einer Taylorreihe zu entwickeln, um über Landauer-Büttiker die Leitfähigkeit zu erhalten.

$$\delta_{\sigma,-}(\varepsilon, n_{\bar{\sigma}}) = \delta_{0,\varepsilon_d-\varepsilon_0} + \alpha_{1,\varepsilon_d-\varepsilon_0}(\varepsilon - \varepsilon_0) - \phi_{1,\varepsilon_d-\varepsilon_0} \int_{\varepsilon'} \delta n_{\bar{\sigma},\varepsilon_0}(\varepsilon') \quad (20)$$

$$+ \alpha_{2,\varepsilon_d-\varepsilon_0}(\varepsilon - \varepsilon_0)^2 - \frac{1}{2} \phi_{2,\varepsilon_d-\varepsilon_0} \int_{\varepsilon'} (\varepsilon + \varepsilon' - 2\varepsilon_0) \delta n_{\bar{\sigma},\varepsilon_0}(\varepsilon'). \quad (21)$$

Hierbei ist $\delta n_{\bar{\sigma},\varepsilon_0} = n_{\bar{\sigma}} - n_{\varepsilon_0}^0$ die Abweichung der Verteilung der Teilchen auf dem Störstellen-Niveau von der Grundzustandsteilchenverteilung $n_{\varepsilon_0}^0 = \theta(\varepsilon_0 - \varepsilon)$. Die Notation $\bar{\sigma}$ meint dabei die von σ verschiedene Spinstellung. Es wird in den ϕ -Termen nicht über die beiden Spinstellungen summiert, weil die Terme, die $\delta n_{\bar{\sigma},\varepsilon_0}$ enthalten, die Wechselwirkung auf dem Quantenpunkt beschreiben sollen. Diese ist im SIAM eine rein lokale Wechselwirkung auf einem einzigen Energieniveau. Und weil sich Fermionen gleichen Spins nach dem Pauli-Prinzip nicht zugleich im selben Quantenzustand und damit nicht zugleich auf dem Impurity-Level befinden können, findet (in erster Ordnung) auch keine Wechselwirkung statt. Es sei angemerkt, dass die Verteilung $n_{\bar{\sigma}}$ fast beliebig gewählt werden kann (z.B. endliche Temperatur, endliches Magnetfeld, endliche Source-Drain-Spannung,...), solange die Abweichung von der Grundzustandsverteilung klein ist. ε bezeichnet die Energie der streuenden Quasiteilchen. Die Koeffizienten $\delta_0, \alpha_1, \phi_1, \alpha_2, \phi_2$ heißen Fermi-Liquid-Parameter. Die Entwicklung von $\delta_{\sigma,-}$

⁹z.B. über den Bethe-Ansatz

muss unabhängig vom Entwicklungspunkt ε_0 sein, weshalb man durch Berechnung von $\frac{\partial \delta_{\sigma,-}}{\partial \varepsilon_0} = 0$ und anschließendem Koeffizientenvergleich Beziehungen zwischen den Fermi-Liquid-Parametern herstellen kann. Diese lauten:

$$-\frac{\partial \delta_0}{\partial \varepsilon_d} - \alpha_1 + \phi_1 = 0, \quad (22a)$$

$$-\frac{\partial \alpha_1}{\partial \varepsilon_d} - 2\alpha_2 + \phi_2/2 = 0, \quad (22b)$$

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial \varepsilon_d} + \phi_2 = 0. \quad (22c)$$

Dabei wurde verwendet, dass $\partial_{\varepsilon_0} f(\varepsilon_d - \varepsilon_0) = -\partial_{\varepsilon_d} f(\varepsilon_d - \varepsilon_0)$. Würde man jetzt die Fermi-Liquid-Parameter kennen, so könnte man wie in Kapitel 3 beschrieben die Leitfähigkeit des Systems bestimmen. Das Ziel ist nun diese Parameter mit physikalischen Größen in Zusammenhang zu bringen.

Dazu wollen wir die Entwicklung der Phase um $\varepsilon_0 = 0$ betrachten. Die Verteilung $n_{\bar{\sigma}}$ entspreche der Verteilung bei Temperatur $T = 0$ und einem kleinen Magnetfeld B . Diese ist gegeben durch: $n_{\bar{\sigma}}(\varepsilon') = \theta(\bar{\sigma}B/2 - \varepsilon')$. Eingesetzt in Gleichung (20) führt das zu folgendem Ergebnis:

$$\delta_{\sigma,-}(\varepsilon, n_{\sigma'}) = \delta_0 + \alpha_1 \varepsilon - \frac{\phi_1}{2} \bar{\sigma} B + \alpha_2 \varepsilon^2 - \frac{\phi_2}{2} [\varepsilon \bar{\sigma} B/2 + B^2/8]. \quad (23)$$

An dieser Stelle möchte man gerne die Friedel-Summenregel $\pi n_{d\sigma} = \delta_{\sigma,+} = \delta_{\sigma,-}$ verwenden, um Ladung und Magnetisierung des Impurity-Levels durch die Phase ausdrücken zu können. Es sei erneut betont, dass $\delta_{\sigma,+} = \delta_{\sigma,-}$ nur deshalb gilt, weil beim Single-Impurity Anderson Modell $\delta_{\sigma,a} = 0$ gilt. Es muss aber noch eine weitere Bedingung gegeben sein, damit die Friedel-Summenregel Gültigkeit hat. Das einlaufende streuende Teilchen/Quasiteilchen muss die Energie des chemischen Potentials $\mu_{\sigma} = \sigma B/2$ besitzen. Setzt man das für die Energie ε in Gleichung (23) ein und verwendet die Friedel-Summenregel, gelangt man zu folgendem Ausdruck:

$$\pi n_{d\sigma} = \delta_{\sigma,-}(B) = \delta_0 + \frac{\sigma}{2}(\alpha_1 + \phi_1)B + \frac{1}{4}(\alpha_2 + \phi_2/4)B^2. \quad (24)$$

Diese Identität kann nun verwendet werden, um die Ladung n_d und die Magnetisierung m_d des Impurity-Levels zu berechnen.

$$n_d = n_{\uparrow} + n_{\downarrow} = 2\frac{\delta_0}{\pi} + \frac{1}{2\pi}(\alpha_2 + \phi_2/4)B^2, \quad (25a)$$

$$m_d = \frac{1}{2}(n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) = \frac{B}{2\pi}(\alpha_1 + \phi_1). \quad (25b)$$

Durch Ableiten dieser beiden Gleichungen erhält man dann die Ladungs- und Spinsuszeptibilität des Quantenpunktes.

$$\chi_c = -\left. \frac{\partial n_d}{\partial \varepsilon_d} \right|_{B=0} = -\frac{2}{\pi} \delta'_0 = \frac{2}{\pi}(\alpha_1 - \phi_1), \quad (26a)$$

$$\chi_s = \left. \frac{\partial m_d}{\partial B} \right|_{B=0} = \frac{1}{2\pi}(\alpha_1 + \phi_1). \quad (26b)$$

Der Strich meint hier und im Folgenden die partielle Ableitung nach ε_d . Es wurde außerdem Gleichung (22a) verwendet, um χ_c durch α_1 und ϕ_1 auszudrücken. Erneutes differenzieren nach ε_d und das Verwenden der Gleichungen (22b) und (22c) liefert schließlich:

$$\chi'_c = - \left. \frac{\partial^2 n_d}{\partial \varepsilon_d^2} \right|_{B=0} = - \frac{2}{\pi} \delta_0'' = \frac{2}{\pi} (\alpha_1' - \phi_1') = \frac{2}{\pi} \left(\frac{3\phi_2}{2} - 2\alpha_2 \right), \quad (26c)$$

$$\chi'_s = \left. \frac{\partial m_d}{\partial B \partial \varepsilon_d} \right|_{B=0} = \frac{1}{2\pi} (\alpha_1' + \phi_1') = - \frac{1}{2\pi} (2\alpha_2 + \frac{\phi_2}{2}). \quad (26d)$$

Durch diese vier Gleichungen kann man jetzt die vier Fermi-Liquid-Parameter α_1 , ϕ_1 , α_2 , ϕ_2 allein durch Kenntnis der Suszeptibilitäten eines Quantenpunktes, bzw. deren Ableitungen, berechnen. Löst man das entstehende lineare Gleichungssystem nach den Parametern, dann ergeben sich folgende Zusammenhänge:

$$\frac{\alpha_1}{\pi} = \chi_s + \frac{\chi_c}{4}, \quad \frac{\alpha_2}{\pi} = -\frac{3}{4}\chi'_s - \frac{\chi'_c}{16}, \quad (27a)$$

$$\frac{\phi_1}{\pi} = \chi_s - \frac{\chi_c}{4}, \quad \frac{\phi_2}{\pi} = -\chi'_s + \frac{\chi'_c}{4}. \quad (27b)$$

