

INAUGURAL-DISSERTATION

zur

Erlangung der Doktorwürde

der

Naturwissenschaftlich-Mathematischen

Gesamtfakultät

der Ruprecht-Karls-Universität

Heidelberg

vorgelegt von

Dipl.-Phys. Eberhard Vogel

aus Mannheim

Tag der mündlichen Prüfung: 9.11.2005

Flußgleichungen für das Kondo-Modell

Gutachter: Prof. Dr. Franz Wegner

Prof. Dr. Heinz Horner

Flußgleichungen für das Kondo-Modell

In der vorliegenden Arbeit werden das Ein-Kanal-Kondo-Modell (1CK) und das Zwei-Kanal-Kondo-Modell (2CK) untersucht. Das Ein-Kanal-Kondo-Modell beschreibt ein System aus Leitungselektronen und einer lokalisierten, spinbehafteten Störstelle, die untereinander antiferromagnetisch wechselwirken. Das Zwei-Kanal-Kondo-Modell erweitert dieses Modell um ein entartetes Leitungselektronenband. Die Untersuchung erfolgt für den Tieftemperaturfall mit der Methode des Flußgleichungsverfahrens. Durch die kontinuierliche Transformation wird erreicht, daß diejenigen Anteile des Hamiltonoperators, welche Übergängen von Elektronenzuständen verschiedener Seiten der Fermikante, das heißt quasi-teilchenzahlverletzenden Vorgängen, entsprechen, eliminiert werden. Durch Störungsrechnung werden die durch den Fluß veränderten Kopplungsstärken unter Einbeziehung einer Zwei-Teilchen-Wechselwirkung in 2. Ordnung erhalten. Mit diesem transformierten Hamiltonoperator und einem Variationsansatz wird die Absenkung der Grundzustandsenergie im Ein-Kanal-Kondo-Modell ermittelt. Daraus ergibt sich unmittelbar die Kondo-Temperatur. Außerdem wird nachgewiesen, daß es sich um einen Singulett-Zustand handelt. Bei der Betrachtung des Zwei-Kanal-Kondo-Modells mit einem erweiterten Variationsansatz kann gezeigt werden, daß im Grundzustand eine Überkompensation des Störstellenspins vorliegt. Die Grundzustandsenergie ist auch hier in exponentieller Abhängigkeit von der Kopplungsstärke abgesenkt. Die Werte für die Kondo-Temperaturen entsprechen den bisher mit anderen Methoden erbrachten Ergebnissen.

Flow-equations for the Kondo model

In this paper both the One-Channel Kondo s-d model (1CK), i.e. a system consisting of conduction electrons and a localized spin coupled by an antiferromagnetic exchange interaction, both the Two-Channel Kondo model (2CK), that is an extension of 1CK with a degenerate channel of conduction electrons, are analyzed in case of low temperature by means of the method of flow-equations. The elimination of those parts of the Hamiltonian corresponding to transitions of electron states of different sides of the Fermi edge, i.e. processes of changing the number of quasi-particles, is performed by continuous transformation. By perturbation expansion the coupling matrix elements modified by the flow are preserved in second order under consideration of interactions between two particles. With this transformed Hamiltonian and a variational ansatz the lowering of the ground state's energy of 1CK is calculated. By this the Kondo temperature is obtained immediately, the existence of a singlet bound state is also shown. Afterwards in a similar ansatz the 2CK is investigated. The lowering of the ground state's energy in exponentiell dependence of the coupling constant is as shown as the over-compensation of the spin of the impurity by the electrons of the two channels. Again the value of the Kondo temperature is in the range of the results obtained so far by other methods.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Das Modell	10
3	Die Methode: Das Flußgleichungsverfahren	13
4	Die Flußgleichungen des Ein-Kanal-Kondo-Modells	17
4.1	Das Aufstellen der Gleichungen	17
4.2	Entwicklung und Integration der Flußgleichungen	22
4.2.1	Die Ordnung J_0^0	23
4.2.2	Die Ordnung J_0^1	24
4.2.3	Auswertung der Gleichungen für $\tilde{J}_{kp}(\infty)$ und $\tilde{V}_{kp}(\infty)$	29
4.2.4	Berechnung von $\tilde{Z}_{kpk'p'}(\infty)$	30
5	Der Grundzustand des Ein-Kanal-Kondo-Modells und die Kondo-Temperatur	33
5.1	Der Grundzustand	34
5.2	Die Wellenfunktion des Grundzustandes	40
5.3	Die Kondo-Temperatur	41
6	Die Flußgleichungen und der Grundzustand des Zwei-Kanal-Kondo-Modells	43
6.1	Die Flußgleichungen und deren Lösungen	45
6.2	Der Grundzustand	49
6.2.1	Klassifizierung der Zustände	49
6.2.2	Untersuchung des Zustandes $(2, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$	51
6.2.3	Untersuchung des Zustandes $(2, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2})$	57

6.2.4	Untersuchung der übrigen Zustände	58
6.2.5	Untersuchung anderer Ansätze	59
6.2.6	Zusammenfassung	60
6.3	Die Entropie des Grundzustandes	61
7	Zusammenfassung und Ausblick	63
A	Zwei-Niveau-System	67
B	Faktorisierbarkeit	73
C	Integration	75
D	Zwei-Kanal-Kondo-Modell in Ordnung J^2	77
E	Teilchen-Loch-Anregung beim Zwei-Kanal-Kondo-Modell	87
F	Pascal-Programm	89