Ausgestattet mit diesen Parametern kann man schließlich mit Hilfe der Landauer-Büttiker-Formel (Gleichung (16)) die Leitfähigkeit des Systems bis zu quadratischer Ordnung in B bestimmen:

$$g = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sin^2(\delta_{\sigma,-}) \approx g_0 + \tilde{c}_B B^2, \quad (28)$$

mit

$$\tilde{c}_B = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \delta_{\sigma,-}}{\partial B^2} \cdot \sin(2\delta_{\sigma,-}) + \left(\frac{\partial \delta_{\sigma,-}}{\partial B} \right)^2 \cdot \cos(2\delta_{\sigma,-}) \right) \Big|_{B=0}. \quad (29)$$

Durch Ableiten von Gleichung (24) lassen sich die Fermi-Liquid-Parameter einbringen:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \delta_{\sigma,-}}{\partial B^2} \Big|_{B=0} = \frac{1}{4} (\alpha_2 + \phi_2/4), \quad (30a)$$

$$\left(\frac{\partial \delta_{\sigma,-}}{\partial B} \Big|_{B=0} \right)^2 = \frac{1}{4} (\alpha_1 + \phi_1)^2. \quad (30b)$$

Daraus ergibt sich letztlich folgender Zusammenhang für \tilde{c}_B :

$$\tilde{c}_B = \frac{1}{4} \left[(\alpha_2 + \phi_2/4) \sin(2\delta_0) + (\alpha_1 + \phi_1)^2 \cos(2\delta_0) \right]. \quad (31)$$

Die Rechnungen für endliche Temperatur und endliche Source-Drain-Spannung sollen hier nicht vorgeführt werden. Die Ergebnisse aus [mora14] für c_T und c_V lauten

$$c_T = \frac{\pi^4 \left(\frac{\phi_2}{12} - \frac{\alpha_2}{3} \right) \sin(2\delta_0) - \left(\frac{\alpha_1^2}{3} + \frac{2\phi_1^2}{3} \right) \cos(2\delta_0)}{16 \alpha_1^2}, \quad (32)$$

und

$$c_V = \frac{\pi^2}{64} \frac{\left(\frac{3\phi_2}{4} - \alpha_2\right) \sin(2\delta_0) - (\alpha_1^2 + 5\phi_1^2) \cos(2\delta_0)}{\alpha_1^2}. \quad (33)$$

Wichtig ist dabei, dass c_B , c_T und c_V in [mora14] folgendermaßen definiert sind:

$$G(V, T, B) - G_0 \approx -\frac{2e^2/h}{(E^*)^2} \left(c_T T^2 + c_V (eV)^2 + c_B B^2 \right), \quad E^* \equiv \frac{\pi}{4\alpha_1}. \quad (34)$$

Das heißt folglich, dass

$$c_B = -\frac{\pi^2}{64} \frac{(\alpha_2 + \phi_2/4) \sin(2\delta_0) + (\alpha_1 + \phi_1)^2 \cos(2\delta_0)}{\alpha_1^2}. \quad (35)$$

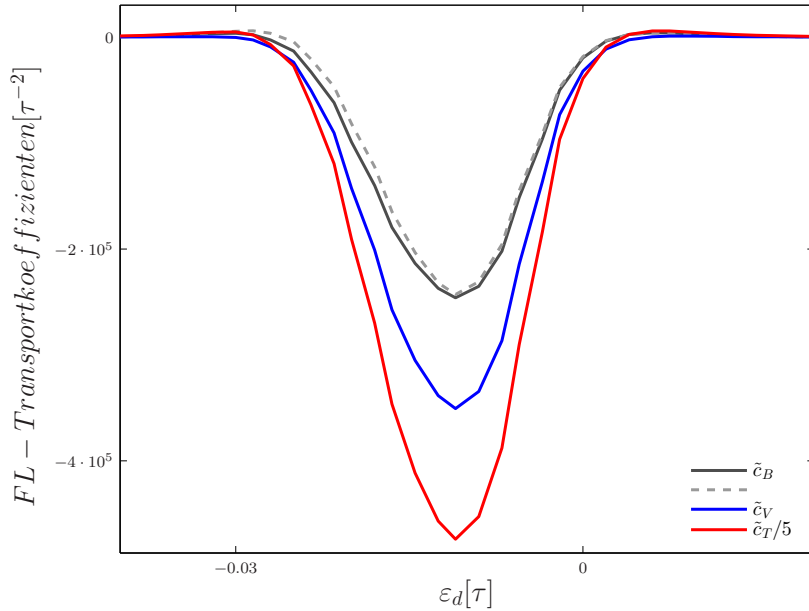


Abb. 3. Fermi-Liquid-Transportkoeffizienten, definiert durch $g(B, V, T) - g_0 = \tilde{c}_B B^2 + \tilde{c}_V (eV)^2 + \tilde{c}_T T^2$ als Funktion der Levelposition gemessen vom chemischen Potential $\mu = 0$ (Bandmitte) weg, berechnet mit V_g im Bereich von $-\tau$ bis -1.5τ und Magnetfeldern bis $B = 10^{-4}\tau$. Die gestrichelte Linie deutet den tatsächlichen Verlauf von \tilde{c}_B an. Dieser Verlauf wurde wie in Abbildung 8 durch einen Fit an die Leitfähigkeit $g(B)$ bestimmt.

5 fRG-Ansatz zur Beschreibung von Quantenpunkten

Die Vorstellung die man von einem Quantenpunkt hat, ist eigentlich nicht diejenige eines lokalen Levels wie es im SIAM implementiert ist, sondern vielmehr die Vorstellung eines ausgedehnten räumlichen Bereichs, in dem Teilchen gebundene Zustände ausbilden können. Es liegt daher nahe ein entsprechendes System direkt lösen zu wollen, was sich allerdings als sehr schwierig herausstellt. Mit Hilfe der Technik der

funktionalen Renormierungsgruppe (fRG) kann man dies jedoch bewerkstelligen (vgl. [bauer14],[weid14]). Der Hamiltonoperator des betrachteten Modells hat folgende Gestalt:

$$H = H_{\text{pot}} + H_{\text{hop}} + H_{\text{int}}, \quad (36a)$$

$$H_{\text{pot}} = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \sum_{\sigma} P_i c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}, \quad (36b)$$

$$H_{\text{hop}} = \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} \tau (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}), \quad (36c)$$

$$H_{\text{int}} = \sum_{i=-\infty}^{\infty} U_i c_{i,\uparrow}^{\dagger} c_{i,\uparrow} c_{i,\downarrow}^{\dagger} c_{i,\downarrow}. \quad (36d)$$

Das Modell ist eine eindimensionale Kette von Orbitalen (Sites), die durch eine Kopplungskonstante τ mit ihren nächsten Nachbarn verbunden sind. Die Zentralregion ist dadurch ausgezeichnet, dass zwei Zustände auf derselben Site miteinander wechselwirken. Die Wechselwirkungsstärke U_i ist dort also endlich. Außerdem gibt es in der Zentralregion zusätzlich ein endliches Potential P_i mit lokalem Minimum, in dem sich gebundene Zustände ausbilden können. In den Kontakten ist dagegen sowohl das Potential P_i als auch die lokale Wechselwirkung (on-site-Wechselwirkung) U_i gleich null. Potential P_i und Wechselwirkungsstärke U_i sind durch

$$P_i = \begin{cases} 0 & \text{für } |i| > N \\ (V_s + 2\tau + \mu) \left[2 \left(\frac{|i|-N}{i_s-N} \right)^2 - \left(\frac{|i|-N}{i_s-N} \right)^4 \right] & \text{für } i_0 \leq |i| \leq N \\ V_g + 2\tau + \mu + \frac{\Omega_x^2 i^2}{4\tau} \text{sgn}(V_s - V_g) & \text{für } 0 \leq |i| \leq i_0 \end{cases}, \quad (37)$$

$$U_i = \begin{cases} 0 & \text{für } |i| > N \\ U_0 \exp \left[-\frac{(i/N)^6}{1-(i/N)^2} \right] & \text{für } 0 \leq |i| \leq N \end{cases} \quad (38)$$

gegeben. Über den Parameter V_g (Gate-Spannung) lässt sich die Tiefe des Potentialtopfes einstellen. Abbildung 4 zeigt die Form des Potentials und der Wechselwirkung und erklärt die restlichen Parameter. Gelöst wurde dieses System mit Hilfe einer Simulation, die die Methode der funktionalen Renormierungsgruppe (fRG) verwendet. Die Einzelheiten dieses Lösungsansatzes sollen nicht Teil dieser Arbeit sein. Auf die verwendeten Ausgabedaten wird später eingegangen werden.