1. Einleitung

1934 stellte de Haas bei der Messung des elektrischen Widerstandes von Gold hoher Reinheit eine Verletzung der Matthiessenschen Regel fest [Ha]. Die Matthiessensche Regel besagt, daß sich der elektrische Widerstand eines Leiters in einen temperaturunabhängigen Restwiderstand, welcher auf Streuung der Leitungselektronen an Gitterdefekten beruht, und einen mit der Temperatur monoton wachsenden Widerstandsanteil, der die Elektron-Phonon-Streuung widerspiegelt, zerlegen läßt. De Haas beobachtete jedoch, daß von sehr tiefen Temperaturen ($T = 1$ K) kommend der Widerstand zuerst abfiel, bei $T_0 = 3,7$ K ein Minimum durchlief und erst danach monoton anstieg. Spätere Untersuchungen wiesen nach, daß die Tiefe des Minimums direkt proportional zur Konzentration der Verunreinigungen ist, wobei die Verunreinigungen 3d-Übergangsmetalle wie zum Beispiel Eisen waren. Außerdem wurde festgestellt, daß die Fremdatome Auswirkungen auch auf andere Materialkonstanten wie zum Beispiel die magnetische Suszeptibilität oder die spezifische Wärme hatten.

1964 betrachtete Kondo das s-d-Modell, welches bereits 1951 von Zener vorgeschlagen worden war, für verdünnte magnetische Legierungen [Kon]. In diesem Modell wird angenommen, daß die Leitungselektronen eines Metalls, die untereinander nicht wechselwirken, mit ihrem Spin an denjenigen einer in das Metall eingebauten Störstelle gekoppelt sind. Mittels Störungsrechnung in 2. Ordnung konnte er nachweisen, daß im Falle einer antiferromagnetischen Kopplung eine logarithmische Abhängigkeit des elektrischen Widerstandes eines solchen Systemes von der Temperatur besteht, welche zusammen mit dem Gitterbeitrag das Widerstandsminimum liefert.

Es erwachsen allerdings auch Schwierigkeiten aus der logarithmischen Temperaturabhängigkeit, denn unterhalb des Minimums führte dieser Term zu einer Divergenz für $T \rightarrow 0$. Man weitete die Störungsrechnung auf die Summation der logarithmisch divergenten Terme führender Ordnung aus, mußte aber feststellen, daß diese Technik nunmehr zu Divergenzen bei einer endlichen Temperatur T_K , der Kondo-Temperatur, führt. Während also der Temperaturbereich oberhalb der Kondo-Temperatur mittels Störungstheorie beschrieben werden kann, konnte auf den Bereich unterhalb T_K diese Technik nicht angewandt werden. Die Suche nach einer Lösung währte angesichts der Einfachheit der beiden hierfür vornehmlich untersuchten Modelle, nämlich des s-d-Modells und des Anderson-Modells, unerwartet lange. Der mittlerweile Kondo-Problem getaufte Untersuchungsgegenstand wurde 1974 von Wilson vermitteltst numerischer Renormierung gelöst [Wil]. Daraufhin interpretierte

Nozières Wilsons Ergebnisse in Form einer Landau-Theorie für Fermi-Flüssigkeiten [Noz74, Noz78], deren mikroskopische Ableitung aufbauend auf dem Anderson-Modell Yamada 1975 gelang. Als vorläufiger Abschluß der Geschichte des Kondo-Problems ist seine analytische Lösung anzusehen, welche 1980 Andrei und Wiegmann mit Hilfe des Bethe-Ansatzes herleiteten. Damit ließ sich das thermodynamische Verhalten über den gesamten Temperaturbereich berechnen.

Die Lösung vor Augen kann verstanden werden, warum die Störungstheorie versagte: Die Kondo-Temperatur ist ein Maß für denjenigen Energiegewinn, der sich bei der Bildung eines Singulettzustandes aus Störstellen- und Leitungselektronenspin ergibt, und hängt von der Größe der Kopplungsstärke, nach welcher in Störungsrechnung entwickelt wird, ab. Bei Annäherung an diese Temperatur gerät man in einen Bereich, in welchem die Energieabsenkung durch die Wechselwirkung vergleichbar mit der thermischen Energie der Leitungselektronen, mithin einer typischen Energieskala ist. Somit verliert die Entwicklung nach dem Parameter der Kopplungsstärke ihre Gültigkeit.

1996 hat Thimm den Hochtemperaturfall mit der Methode der Flußgleichungen, das heißt der kontinuierlichen Diagonalisierung des Hamiltonoperators, bearbeitet [Thim]. Dabei ging er störungstheoretisch vor und konnte ungefähr die Kondo-Temperatur sowie die Suszeptibilität ermitteln. Bei der Untersuchung des Temperaturbereiches unterhalb der Kondo-Temperatur trat indessen ein unerwartetes und unerklärliches Verhalten gewisser Terme in den Flußgleichungen auf, das Aussagen über thermodynamische Größen bei tiefen Temperaturen nicht ermöglichte.

1998 hat der Verfasser in seiner Diplomarbeit mit einem geänderten Ansatz den Tieftemperaturfall des Kondo-Modelles mittels der Anwendung des Flußgleichungsformalismus bearbeitet. Wir konnten die Kondo-Temperatur sowie die magnetische Suszeptibilität des Störstellenspins bestimmen. Dennoch blieben weitergehende Fragen ungeklärt.

In der vorliegenden Arbeit untersuchen wir zum einen, welchen Einfluß Zwei-Teilchen-Wechselwirkungen auf die Grundzustandsenergie und damit auf die Kondo-Temperatur haben. Hierzu erweitern wir das s-d-Modell um den wesentlichen Zwei-Teilchen-Term.

Außerdem wenden wir uns dem Zwei-Kanal-Kondo-Modell zu, einer Erweiterung des Kondo-Modells um ein entartetes Leitungsband. Mit derselben Methode der Flußgleichungen gewinnen wir Gleichungen, die sich jedoch nicht mehr analytisch lösen lassen. Wir benutzen numerische Methoden, um auch hier die Grundzustandsenergie und damit die Kondo-Temperatur zu bestimmen.

Unsere Arbeit gliedert sich deshalb folgendermaßen:

Nachdem wir die verwendeten Modelle sowie unsere Methode vorgestellt haben werden, werden wir die Flußgleichungen für das Ein-Kanal-Kondo-Modell bei tiefen Temperaturen ermitteln. Danach werden wir den Grundzustand des Systemes bestimmen sowie die Kondo-Temperatur berechnen. In einem anschließenden Kapitel werden wir das Zwei-Kanal-Kondo-Modell betrachten und das dabei resultierende Gleichungssystem numerisch lösen und die Lösung diskutieren. Die Arbeit wird mit einer Zusammenfassung und einem Ausblick beendet werden.

2. Das Modell

Die Berechnungen der vorliegenden Dissertation gehen von dem relativ einfach erscheinenden s-d-Modell aus. Mit diesem Modell, welches 1951 von Zener eingeführt worden ist, wird ein System, bestehend aus wechselwirkungsfreien Elektronen und einer spinbehafteten Störstelle, beschrieben. Zwischen den Leitungselektronen und der Störstelle existiert eine Spin-Spin-Wechselwirkung. Der Hamiltonoperator eines solchen Systemes kann geschrieben werden als

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{k,\alpha} \epsilon_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} + \sum_{k,p,\alpha,\beta} J_{kp} c_{k\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{p\beta} \vec{\tau} \\
 &= \sum_{k,\alpha} \epsilon_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} + \sum_{k,p,\alpha,\beta} J_{kp} \left(c_{k\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^z c_{p\beta} \tau^z + \frac{1}{2} c_{k\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^+ c_{p\beta} \tau^- + \frac{1}{2} c_{k\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^- c_{p\beta} \tau^+ \right) .
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

Hierbei bedeuten $c_{k\alpha}^\dagger$ und $c_{p\beta}$ Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren von Elektronen mit Impuls k bzw. p und Spinindex α bzw. β , $\vec{\sigma}$ bzw. $\vec{\tau}$ sind Spinmatrizen der Elektronen bzw. der Störstelle, ϵ_k steht für die Einteilchenenergie der Leitungselektronen mit Impuls k und J_{kp} für die Spin-Spin-Wechselwirkung.

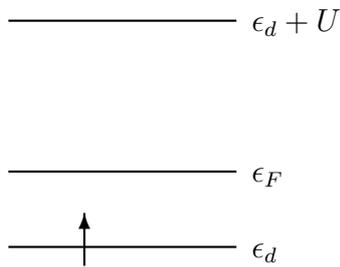
Im Falle $J_{kp} < 0$ ist die Kopplung ferromagnetisch, im Falle $J_{kp} > 0$ antiferromagnetisch. Ist $J_{kp} = 0$, dann hat das System einen freien lokalisierten Spin. In dieser Arbeit beschränken wir uns auf den Fall einer antiferromagnetischen Kopplung.

Warum das Modell auf den zweiten Blick doch etwas komplizierter ist, beruht auf der Tatsache, daß ein Vielteilchensystem vorliegt, wofür die Spinumklapp- (oder auch Spinflip-) Prozesse verantwortlich sind. Wechselwirkt nämlich ein Elektron, welches einen Spin nach oben trage, über einen Spinumklappprozeß mit der Störstelle, die einen nach unten gerichteten Spin aufweise, so zeigt nach diesem Vorgang der Störstellenspin nach oben, so daß ein zweites Elektron mit aufwärts zeigendem Spin nicht mehr denselben Prozeß mit der Störstelle ausführen kann. Das bedeutet aber, daß die beiden Elektronen nicht mehr unabhängig voneinander sind.

Wir möchten auf das Anderson-Modell eingehen, welches 1961 von Anderson [And] eingeführt wurde, um das Verhalten von Metallen, in denen Ionen mit unvollständig besetzten inneren Schalen eingebaut sind, zu beschreiben. Man geht wieder von einem wechselwirkungsfreien Elektronengas aus und nimmt an, daß eine Störstelle mit keinem, einem oder maximal zwei Elektronen entgegengesetzten Spins besetzt ist. Tritt letzterer Fall ein, so besteht jedoch wegen der in inneren Schalen vorhandenen Lokalisierung eine starke Coulomb-Abstoßung zwischen den beiden Elektronen, so daß dieser Zustand energetisch wesentlich höher als einfach besetzte Störstellenniveaus liegt. Bezeichnet ϵ_d nun die Energie des Störstellenniveaus, U die Größe der Coulomb-Abstoßung und d_α^\dagger bzw. d_α den Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperator eines Elektrons im Störstellenniveau, so nimmt der Hamiltonoperator folgende Form an:

$$H = \sum_{k,\alpha} \epsilon_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} + \sum_{\alpha} \epsilon_d d_\alpha^\dagger d_\alpha + U d_\uparrow^\dagger d_\downarrow^\dagger d_\downarrow d_\uparrow + \sum_{k,\alpha} V_k (c_{k\alpha}^\dagger d_\alpha + d_\alpha^\dagger c_{k\alpha}) \quad . \quad (2.2)$$

Das s-d-Modell stellt sich als Spezialfall des Anderson-Modelles dar, wenn die Energien derart gewählt werden, daß gilt $\epsilon_d \ll \epsilon_F \ll \epsilon_d + U$ (siehe Bild)



Mit dieser Parameterkonstellation ist bei hinreichend tiefen Temperaturen die Störstelle einfach besetzt, d.h. man erhält einen lokalisierten Spin. Eine Spin-Spin-Wechselwirkung entsteht durch virtuell gebundene Zustände, wenn nämlich die Störstelle kurzzeitig doppelt besetzt ist.