6 Vergleich zwischen fRG und der FL-Theorie für das SIAM

Die erste Frage, die aufkommt, wenn man über den Vergleich zweier Theorien bzw. Ansätze diskutieren möchte, ist inwiefern beides überhaupt vergleichbar sein soll und kann. Der Ansatz über fRG auf der einen Seite benutzt eine zwar abzählbare aber unendliche Anzahl von Sites denen je ein Potentialwert, eine lokale Wechselwirkungsstärke und eine Kopplungsstärke zu den Nachbar-Sites zugeordnet ist. Es ergibt sich ein eindimensionales System mit ortsabhängigem Potential und ortsabhängiger Wechselwirkung

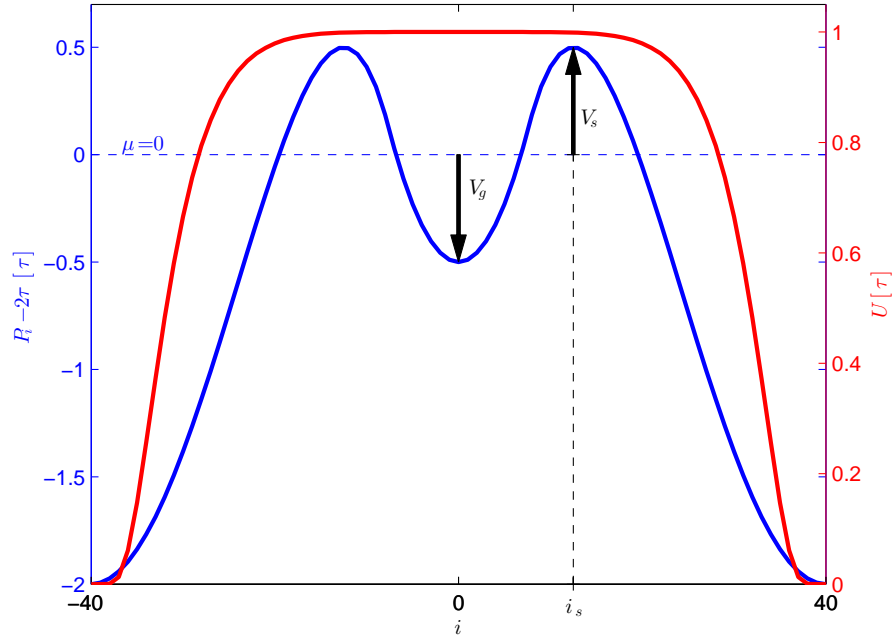


Abb. 4. Potential $P_i - 2\tau$ (blau) und Wechselwirkungsstärke U_i (rot), mit $U_0 = \tau$, orts aufgelöst (in Abhängigkeit des Site-Indexes i). Mit dem Parameter V_g lässt sich die Tiefe des parabelförmigen Potentialtopfes gemessen vom chemischen Potential μ einstellen (hier: $V_g = -0.5\tau$). Der Wert von V_s bestimmt die Höhe der sogenannten Side-Gates und damit Tunnelwahrscheinlichkeit von Elektronen in den Potentialtopf und wieder heraus (hier: $V_s = 0.5\tau$). Die Side-Gates werden durch ein Polynom vierter Ordnung realisiert. $2i_s$ bestimmt die Breite des Potentialtopfes. Der Wert von i_0 wurde nicht eingezeichnet. Dieser stellt lediglich den Site-Index dar, bei dem die Parabel des Gates in das Polynom der Side-Gates übergeht.

(in der Zentralregion hohe Wechselwirkung, in den Kontakten keine Wechselwirkung). Beim SIAM hingegen gibt es nur das Impurity-Level als zentrale Site und die zwei Bäder, die sich auch als Tight-Binding-Kette realisieren lassen würden. Der Unterschied zwischen den beiden Ansätzen besteht folglich darin, dass die sich die Zentralregionen, sprich die Streuzentren der beiden Modelle unterscheiden. Die Frage, warum Streutheorie und daraus folgend die FL-Theorie angewandt auf beide Systeme das gleiche liefern soll, ist daher berechtigt. Es ist aber so, dass das SIAM ein erfolgreiches Modell zur Beschreibung von Quantenpunkten darstellt und der Potentialverlauf der fRG-Simulation genau das ist, was man sich unter einem Quantenpunkt vorstellt, nämlich lokal gebundene Zustände, die die Periodizität eines Festkörpers stören. In diesem Sinn beschreiben die beiden Theorien das Gleiche und sollten demnach zumindest ähnliche Ergebnisse liefern.

6.1 Vorgehen

Die für den Vergleich relevanten Ausgabedaten der fRG-Simulation sind der Propagator am chemischen Potential $G_{j,i}^{\sigma,R}$, die Selbstenergie $(-\gamma_1)_{j,i}$, die Elektronendichte $n_{\sigma,i}$ und die Leitfähigkeit g_σ . Letztere dient am Ende zum eigentlichen Vergleich der fRG-Ergebnisse mit denen des Fermi-Liquid-Ansatzes. Die Indizes i und j stehen für Sites der Zentralregion. Alle Größen wurden in Abhängigkeit einer variablen Gate-Spannung V_g und eines variablen Magnetfeldes B berechnet. Das chemische Potential $\mu = 0$, die Wechselwirkungsstärke $U_0 = \tau$ und das Hopping $\tau = 1$ wurden für alle Simulationsdurchläufe gleich gewählt. Um die FL-Theorie auf die fRG-Daten anwenden zu können muss man sich deren zentrale Größe(n), die Eigenphase(n) der S-Matrix ansehen. Die fRG-Simulation liefert die spinabhängigen retardierten Green'schen Funktionen $G_{j,i}^{\sigma,R}$ der Zentralregion. Davon werden aber wie in Gleichung (12) zu sehen nur die Randterme benötigt, um die S-Matrix zu berechnen. Nach Diagonalisierung von S^σ ist es trivial, $\delta_{\sigma,-}$ und $\delta_{\sigma,+}$ zu bestimmen. Was an dieser Stelle bereits überprüft werden kann ist, ob die Landauer-Büttiker-Formel (16) und die Friedel-Summenregel (17a) erfüllt sind¹⁰. Tabelle 1 zeigt das Ergebnis dieses Konsistenzchecks. Der nächste Schritt des Vergleiches wäre nun die Fermi-Liquid-Parameter aus den Suszeptibilitäten und der Ableitungen nach ε_d mit (27) zu berechnen. Doch hier ist Vorsicht geboten. Während beim SIAM die symmetrische Eigenphase identisch null ist, verschwindet sie im System der fRG-Simulation nicht. Es sind deshalb Korrekturen nötig, damit die Formeln wieder Gültigkeit haben. Des Weiteren ist a priori unklar, wie man das Energieniveau der Störstelle ε_d aus den Daten extrahieren soll.

6.1.1 Bestimmung von ε_d

Ein wesentlicher Bestandteil des Vergleiches ist die Frage, was das Analogon zum Parameter ε_d des SIAM im System der fRG-Simulation sein sollte. Im Potentialtopf des fRG-Systems befindet sich nämlich potentiell mehr als nur ein Energieniveau. Für die Leitfähigkeit verantwortlich ist aber nur dasjenige am chemischen Potential. Da dieses