Angenommen, ein Elektron mit nach oben gerichtetem Spin besetzt das Störstellenniveau. Dann muß ein zweites Elektron im Fremdatomzustand entgegengesetzten Spin haben, um nicht das Pauli-Verbot zu verletzen. Verläßt nun das erste Elektron die Störstelle, dann besitzt diese einen nach unten gerichteten Spin, während das freigewordene Leitungselektron einen aufwärtigen Spin hat. Dieser Vorgang entspricht einem Spinumklapprozeß im s-d-Modell.

Die Abbildung, mit der das Andersonmodell in das Kondo-Modell übergeht, ist die Schrieffer-Wolff-Transformation. Kehrein und Mielke führten mit dem Flußgleichungsformalismus eine kontinuierliche Schrieffer-Wolff-Transformation durch [KehM].

Zweck dieser Modelle ist das Verständnis der physikalischen Vorgänge in dem betrachteten System. Ihre Güte bzw. Abbildungsgenauigkeit wird durch den Vergleich

zwischen errechneten und gemessenen physikalischen Größen bestimmt. In unserem Falle werden wir die Kondo-Temperatur berechnen, die als charakteristische Energie des Systems anzusehen ist. Sie resultiert direkt aus der Energieabsenkung des Grundzustandes aufgrund der antiferromagnetischen Wechselwirkung zwischen der Störstelle und den Leitungselektronen.

1980 führten Nozières und Blandin [Noz80] bei der Untersuchung des Kondo-Effektes in realen Metallen (wie z.B. Verunreinigungen durch Übergangsmetalle oder Seltene Erden) eine Verallgemeinerung des Kondo-Modelles ein, indem sie u.a. die Orbitalstruktur der Störstelle mit einer freien Anzahl n an orbitalen Kanälen berücksichtigten.

Wir betrachten auch hier den einfachen Fall einer Störstelle mit halbzahligem Spin und zwei Kanälen. Der Hamilton-Operator nimmt dann die modifizierte Form

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{k,\alpha,e} \epsilon_k c_{k\alpha e}^\dagger c_{k\alpha e} + \sum_{k,p,\alpha,\beta,e} J_{kp} c_{k\alpha e}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{p\beta e} \vec{\tau} \\
 &= \sum_{k,\alpha,e} \epsilon_k c_{k\alpha e}^\dagger c_{k\alpha e} + \sum_{k,p,\alpha,\beta,e} J_{kp} \left(c_{k\alpha e}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^z c_{p\beta e} \tau^z + \frac{1}{2} c_{k\alpha e}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^+ c_{p\beta e} \tau^- + \frac{1}{2} c_{k\alpha e}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^- c_{p\beta e} \tau^+ \right)
 \end{aligned} \tag{2.3}$$

an. Hierbei ist e der Bandindex (der Kanal) und durchläuft die Werte 1 und 2. Es wurde also ein zweites entartetes Leitungsband hinzugefügt. Hierbei entsteht bei der Temperatur $T = 0$ K ein zum Ein-Kanal-Kondo-Modell unterschiedliches Verhalten: Bei letzterem Modell herrscht das Bild vor, daß ein Elektron mit der Störstelle einen Singulett-Zustand einnimmt, so daß sich die beiden, entgegengesetzt gerichteten Spins gerade kompensieren und somit in größerer Entfernung (typische Längeneinheit ist hier die Kondo-Kohärenzlänge $\xi_K = \frac{\hbar v_F}{k_B T_K}$) keine Wechselwirkung mit anderen Leitungselektronen stattfindet. Tatsächlich handelt es sich aber um einen Viel-Teilchen-Prozeß, die Abschirmung der Störstelle geschieht durch eine Elektronenwolke.

Anders beim Zwei-Kanal-Kondo-Modell. Um in dem Bild zu bleiben, geht aus beiden Bändern je ein Elektron einen Singulett-Zustand ein, so daß der Störstellenspin überkompensiert wird. Es entsteht somit ein neuer halbzahliger lokalisierter Spin, jedoch dem ursprünglichen entgegengerichtet. Dieser wirkt als neue Störstelle, wieder kommt es zu einer Wechselwirkung mit Leitungselektronen. Dieses Verhalten macht sich beim Temperaturverhalten physikalischer Größen wie elektrische Leitfähigkeit oder spezifische Wärme bemerkbar.

3. Die Methode: Das Flußgleichungsverfahren

Bei der Behandlung quantenmechanischer Probleme nimmt der Hamiltonoperator eine zentrale Stellung ein. Von großem Interesse sind die Eigenwerte des Hamiltonoperators, die denjenigen Energiezuständen entsprechen, die das System einnehmen kann. Da der Hamiltonoperator einer Observablen zugeordnet ist, ist er hermitesch, was bedeutet, daß seine Eigenwerte reell sind und sich seine Eigenfunktionen als ein vollständiges orthonormiertes Funktionensystem darstellen lassen, nach welchen alle Zustände des Systemes entwickelt werden können. Gerade aber auch für thermodynamische Berechnungen sind die Energieeigenwerte und -funktionen von Bedeutung.

In ganz einfachen Fällen läßt sich der Hamiltonoperator algebraisch diagonalisieren. Betrachten wir hierzu in Anlehnung an unser Problem den Fall eines Elektrons in einem bestimmten Energieniveau und eine Störstelle, die über ihren Spin miteinander antiferromagnetisch wechselwirken. Der Ausgangshamiltonoperator hat dann die folgende Form:

$$H = c^\dagger \vec{\sigma} c \vec{\tau} = \frac{1}{2} c^\dagger \sigma^+ c \tau^- + \frac{1}{2} c^\dagger \sigma^- c \tau^+ + c^\dagger \sigma_z c \tau_z \quad . \quad (3.1)$$

Hierbei wurde die Energie ϵ des Elektrons gleich Null und die Kopplungskonstante J gleich Eins gesetzt.