¹⁰Für Details zur Rechnung siehe Abschnitt 6.2.2

relevante Level je nach Tiefe des Potentialtopfes ein anderes ist, wurden für die Auswertung der Daten immer nur isolierte Kondopeaks betrachtet. Das hat den praktischen Vorteil, dass so über alle Werte von V_g das selbe Level die Leitfähigkeit bestimmt. Es bewegt sich sozusagen nur ein Level durch das chemische Potential. Nun könnte man natürlich durch das Berechnen der lokalen Zustandsdichte aus der Green'schen Funktion

$$\rho_i(\omega) = -\frac{1}{\pi} \Im(G_{ii}(\omega)) = -\frac{1}{\pi} \Im([\omega + i0^+ - (H_0 - \gamma_1)]^{-1}) \quad (39)$$

das Maximum bezüglich der Energie ω der Dichte bestimmen und hätte die Position dieses Levels damit bestimmt. Das Problem dabei ist nur, dass die Wechselwirkung zwischen den Elektronen die Maxima der lokalen Zustandsdichte verschiebt und deshalb der ω -Wert des Maximums keinesfalls zum Parameter ε_d , der unabhängig von der Wechselwirkung ist, korrespondieren kann. Die Nächste Überlegung wäre daher ein nicht-wechselwirkendes System $U_i = 0$ zu berechnen und davon die Maxima der lokalen Zustandsdichte als Energieniveau des SIAM-Hamiltonoperators zu verwenden. Mit dem Abschalten der Wechselwirkung, verschiebt sich auch der Gatespannungsbereich in dem das betrachtete Maximum der Leitfähigkeit liegt. Es ist jedoch nicht klar wie man den V_g -Bereich mit Wechselwirkung auf den verschobenen Bereich richtigerweise abbilden soll. Wäre die Abbildung mehr als nur eine Verschiebung, so würde das die Ableitung $\frac{\partial V_g}{\partial \varepsilon_d}$ und damit auch die FL-Parameter (vgl. z.B. Gleichungen (27)) beeinflussen. Der dritte mögliche und auch gewählte Weg zur Bestimmung von ε_d berücksichtigt gewissermaßen einen Teil der Wechselwirkung. Man betrachte zunächst ein System im tatsächlichen V_g -Bereich ohne Wechselwirkung. Jetzt addiere man zum Potential an der Stelle i den Term $U_i \tilde{n}_i$ wobei \tilde{n}_i die Anzahl aller Elektronen unterhalb des relevanten Niveaus sind.

$$\tilde{n}_i = \int_{-\infty}^{\tilde{\omega}} d\omega \rho_i(\omega). \quad (40)$$

Die Größe $\tilde{\omega}$ wird für jedes Maximum der Leitfähigkeit per Hand bestimmt. Siehe dazu Abbildung 5. Mit diesem veränderten Potential kann schließlich eine neue Zustandsdichte mit dem Hamiltonian $\tilde{H} = \sum_i (P_i + U_i \tilde{n}_i) c_i^\dagger c_i + H_{\text{hop}}$ berechnet werden, deren Maximum am chemischen Potential dann für alle V_g bestimmt wird, was zu einer Funktion $\varepsilon_d(V_g)$ führt. Mit diesem Vorgehen berücksichtigt man die Hartree-Verschiebung, also die Verschiebung des relevanten Levels durch Elektronen unterhalb desselben. Das relevante Level selbst wird jedoch ohne Wechselwirkung zwischen den sich darauf befindenden Elektronen betrachtet. Deshalb sollte die bestimmte Levelposition eine gute Analogie zum Parameter ε_d des SIAM darstellen.

6.1.2 Korrekturen durch nicht-verschwindende Phase $\delta_{\sigma,a}$

Der zweite problematische Punkt beim Vergleich der FL-Theorie mit dem fRG-Modell ist, dass im Fall des SIAM die antisymmetrische Phase $\delta_{\sigma,a}$ identisch null ist, was aber im fRG-Modell nicht zutrifft. Möchte man dennoch Fermi-Liquid-Parameter in adäquater Weise bestimmen, so muss man sich überlegen, welche Korrekturen nötig sind. Der Einfachheit halber möchte man weiterhin nur die Entwicklung von $\delta_{\sigma,-}$ betrachten. Diese Entwicklung unterscheidet sich im nicht-SIAM Fall zwar von der Taylorentwicklung von $\delta_{\sigma,+}$, letztere Phase ist jedoch für die Berechnung von Leitfähigkeiten

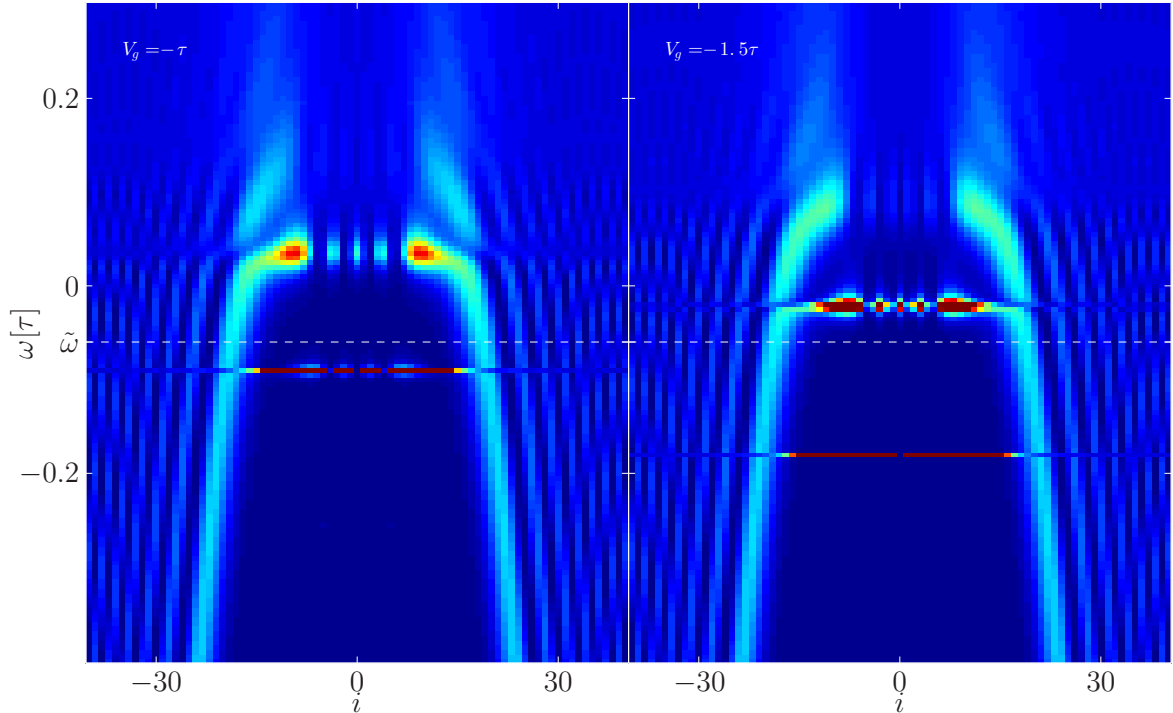


Abb. 5. Qualitative Darstellung der lokalen Zustandsdichte in der Nähe des chemischen Potentials $\mu = 0$ für zwei verschiedene Werte von V_g . Wie zu sehen ist, bewegt sich das Energieniveau mit den fünf Maxima durch das chemische Potential, während V_g durchgeföhren wird. Das korrespondiert zum ganz rechten Leitfähigkeitspeak in Abbildung 6. Das darunter liegende Level hat eine gerade Zahl an Maxima, was dazu führt, dass nicht $\delta_{\sigma,s}$ sondern $\delta_{\sigma,a}$ eine Phasenverschiebung erföhrt (Abb. 6, zweiter Peak von rechts).

$\tilde{\omega}$ wurde derart bestimmt, dass für alle $V_g \in [-1.5\tau, -\tau]$ das relevante Level (hier: fünf Maxima) darüber und alle Levels niedrigerer Energie darunter liegen, um keine Wechselwirkungseffekte auf dem relevanten Level, wohl aber die Hartree-Verschiebung zu berücksichtigen.

irrelevant. Man nehme also an, dass für $\delta_{\sigma,-}$ die gleiche Entwicklung wie in [mora14] gilt:

$$\delta_{\sigma,-}(B) = \delta_0 + \frac{\sigma}{2}(\alpha_1 + \phi_1)B + \frac{1}{4}(\alpha_2 + \phi_2/4)B^2. \quad (41)$$

Gleichzeitig sollen die Gleichungen (22a) bis (22c) als weiterhin gültig angenommen werden (Dass diese Annahme nicht zutrifft, wird später gezeigt werden). Die Stelle, an der aber eine Korrektur eingeföhrt werden muss, ist bei der Anwendung der Friedel-Summenregel $\pi n_{d\sigma} = \delta_{\sigma,+}$. Im SIAM gilt $\delta_{\sigma,+} = \delta_{\sigma,-}$, weshalb Gleichung (24) in diesem Fall richtig ist. Im Allgemeinen lässt sich die Friedel-Summenregel folgendermaßen durch $\delta_{\sigma,-}$ ausdrücken:

$$\pi n_{\sigma} = \delta_{\sigma,+} = \frac{1}{2}(\delta_{\sigma,s} + \delta_{\sigma,a} - 2\delta_{\text{ref}}) = \frac{1}{2}(\delta_{\sigma,s} - \delta_{\sigma,a} + 2\delta_{\sigma,a} - 2\delta_{\text{ref}}) = \delta_{\sigma,-} + \delta_{\sigma,a} - \delta_{\text{ref}}. \quad (42)$$

Damit können jetzt wie in [mora14] (Gleichungen 21 und 22) die Suszeptibilitäten berechnet, und durch Fermi-Liquid-Parameter dargestellt werden.