Die Zustände klassifizieren wir durch die Spinkomponenten in z -Richtung, d.h. zum Beispiel, $|\uparrow, \uparrow\rangle$ ist Eigenzustand zu σ_z und τ_z mit den entsprechenden Eigenwerten $+s$ bzw. $+t$, wobei im folgenden $s = t = 1$ gesetzt und angenommen wird, daß nur die Eigenwerte $\pm s$ und $\pm t$ existieren. Der Hilbertraum \mathcal{H} wird also durch vier Zustände aufgespannt:

$$\mathcal{H} = \{|\uparrow, \uparrow\rangle, |\uparrow, \downarrow\rangle, |\downarrow, \uparrow\rangle, |\downarrow, \downarrow\rangle\} \quad (3.2)$$

In dieser Basis hat H die Matrixdarstellung

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} . \quad (3.3)$$

Für das charakteristische Polynom χ_H folgt

$$\chi_H = (\lambda - 1)^2 \cdot (\lambda^2 + 2\lambda - 3) \quad (3.4)$$

mit den Lösungen

$$\begin{array}{ll} +1 & \text{mit der Vielfachheit } 3 \\ -3 & \text{mit der Vielfachheit } 1 \end{array}$$

Die zu $+1$ gehörenden drei Eigenvektoren lauten

$$|\uparrow, \uparrow\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle), |\downarrow, \downarrow\rangle, \quad (3.5)$$

und der zu -3 gehörende Eigenvektor ist

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle). \quad (3.6)$$

Indem der Gesamtspinoperator $\vec{\Sigma} = \vec{\sigma} + \vec{\tau}$ angewandt wird, läßt sich leicht zeigen, daß die drei zum Eigenwert $+1$ gehörenden Zustände Triplets sind, während der eine Zustand mit Eigenwert -3 einem Singulett entspricht.

In der mittels der unitären Transformation U

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

erreichten Basis

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle), |\uparrow, \uparrow\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle), |\downarrow, \downarrow\rangle \quad (3.8)$$

ist H diagonal und hat die Matrixdarstellung

$$H = \begin{pmatrix} -3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

Mit anderen Worten, der Singulett-Zustand liegt energetisch tiefer als die Triplett-Zustände.

In der Regel sind Hamiltonoperatoren indessen weitaus komplizierter. Vor allem läßt sich kaum eine einzelne Transformation finden, mit der der Ausgangshamiltonoperator in einem Schritt auf Diagonal- oder zumindest auf Blockdiagonalgestalt gebracht werden kann. Zu den wenigen Beispielen gehört die bereits erwähnte Schrieffer-Wolff-Transformation.

Wegner [Weg] schlug deshalb 1993 eine die Bezeichnung Flußgleichungsverfahren tragende Methode vor, den ursprünglichen Hamiltonoperator durch eine kontinuierliche unitäre Transformation derart umzuformen, daß er entweder bereits (block-)diagonal oder in für eine weitere Bearbeitung geeignetere Form gebracht worden ist. Dafür wird eine von einem Parameter l stetig differenzierbar abhängende kontinuierliche unitäre Transformation $U(l)$ eingeführt, wodurch der Hamiltonoperator $H(l)$ von seinem Startwert $H(0)$ in seine Endform $H(\infty)$ überführt wird. Es gilt somit $U(0) = 1$ und

$$H(l) = U^+(l)H(0)U(l), \quad (3.10)$$

bzw. in differentieller Form, da $U(l)$ nicht bekannt ist,

$$\frac{dH}{dl} = [\eta(l), H(l)], \quad (3.11)$$

wobei $\eta(l)$ die antihermitesche infinitesimale Erzeugende der Transformation U ist.

Die Wahl von η ist derart, daß der Hamiltonoperator mit wachsendem l immer diagonal wird, das heißt die Außerdiagonalelemente immer kleiner werden. Spaltet man H in einen Diagonaleil H^d und einen Restteil H^r auf, das heißt

$$H = H^d + H^r, \quad (3.12)$$

mit dem Ziel $H(\infty) = H^d(\infty)$ und $H^r(\infty) = 0$, so kann das erreicht werden, wenn man

$$\eta = [H^d, H^r] \quad (3.13)$$

setzt, das heißt es gilt dann

$$\frac{d(\text{Spur}H^{r^2})}{dl} \leq 0. \quad (3.14)$$

Ein charakteristisches Merkmal ist die Freiheit bei der Wahl von H^d und H^r . Für welche Unterteilung sich entschieden wird, hängt von der Aufgabenstellung ab und muß in jedem einzelnen Fall individuell erfolgen. So hat Thimmel beim Hochtemperaturfall des Kondo-Systems die Spinumklappprozesse als Restteil angesehen, während wir für den Tieftemperaturfall quasi-teilchenzahlverletzende Übergänge, also die Verknüpfung von zwei Zuständen, die auf verschiedenen Seiten der Fermikante liegen, als den zu eliminierenden Außerdiagonalteil des Hamiltonoperators gewählt haben.

Eine im Flußgleichungsverfahren auftretende Schwierigkeit besteht im Erzeugen immer neuer Terme immer höherer Ordnung. Diese Terme haben ihren mathematischen Ursprung in der Kommutatorbildung Gl. (3.11) und entsprechen Vielteilchenwechselwirkungen. Um die auftretenden Terme nach der Teilchenzahl klassifizieren zu können, führt man deshalb die Normalordnung ein. Trotzdem können nicht alle Terme berücksichtigt werden. Um die Gleichungen schließen zu können, d.h. für jede Klasse von Beiträgen zum Hamiltonoperator eine Differentialgleichung angeben zu können, werden bestimmte, meist höhere Terme vernachlässigt.