Ladungssuszeptibilität:

$$\chi_c = - \left. \frac{\partial n_d}{\partial \varepsilon_d} \right|_{B=0} = - \left. \frac{\partial}{\partial \varepsilon_d} (n_{d,\uparrow} + n_{d,\downarrow}) \right|_{B=0} \quad (43a)$$

$$= - \frac{2}{\pi} \delta'_0 - \frac{1}{\pi} \left. \frac{\partial}{\partial \varepsilon_d} (\delta_{\uparrow,a} + \delta_{\downarrow,a}) \right|_{B=0} \quad (43b)$$

$$= \frac{2}{\pi} (\alpha_1 - \phi_1) - \frac{1}{\pi} \left. \frac{\partial}{\partial \varepsilon_d} (\delta_{\uparrow,a} + \delta_{\downarrow,a}) \right|_{B=0}. \quad (43c)$$

Spinsuszeptibilität:

$$\chi_s = \left. \frac{\partial m_d}{\partial B} \right|_{B=0} = \frac{1}{2} \left. \frac{\partial}{\partial B} (n_{d,\uparrow} - n_{d,\downarrow}) \right|_{B=0} \quad (44a)$$

$$= \frac{1}{2\pi} (\alpha_1 + \phi_1) + \frac{1}{2\pi} \left. \frac{\partial}{\partial B} (\delta_{\uparrow,a} - \delta_{\downarrow,a}) \right|_{B=0}. \quad (44b)$$

Die Korrekturen führen folglich dazu, dass in den Gleichungen (27) χ_c durch $\chi_c + \frac{1}{\pi} \left. \frac{\partial}{\partial \varepsilon_d} (\delta_{\uparrow,a} + \delta_{\downarrow,a}) \right|_{B=0}$ und χ_s durch $\chi_s - \frac{1}{2\pi} \left. \frac{\partial}{\partial B} (\delta_{\uparrow,a} - \delta_{\downarrow,a}) \right|_{B=0}$ ersetzt werden muss. Analoges gilt natürlich auch für die Ableitungen der Suszeptibilitäten.

6.2 Ergebnisse

Bevor die eigentlichen Ergebnisse präsentiert werden, soll noch kurz darauf eingegangen werden, wie die oben erwähnten Leitfähigkeitsmaxima entstehen. Vergrößert man im fRG-System den Betrag von V_g ($V_g < 0$), so erhöht man die Tiefe des Quantenpunktes, was zur Folge hat, dass sich energetisch oberhalb des Potentialtopfes neue Energieniveaus ausbilden und bei weiterer Vertiefung des Potentials durch das chemische Potential hindurch und in den Quantenpunkt hinein bewegen. Befindet sich ein Energieniveau am chemischen Potential, so können sich Elektronen leichter von der einen Seite des Quantenpunktes zur anderen bewegen und die Leitfähigkeit ist hoch. Liegt das chemische Potential aber zwischen zwei Energieniveaus, gibt es diese Brücke für die Elektronen nicht. Die Leitfähigkeit wird in diesem Fall also durch die Tunnelwahrscheinlichkeit der Elektronen durch die beiden Potentialwände bestimmt und ist dementsprechend gering. Es kommt zur Ausbildung von Minima und Maxima der Leitfähigkeit $g(V_g)$. Zur Illustration siehe Abbildung 6.

6.2.1 Die Phasen der S-Matrix

Die ersten beiden Größen, die aus den fRG-Daten berechnet werden, sind die Eigenphasen der S-Matrix. Betrachtet man Abbildung 6, so sieht man, dass $\delta_{\sigma,s}$ und $\delta_{\sigma,a}$ vom einen Leitfähigkeitsmaximum zum nächsten ihre Rolle tauschen. Die Phasenverschiebung einer der beiden ändert sich an einem Maximum stark, während die andere annähernd konstant bleibt. Diese Resonanzen lassen sich verstehen, wenn man einen Blick auf die lokale Zustandsdichte wirft. Dabei stellt man fest, dass Dichtemaxima,

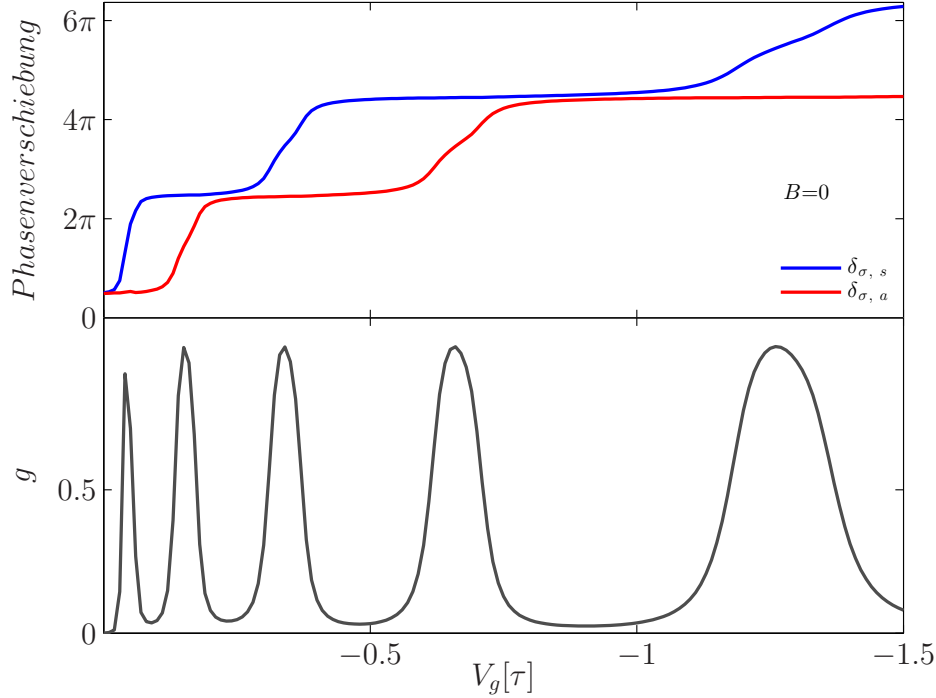


Abb. 6. fRG-Daten bei $B = 0$. oben: Phasenverschiebung symmetrischer (blau) und antisymmetrischer (rot) Streuzustände in Abhängigkeit der Gate-Spannung V_g . unten: Leitfähigkeit $g(V_g)$. Die Leitfähigkeit bildet immer dann ein Maximum aus, wenn ein Energieniveau das chemische Potential passiert. Man sieht, dass von Maximum zu Maximum einmal $\delta_{\sigma,s}$ und einmal $\delta_{\sigma,a}$ einen Sprung von ungefähr 2π macht.

spricht Energieniveaus, mit gerader Anzahl an Knoten (ungerader Zahl an Bäuchen) eine Phasenverschiebung bei $\delta_{\sigma,s}$ verursachen und entsprechende Maxima ungerader Knotenzahl zu einer Phasenverschiebung bei $\delta_{\sigma,a}$ führen (vgl. Abb. 5,6). An Abbildung 6 wird außerdem deutlich, dass die Anwendung der Fermi-Liquid-Theorie ohne die Korrekturen aus Abschnitt 6.1.2 nicht funktionieren kann, wenn gerade *und* ungerade Resonanzen in gleicher Weise beschrieben werden wollen. Man könnte aber durchaus die Frage stellen, wieso im Fall $\delta_{\sigma,a} \approx const.$ Probleme auftreten sollen, wenn die Korrektur von χ_c lediglich durch die Ableitung einer fast konstanten Phase nach ε_d gegeben ist¹¹. In der Tat hat in diesem Fall die Korrektur von χ_c keinen nennenswerten Effekt. Was aber ins Gewicht fällt ist die Abhängigkeit der Phasen vom Magnetfeld, die nicht verschwindet. Die nachfolgenden Ergebnisse sollen daher immer einschließlich der Korrekturen aus Abschnitt 6.1.2 betrachtet werden.

6.2.2 Überprüfung der Friedel-Summenregel und der Landauer-Büttiker-Formel

Nachdem man sich nun mit dem Verhalten der Phasen der S-Matrix vertraut gemacht hat, ist es wichtig, die Gültigkeit zweier der grundlegenden Formeln der Fermi-Liquid-Theorie für das SIAM zu überprüfen. Dieses sind die Friedel-Summenregel (17a)

¹¹Die Ableitung nach ε_d ist nach Kettenregel $\partial_{\varepsilon_d} = \partial_{\varepsilon_d} V_g \partial_{V_g}$.

sowie die Landauer-Büttiker-Formel (16). Die beiden Formeln machen eine Aussage darüber wie die Phasen der S-Matrix mit der Teilchenzahl im Streuzentrum und der Leitfähigkeit des Systems zusammenhängen. Die Anzahl von Elektronen mit Spin σ in der Zentralregion wurde dabei als Summe der Elektronendichten $n_{\sigma,i}$ über alle Sites i der Zentralregion berechnet: $n_\sigma = \sum_i n_{\sigma,i}$. Diese lokalen Teilchendichten $n_{\sigma,i}$ sowie die Leitfähigkeit g werden direkt vom fRG-Programm geliefert. Die Referenzphase δ_{ref} wurde aus praktischen Gründen anhand des Datensatzes mit der größten Gate-Spannung V_g bei $B = 0$ festgelegt.

Bei einer Auswertung eines V_g -Bereiches werden für jeden Wert von V_g mehrere Datensätze zu jeweils verschiedenen Magnetfeldwerten B generiert. Aus diesem Grund soll der Fehler der Friedel-Summenregel (FSR) und der Landauer-Büttiker-Formel (LB) als Maximum über V_g - und Magnetfeldintervall definiert sein:

$$\delta_g = \max_{V_g, B} \frac{|g_{\text{fRG}} - g_{\text{LB}}|}{|g_{\text{fRG}} + g_{\text{LB}}|}, \quad \delta_n = \max_{V_g, B} \frac{|n_{\text{fRG}} - n_{\text{FSR}}|}{|n_{\text{fRG}} + n_{\text{FSR}}|}, \quad (45a)$$

$$\Delta_g = \max_{V_g, B} |g_{\text{fRG}} - g_{\text{LB}}|, \quad \Delta_n = \max_{V_g, B} |n_{\text{fRG}} - n_{\text{FSR}}|. \quad (45b)$$

$g = g(V_i, B_j)$ ist dabei natürlich die Leitfähigkeit und $n = n(V_i, B_j)$ ist die Elektronenzahl ($n = n_\uparrow + n_\downarrow$) in der gesamten Zentralregion. Tabelle 1 zeigt die so definierten Fehler für drei verschiedene Leitfähigkeitspeaks.

V_g/τ	$B/(10^{-4}\tau)$	$\Delta_g/10^{-14}$	$\delta_g/10^{-14}$	\bar{n}	$\Delta_n/10^{-3}$	$\delta_n/10^{-3}$
$[-0.09, 0]$	$[0, 4]$	1.4	1.4	34	0.9	2.9
$[-0.85, -0.5]$	$[0, 4]$	0.64	0.32	40	1.9	2.5
$[-1.5, -1]$	$[0, 4]$	0.51	0.31	42	1.6	0.0019

Tabelle 1. Fehlerbetrachtung für die Landauer-Büttiker-Formel und die Friedel-Summenregel. \bar{n} ist dabei der Mittelwert von n im entsprechenden V_g - B -Bereich und soll die Größenordnung verdeutlichen. Eine entsprechende Vergleichsgröße für g ist $g \approx 0.5$. Siehe dazu zum Beispiel Abbildung 6.

6.2.3 Fermi-Liquid-Theorie

Die Berechnung der Fermi-Liquid-Parameter ist konzeptionell nicht schwierig, sobald man n_σ und daraus Suszeptibilitäten berechnet hat, und die Position der Energieniveaus $\varepsilon_d(V_g)$ in Abhängigkeit der Gate-Spannung bestimmt wurde. Eine technische Schwierigkeit ergibt sich dann aber doch. Diese kommt daher, dass die Energieniveaus nur mit endlicher Genauigkeit bestimmt werden können. Möchte man nun Ableitungen durch klassische finite Differenzen nähern, so ergeben sich speziell für die zweiten Ableitungen große Ungenauigkeiten. Der Weg, der deshalb gewählt wurde, ist, dass nicht wie bei finiten Differenzen zwischen den Funktionswerten interpoliert wurde, sondern in einer passenden Umgebungen mehrerer Stützstellen ein quadratisches Polynom gefittet wurde.

Hat man die Problematik der Berechnung der Ableitungen in den Griff bekommen, lassen sich die Fermi-Liquid-Parameter leicht berechnen. Abbildung 7 zeigt den

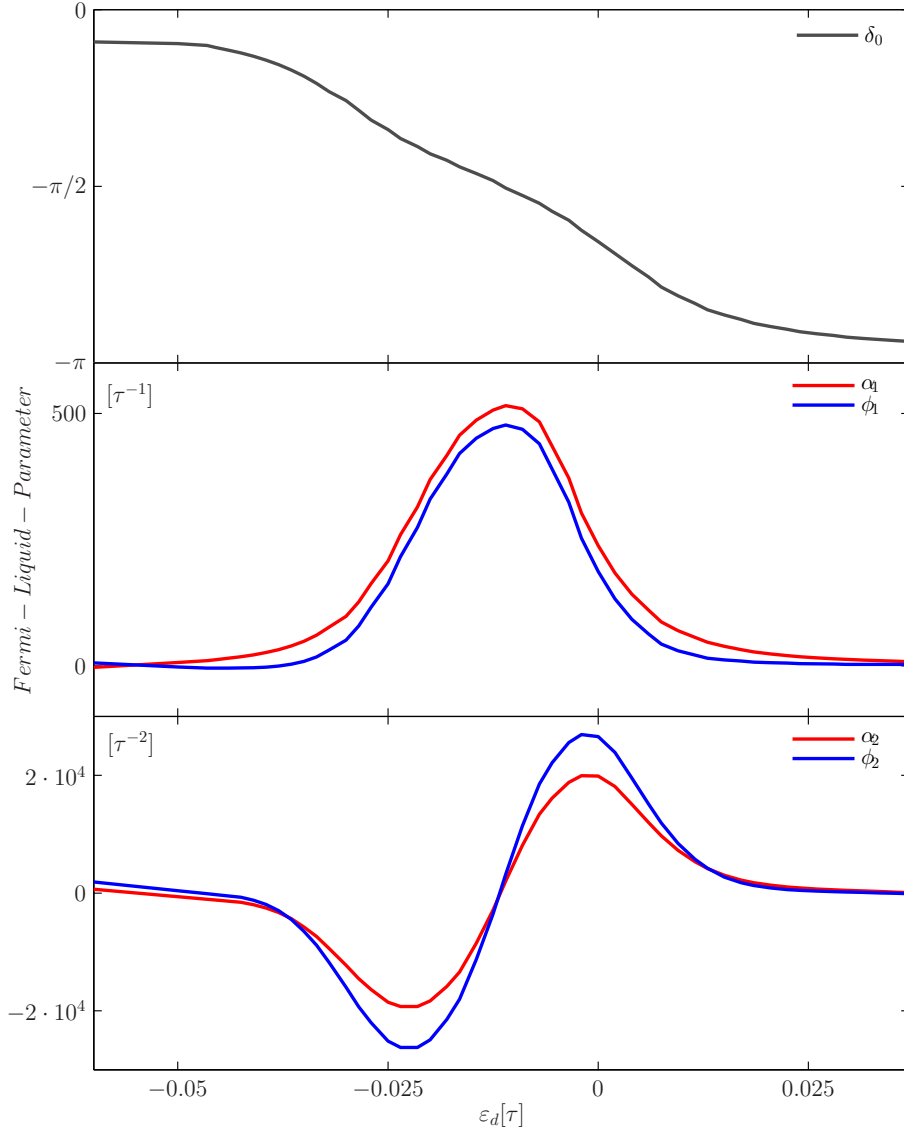


Abb. 7. Fermi-Liquid Parameter in Abhängigkeit der Levelsposition ε_d . Zur Berechnung wurden fRG-Daten bei Magnetfeldern $|B| \leq 10^{-4}\tau$ und Gatespannungen im Bereich von $-\tau$ bis -1.5τ erzeugt. Auffallend ist die gute qualitative Übereinstimmung mit Abbildung 2 aus [mora14]. Auch die Größenordnung der Parameter liegt in einem vernünftigen Bereich, wenn man Δ aus [mora14] über lineare Skalierung der ε_d -Achse als $\Delta \approx \frac{1}{100}\tau$ schätzt. Damit wären $\Delta\alpha_1$ und $\Delta\phi_1$ und auch $\Delta^2\alpha_2$ und $\Delta^2\phi_2$ ungefähr von Größenordnung 1, wie in [mora14]. Die Verschiebung von δ_0 um $-\pi$ gegenüber [mora14], Abbildung 2, hat keine Auswirkung auf die Transportkoeffizienten, da nur $\cos(2\delta_0)$ und $\sin(2\delta_0)$ in die entsprechenden Gleichungen ((35),(33),(32)) eingehen. Die Verschiebung ist durch die Art der Datenauswertung bedingt. $\delta_{\sigma,-}$ kann nach Gleichung (15b) nur modulo π bestimmt werden. Man müsste beispielsweise Abbildung 6 verwenden, um die „echten“ Phasen zu bestimmen. Damit gälte dann auch für den Bereich $V_g \in [-1.5\tau, -\tau]$: $\delta_{\sigma,-} = \frac{1}{2}(\delta_{\sigma,s} - \delta_{\sigma,a}) > 0$.