4. Die Flußgleichungen des Ein-Kanal-Kondo-Modells

4.1 Das Aufstellen der Gleichungen

Wie bereits im Kapitel 2 eingeführt, legen wir unseren Berechnungen das eindimensionale s-d-Modell zugrunde. Hierbei soll die Spin-Spin-Wechselwirkung isotrop sein. Außerdem verwenden wir die Normalordnung, die definiert ist durch

$$:c_k^\dagger c_p: := c_k^\dagger c_p - \langle c_k^\dagger c_p \rangle = c_k^\dagger c_p - \delta_{kp} n_k, \quad (4.1)$$

wo $n_k = 1/(e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1)$ die mittlere Besetzungszahl des Elektronenzustandes mit Wellenvektor k ist.

Ferner nehmen wir einen Potentialstreuungsterm hinzu, der unter dem Fluß erzeugt wird, wie im vorherigen Kapitel erwähnt wurde. Schließlich ergänzen wir einen Term, der eine Zwei-Teilchen-Wechselwirkung beschreibt und ebenfalls erst unter dem Fluß erzeugt wird.

Der Hamiltonoperator lautet somit

$$\begin{aligned} H &= E_0 + \sum_{k,\alpha} \epsilon_k :c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha}: + \sum_{k,p,\alpha,\beta} J_{kp} :c_{k\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{p\beta}: \vec{\tau} + \sum_{k,p,\alpha} V_{kp} :c_{k\alpha}^\dagger c_{p\alpha}: \\ &+ \sum_{\substack{k,p,\alpha,\beta \\ k',p',\alpha',\beta'}} \sum_{l,m,n} Z_{kpk'p'} \epsilon_{lmn} :c_{k\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^l c_{p\beta} c_{k'\alpha'}^\dagger \sigma_{\alpha'\beta'}^m c_{p'\beta'}: \tau^n \\ &= E_0 + \sum_{k,\alpha} \epsilon_k :c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha}: + \sum_{k,p,\alpha,\beta} J_{kp} :c_{k\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^z c_{p\beta}: \tau^z \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{k,p,\alpha,\beta} J_{kp} (:c_{k\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^+ c_{p\beta}: \tau^- + :c_{k\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^- c_{p\beta}: \tau^+) + \sum_{k,p,\alpha} V_{kp} :c_{k\alpha}^\dagger c_{p\alpha}: \\ &+ \sum_{\substack{k,p,\alpha,\beta \\ k',p',\alpha',\beta'}} \sum_{l,m,n} Z_{kpk'p'} \epsilon_{lmn} :c_{k\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^l c_{p\beta} c_{k'\alpha'}^\dagger \sigma_{\alpha'\beta'}^m c_{p'\beta'}: \tau^n \end{aligned} \quad (4.2)$$

Hierbei bezeichnet E_0 die Grundzustandsenergie, die wegen Einführung der Normalordnung gegenüber Gl.(2.1) neu hinzugekommen ist, J_{kp} ist die Stärke der Spin-Spin-Wechselwirkung, wobei $J_{kp} > 0$, da wir den antiferromagnetischen Fall betrachten, V_{kp} ist die Stärke der Potentialstreuung und $Z_{kpk'p'}$ beschreibt die Stärke der Zwei-Teilchen-Wechselwirkung. Die anderen Symbole sind bereits aus Gl.(2.1) bekannt.

Wir möchten den Tieftemperaturfall des Kondo-Modells mittels des Flußgleichungsverfahrens behandeln. Hierfür müssen wir zuvörderst erwägen, wie wir den Hamiltonoperator in einen Diagonal- und einen Restteil aufspalten, mit anderen Worten, welchen Anteil wir eliminieren möchten. Beim absoluten Nullpunkt sind alle Elektronenzustände unterhalb der scharfen Fermikante besetzt, die Zustände darüber unbesetzt. Ein Spinumklappprozeß kann also nur stattfinden, indem ein Elektron unterhalb der Fermikante einen Zustand oberhalb derselben einnimmt. Gerade diese Spinumklappprozesse machen jedoch das System zu einem Vielteilchenproblem. Deswegen versuchen wir, jene Übergänge, die, etwas anders ausgedrückt, quasiteilchenzahlverletzenden Prozessen entsprechen, zu eliminieren, d.h. wir setzen

$$\begin{aligned}
 H^d &= E_0 + \sum_{k,\alpha} \epsilon_k : c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} : + \sum_{\substack{k,p,\alpha,\beta \\ k \cdot p > 0}} J_{kp} : c_{k\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{p\beta} : \vec{\tau} + \sum_{\substack{k,p,\alpha \\ k \cdot p > 0}} V_{kp} : c_{k\alpha}^\dagger c_{p\alpha} : \\
 &+ \sum_{\substack{k,p,\alpha,\beta \\ k',p',\alpha',\beta' \\ k \cdot p > 0 \text{ und } k' \cdot p' > 0 \\ \text{oder } k \cdot p < 0 \text{ und } k' \cdot p' < 0 \text{ und } k \cdot k' < 0}} \sum_{l,m,n} Z_{kpk'p'} \epsilon_{lmn} : c_{k\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^l c_{p\beta} c_{k'\alpha'}^\dagger \sigma_{\alpha'\beta'}^m c_{p'\beta'} : \tau^n \\
 H^r &= \sum_{\substack{k,p,\alpha,\beta \\ k \cdot p < 0}} J_{kp} : c_{k\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{p\beta} : \vec{\tau} + \sum_{\substack{k,p,\alpha \\ k \cdot p < 0}} V_{kp} : c_{k\alpha}^\dagger c_{p\alpha} : \\
 &+ \sum_{\substack{k,p,\alpha,\beta \\ k',p',\alpha',\beta' \\ k \cdot p < 0 \text{ und } k' \cdot p' > 0 \text{ oder } k \cdot p > 0 \text{ und } k' \cdot p' < 0 \\ \text{oder } k \cdot p < 0 \text{ und } k' \cdot p' < 0 \text{ und } k \cdot k' > 0}} \sum_{l,m,n} Z_{kpk'p'} \epsilon_{lmn} : c_{k\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^l c_{p\beta} c_{k'\alpha'}^\dagger \sigma_{\alpha'\beta'}^m c_{p'\beta'} : \tau^n \quad , \quad (4.3)
 \end{aligned}$$