Verlauf der Parameter in Abhängigkeit der Levelposition. Dabei fällt die qualitative Übereinstimmung mit Abbildung 2 aus [mora14] auf. Eine qualitative Beurteilung der Ergebnisse ist allerdings nicht sehr zufriedenstellend, weshalb die Fermi-Liquid-Parameter nun ihrem eigentlichen Zweck zugeführt werden sollen, Aussagen über die Leitfähigkeit des Systems in Abhängigkeit eines Magnetfeldes zu machen. Die Überprüfung des Zusammenhangs ist möglich, da das fRG-Programm die Leitfähigkeit $g(V_g, B)$ als Ausgabewert liefert. Für jede Gate-Spannung kann man versuchen eine quadratische Funktion $g_{V_g}(B) = g_0 + g_1 B + g_2 B^2$ an den Verlauf von $g(V_g, B)$ zu fitten. Der Parameter g_2 sollte dann gleich \tilde{c}_B sein. Der oberste Plot von Abbildung 8 zeigt den Vergleich zwischen den beiden Größen für drei verschiedene Leitfähigkeitspeaks. Man sieht, dass die Beschreibung über Fermi-Liquid-Parameter tendenziell am besten für tiefe Quantenpunkte $|V_g| \gg 0$ und Levels oberhalb des chemischen Potentials ($\varepsilon_d > 0$) funktioniert. Möchte man der Ursache für die Fehler auf den Grund gehen, so kann man dafür die Gleichungen (30) verwenden. Die Ableitungen von $\delta_{\sigma,-}$ nach dem Magnetfeld lassen sich beispielsweise mit einem quadratischen Fit von $\delta_{\sigma,-}(B)$ finden. Danach sollte der lineare Koeffizient des Fits gleich $\frac{\sigma}{2}(\alpha_1 + \phi_1)$ und der quadratische Koeffizient gleich $\frac{1}{4}(\alpha_2 + \phi_2/4)$ sein. Das Ergebnis des Vergleichs (Abbildung 8, mittlerer und unterer Plot) ist, dass der lineare Term besser als der quadratische approximiert wird. Dass $\frac{\sigma}{2}(\alpha_1 + \phi_1)$ den Erwartungen näher kommt, ist keinesfalls überraschend, wenn man bereits weiß, dass die Friedel-Summenregel erfüllt ist (vgl. Tabelle 1). Per Definition muss diese Kombination von α_1 und ϕ_1 zum korrekten Ergebnis führen. Der entstehende Fehler ist deshalb auf die Berechnung der Ableitungen zurückzuführen.

Anders verhält es sich aber mit α_2 und ϕ_2 . Die Formel zur Berechnung der beiden aus den Ableitungen der Suszeptibilitäten beruht nämlich auf den Gleichungen (22), die eine Folgerung aus der Taylorentwicklung von $\delta_{\sigma,-}$ sind. Diese Entwicklung wiederum wurde unter der Annahme gemacht, dass die antisymmetrische Eigenphase $\delta_{\sigma,a}$ der S-Matrix identisch null ist. Das allerdings ist wie bereits gezeigt (Abbildung 6) im Modell des über viele Sites ausgedehnten Streuzentrum nicht erfüllt. Die Abweichung verwundert deshalb nicht und lässt sich wahrscheinlich durch Wechselwirkung symmetrischer und antisymmetrischer Streuzustände erklären.

Nachdem geklärt wurde, warum welche Fehler an welchen Stellen auftreten, ist es lohnend, sich die Auswirkungen der Fehler anzusehen. Der Term $\frac{\sigma}{2}(\alpha_1 + \phi_1)$ geht quadriert in die Formel für c_B ein, weshalb er in der selben Größenordnung wie $\frac{1}{4}(\alpha_2 + \phi_2/4)$ liegt. Ausschlaggebend dafür, wie sehr die Fehler der beiden Terme jeweils zum Gesamtfehler beitragen, ist die Tatsache, dass der eine Ausdruck multipliziert mit $\cos(2\delta_0)$ und der andere multipliziert mit $\sin(2\delta_0)$ zum Transportkoeffizienten c_B beiträgt. Der Verlauf von δ_0 ist in Abbildung 7 gezeigt und kann herangezogen werden, um Gewichtung der Fehler nachzuvollziehen. So sieht man z.B., dass im Bereich des Leitfähigkeitsmaximums α_1 und ϕ_1 dominieren¹².

Jetzt stellt sich noch die Frage, wie gut die Vorhersage für die beiden Koeffizienten c_V und c_T sein wird. Betrachtet man die Formeln für diese (Gl. (32),(33)), so stellt man fest, dass sie der Formel für c_B sehr ähnlich sind. Die Fermi-Liquid-Parameter

¹²Dort ist $2\delta_0 \approx -\pi$ und damit $\sin(2\delta_0) \approx 0$.

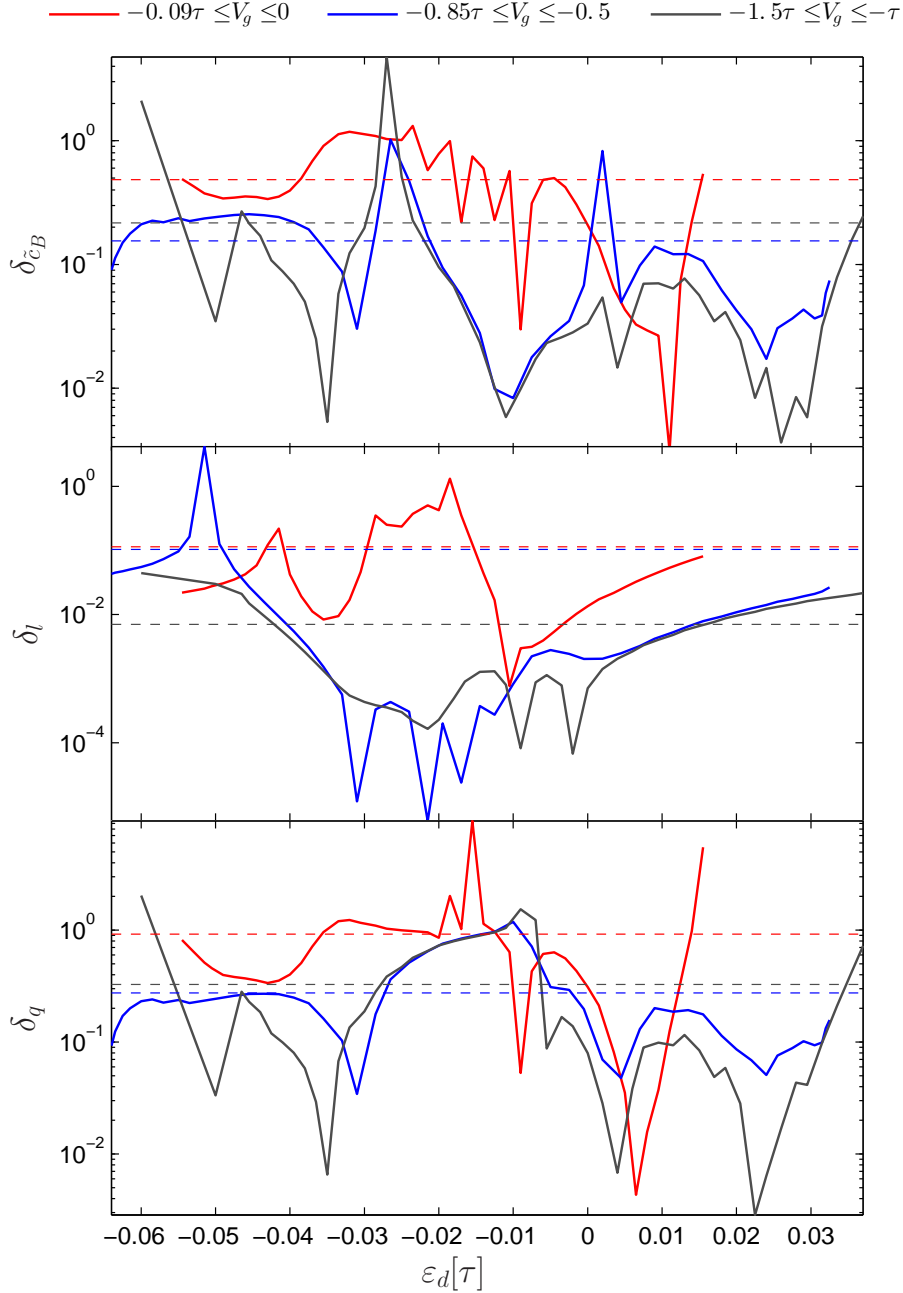


Abb. 8. Fehlerbetrachtung für drei verschiedene Leitfähigkeitspeaks. Gezeigt ist der jeweils der relative Fehler $\delta_x = \frac{|x_{\text{fRG}} - x_{\text{FL}}|}{|x_{\text{fRG}} + x_{\text{FL}}|}$ (also *keine* Phase) in Abhängigkeit der Levelposition (gemessen relativ zum chemischen Potential). Im oberen Plot wird \tilde{c}_B , berechnet nach Gleichung (31), verglichen mit einem quadratischen Fit in B der Leitfähigkeitsdaten der fRG-Simulation, wie in 6.2.3 beschrieben. Die unteren beiden Plots zeigen die Abweichung von $\frac{\sigma}{2}(\alpha_1 + \phi_1)$ und $\frac{1}{4}(\alpha_2 + \phi_2/4)$ von den Größen l und q , welche durch einen quadratischen Fit der Phase $\delta_{\sigma,-} \approx \delta_{\sigma,-}^0 + lB + qB^2$ definiert sind. Den Gleichungen (30) zufolge sollte dieser Zusammenhang Gültigkeit haben. Die gestrichelten Linien kennzeichnen jeweils die Mittelwerte der relativen Fehler.

α_2 und ϕ_2 tragen in allen drei Fällen als Linearkombination multipliziert mit $\sin(2\delta_0)$ bei. α_1 und ϕ_1 werden in allen Fällen quadriert, linear kombiniert und mit $\cos(2\delta_0)$ multipliziert. Diese Ähnlichkeit alleine gibt schon Anlass zur Vermutung, dass c_V und c_T quantitative ähnliche Fehler wie c_B respektive \tilde{c}_B aufweisen werden. Eine strenge Fehlerabschätzung erweist sich jedoch als schwierig, weil man keine Vergleichswerte für die einzelnen Parameter, sondern nur für die Kombinationen $\frac{\sigma}{2}(\alpha_1 + \phi_1)$ und $\frac{1}{4}(\alpha_2 + \phi_2/4)$ aus der fRG-Simulation erhält.

Schließlich soll nun noch ein letzter Blick auf alle drei Transportkoeffizienten geworfen werden. Abbildung 3 zeigt die Größenverhältnisse von \tilde{c}_B , \tilde{c}_V und \tilde{c}_T .

7 Fazit

Zum Einen hat die Anwendung der Fermi-Liquid-Theorie für das Single-Impurity Anderson Modell auf das System des fRG-Ansatzes von Lukas Weidinger gezeigt, dass die Beschreibung von Quantenpunkten durch das SIAM im Rahmen dieses Vergleiches gut funktioniert. Es bleiben dennoch die Unsicherheiten bezüglich der Temperatur- und Source-Drain-Spannungsabhängigkeit der Leitfähigkeitskoeffizienten bestehen. Es wäre daher interessant, die beschriebene Methodik noch auf eine Computersimulation anzuwenden, die in der Lage ist, entsprechende Daten zu liefern.

Zum Anderen konnten über die FL-Beschreibung hinausgehende Effekte beobachtet und verstanden, sowie Probleme gelöst werden. Da wäre einerseits das Verhalten der Eigenphasen der S-Matrix, die von einem Leitfähigkeitsmaximum zum Nächsten ihre Rollen tauschen. Dieser Rollentausch, der sich darauf bezieht, welche der Phasen bei welchem Peak eine Verschiebung erfährt, korrespondiert zur Anzahl der Knoten und Bäuche in der lokalen Zustandsdichte, wie in Abschnitt 6.2.1 beschrieben. Da dieser Sachverhalt zu Beginn der Arbeit noch nicht klar gewesen ist, sind auch Notwendigkeit und Art der Korrekturen zur FL-Theorie (vgl. Abschnitt 6.1.2) erst im Laufe der Arbeit deutlich geworden. Andererseits war das Bestimmen einer vernünftigen Analogie zum Impurity-Level ε_d eine gewisse Herausforderung. Diese konnte aber durch das Einbeziehen der Hartree-Verschiebung durch Elektronen, die sich unterhalb des relevanten Levels befinden, in adäquater, wenn auch technisch etwas aufwendiger Weise bewältigt werden (Siehe Abschnitt 6.1.1).

Leider war aber im Rahmen dieser Bachelorarbeit nicht genug Zeit, um den Vergleich der beiden Ansätze mit anderen Parametern durchzuführen und dadurch beispielsweise den Einfluss der Wechselwirkungsstärke U_i oder der genauen Potentialform P_i zu untersuchen. Die meisten der zehn Wochen der Bearbeitung der Bachelorarbeit habe ich damit zugebracht, Auswertungscode für die fRG-Daten zu schreiben. Das brachte zwar einiges an Programmiererfahrung, lies jedoch nur eine oberflächliche Einarbeitung in die theoretischen Hintergründe zu. Darauf ist auch der eher zusammenfassende und weniger erklärende Charakter des theoretischen Teils der Arbeit zurückzuführen.

Alles in Allem bin ich mit dem Ergebnis aber durchaus zufrieden und freue mich schon auf ein tiefer gehendes Studium der theoretischen Festkörper- und Nanophysik.

Literatur

- [mora14] C. Mora, C. P. Moca, J. v. Delft, G. Zarand, *Fermi-liquid theory for the single impurity Anderson model*, arXiv:1409.3451v1 (2014)
- [taylor72] John R. Taylor, *Scattering Theory: The Quantum Theory of Nonrelativistic Collisions*, Wiley (1972)
- [zilly10] Matías Zilly, *Electronic conduction in linear quantum systems: Coherent transport and the effects of decoherence*, http://duepublico.uni-duisburg-essen.de/servlets/DocumentServlet/Document-24279/dissertation_zilly.pdf, Universität Duisburg (2010)
- [noz74] Philippe Nozières, *A Fermi-Liquid Description of the Kondo Problem at Low Temperatures*, Journal of Low Temperature Physics, Vol. 17, Nos. 1/2 (1974)
- [weid14] Lukas Weidinger, *Longer-ranged interactions in quantum point contacts*, Masterarbeit, Ludwig-Maximilians-Universität (2014)
- [bauer14] F. Bauer, J. Heyder, E. Schubert, D. Borowsky, D. Taubert, B. Bruognolo, D. Schuh, W. Wegscheider, J. v. Delft, S. Ludwig, *Microscopic origin of the ‘0.7-anomaly’ in quantum point contacts*, Nature 501, 73-78 (2013)
- [gold98] D. Goldhaber-Gordon, Hadas Shtrikman, D. Mahalu, David Abusch-Magder, U. Meirav, M. A. Kastner, *Kondo effect in a single-electron transistor*, Nature 391, 156-159 (1998)
- [crone98] S. M. Cronenwett, T. H. Oosterkamp, L. P. Kouwenhoven, *A Tunable Kondo Effect in Quantum Dots*, Science 281, 540-544 (1998)

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich allen Personen meinen Dank aussprechen, die es mir ermöglicht haben, diese Arbeit zu schreiben.

Ich möchte mich bei meinen Eltern für die anhaltende moralische und finanzielle Unterstützung im Studium bedanken.

Bei Professor von Delft möchte ich mich für den Vorschlag dieses sehr interessanten Themas bedanken, dafür, dass ich die Arbeit an seinem Lehrstuhl schreiben durfte und für die bereitgestellten Mittel.

Ein ganz besonderer Dank gilt meinen beiden Betreuern Lukas Weidinger und Dennis Schimmel, die mich in jeder Phase der Arbeit tatkräftig unterstützt haben und stets ein offenes Ohr für alle meiner zahlreichen Fragen hatten. Ohne deren Hilfe und Rückmeldung wäre die Arbeit lange nicht das, was sie schließlich geworden ist.

Erklärung

Hiermit bestätige ich, dass ich diese Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

München, den 3. August 2015

Philipp Rosenberger