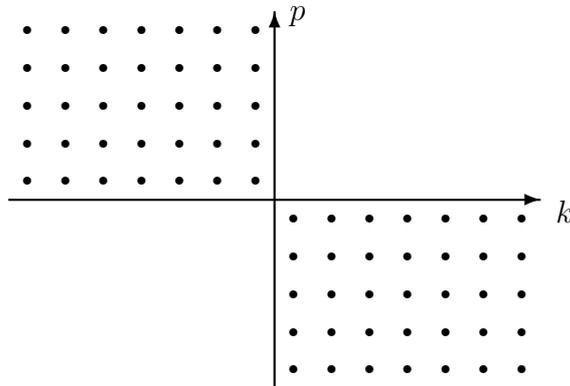
wobei wir den Fermi-Impuls $k_F = 0$ gesetzt haben.

Damit ergibt sich für die Erzeugende $\eta = [H^d, H^r]$

$$\eta = \sum_{\substack{k,p,\alpha,\beta \\ k \cdot p < 0}} \left\{ (\epsilon_k - \epsilon_p) J_{kp} : c_{k\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{p\beta} : \vec{\tau} + (\epsilon_k - \epsilon_p) V_{kp} : c_{k\alpha}^\dagger c_{p\alpha} : \right.$$

$$\begin{aligned}
 & + \sum_q (2J_{kp}J_{qk}(2f_k - 1) + V_{kp}J_{qk} + J_{kp}V_{qk}) : c_{q\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{p\beta} : \vec{\tau} \\
 & - \sum_q (2J_{kp}J_{pq}(2f_p - 1) + V_{kp}J_{pq} + J_{kp}V_{pq}) : c_{k\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{q\beta} : \vec{\tau} \\
 & + \sum_q (3J_{kp}J_{qk} + V_{kp}V_{qk}) : c_{q\alpha}^\dagger c_{p\alpha} : \\
 & - \sum_q (3J_{kp}J_{pq} + V_{kp}V_{pq}) : c_{k\alpha}^\dagger c_{q\alpha} : \\
 & + \left. \sum_{k',p',\alpha',\beta'} J_{kp}J_{k'p'} \sum_{l,m,n} \epsilon_{lmn} : c_{k\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^{i(l)} c_{p\beta} c_{k'\alpha'}^\dagger \sigma_{\alpha'\beta'}^{i(m)} c_{p'\beta'} : \tau^{i(n)} \right\} \\
 & \quad \sum_{\substack{k,p,\alpha,\beta \\ k',p',\alpha',\beta'}} \sum_{l,m,n} (\epsilon_k - \epsilon_p + \epsilon_{k'} - \epsilon_{p'}) Z_{kp k' p'} \epsilon_{lmn} : c_{k\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^{i(l)} c_{p\beta} c_{k'\alpha'}^\dagger \sigma_{\alpha'\beta'}^{i(m)} c_{p'\beta'} : \tau^{i(n)} \\
 & \quad \text{\small } k \cdot p < 0 \text{ und } k' \cdot p' > 0 \text{ oder } k \cdot p > 0 \text{ und } k' \cdot p' < 0 \\
 & \quad \text{\small } \text{oder } k \cdot p < 0 \text{ und } k' \cdot p' < 0 \text{ und } k \cdot k' > 0 \\
 & + \sum_{\substack{k,p \\ k \cdot p < 0}} (J_{kp}J_{pk} + V_{kp}V_{pk})(f_p - f_k) . \tag{4.4}
 \end{aligned}$$

Hierbei laufen die Summationsindizes l, m, n von 1 bis 3, ϵ_{lmn} ist der total antisymmetrische Tensor 3. Stufe und $i(x)$ ist eine Abbildung aus der Menge $\{1, 2, 3\}$ in die Indexmenge $\{+, -, z\}$. f_k bezeichnet die Verteilungsfunktion für Fermionen. Da wir den Tieftemperaturfall betrachten, nähern wir zum Zwecke der mathematischen Beherrschbarkeit diejenigen Summationen, welche nur über einen Teilraum ausgeführt werden, durch geeignete Summationen über den ganzen Impulsraum an. Wenn wir die Ebene der Summationsindizes k und p in einer Summe der Art $\sum_{k,p,k \cdot p < 0}$ betrachten, dann tragen nur die gekennzeichneten Quadranten bei, die wir in folgendem Bild veranschaulichen möchten:



Ausgehend von der Tatsache, daß bei $T = 0$ die Verteilungsfunktion für Fermionen mit Impuls k , $f_k = 1/(e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1)$, für $k < \mu$ exakt 1 sowie für $k > \mu$ exakt 0 ist, ferner, daß sie bei kleinen Temperaturen nicht stark davon abweicht, und schließlich, daß wir $\mu = 0$ gesetzt haben, können wir folgende Näherungen vornehmen:

$$\sum_{\substack{k,p \\ k \cdot p < 0}} \varphi(k, p) \approx \sum_{k,p} \left\{ (1 - f_p) f_k + f_p (1 - f_k) \right\} \varphi(k, p) =: \sum_{k,p} f_{kp} \varphi(k, p) . \quad (4.5)$$

sowie

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{k,p,k',p' \\ k \cdot p < 0 \text{ und } k' \cdot p' > 0 \\ \text{oder } k \cdot p > 0 \text{ und } k' \cdot p' < 0}} \varphi(k, p) &\approx \sum_{k,p,k',p'} \left\{ (f_{kp} - f_{k'p'})^2 + f_k (1 - f_p) f_{k'} (1 - f_{p'}) \right. \\ &\quad \left. + f_p (1 - f_k) f_{p'} (1 - f_{k'}) \right\} \varphi(k, p) \\ &=: \sum_{k,p,k',p'} f_{kp k' p'} \varphi(k, p) . \end{aligned} \quad (4.6)$$

Damit nimmt die Erzeugende η folgende einfache Form an, wobei nur Terme bis zur Ordnung J^2 vollzählig berücksichtigt sind:

$$\begin{aligned} \eta &= \sum_{k,p,\alpha,\beta} \eta_{kp}^1 : c_{k\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{p\beta} : \vec{\tau} \\ &\quad + \sum_{k,p,\alpha} \eta_{kp}^2 : c_{k\alpha}^\dagger c_{p\alpha} : \\ &\quad + \sum_{\substack{k,p,\alpha,\beta \\ k',p',\alpha',\beta'}} \sum_{l,m,n} \epsilon_{lmn} \eta_{kp k' p'}^3 : c_{k\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^{i(l)} c_{p\beta} c_{k'\alpha'}^\dagger \sigma_{\alpha'\beta'}^{i(m)} c_{p'\beta'} : \tau^{i(n)} \\ &\quad + \sum_{k,p} \eta_{kp}^4 \end{aligned} \quad (4.7)$$

mit

$$\begin{aligned} \eta_{kp}^1 &= f_{kp} (\epsilon_k - \epsilon_p) J_{kp} \\ &\quad + (f_k - f_p) \sum_q (2f_q - 1) (2J_{kq} J_{qp} (2f_q - 1) + V_{kq} J_{qp} + J_{kq} V_{qp}) \\ \eta_{kp}^2 &= f_{kp} (\epsilon_k - \epsilon_p) V_{kp} \\ &\quad + (f_k - f_p) \sum_q (2f_q - 1) (3J_{kq} J_{qp} + V_{kq} V_{qp}) \\ \eta_{kp k' p'}^3 &= f_{kp k' p'} (\epsilon_k - \epsilon_p + \epsilon_{k'} - \epsilon_{p'}) Z_{kp k' p'} + \frac{1}{2} (f_{kp} - f_{k'p'}) J_{kp} J_{k'p'} \\ \eta_{kp}^4 &= (f_k + f_p - 2f_k f_p) (f_p - f_k) (J_{kp} J_{pk} + V_{kp} V_{pk}) \end{aligned} \quad (4.8)$$

In Kapitel 3 wurde bereits erwähnt, daß zur Vermeidung von Termen immer höherer Wechselwirkungen Näherungen vorzunehmen sind. Wir werden deshalb im weiteren nur die Ein-Teilchen-Terme und die Zwei-Teilchen-Terme der vorhandenen Form mitführen, während wir alle weiteren Viel-Teilchen-Terme als irrelevant ansehen und vernachlässigen wollen. Darüberhinaus lassen wir den letzten Term weg, weil er als Konstante keinen Beitrag zu den Flußgleichungen liefert.

Für die Flußgleichungen ergibt sich somit aus $\frac{dH}{dt} = [\eta, H]$

$$\begin{aligned}
 \frac{dE_0}{dl} &= \sum_{k,p} (f_k - f_p) (2\eta_{kp}^1 J_{pk} + \eta_{kp}^2 V_{pk}) \\
 \frac{d\epsilon_k}{dl} &= 0 \\
 \frac{dJ_{kp}}{dl} &= -(\epsilon_k - \epsilon_p) \eta_{kp}^1 + 2 \sum_q (2f_q - 1) (\eta_{kq}^1 J_{qp} - J_{kq} \eta_{qp}^1) \\
 &\quad + \sum_q (\eta_{kq}^2 J_{qp} - J_{kq} \eta_{qp}^2) + \sum_q (\eta_{kq}^1 V_{qp} - V_{kq} \eta_{qp}^1) \\
 \frac{dV_{kp}}{dl} &= -(\epsilon_k - \epsilon_p) \eta_{kp}^2 + 3 \sum_q (\eta_{kq}^1 J_{qp} - J_{kq} \eta_{qp}^1) + \sum_q (\eta_{kq}^2 V_{qp} - V_{kq} \eta_{qp}^2) \\
 \frac{dZ_{kp k' p'}}{dl} &= -(\epsilon_k - \epsilon_p + \epsilon_{k'} - \epsilon_{p'}) \eta_{kp k' p'}^3 + \frac{1}{2} (\eta_{k' p'}^1 J_{kp} - J_{k' p'} \eta_{kp}^1) \quad (4.9)
 \end{aligned}$$

Die Änderung der Ein-Teilchen-Energien haben wir den Diagonaltermen der mit $1/N$ skalierenden Potentialstreuung zugeordnet, da die Ein-Teilchen-Energien ϵ von der Ordnung N^0 sind, die Änderung auf der rechten Seite der Differentialgleichung indessen von der Ordnung $1/N$ ist. Im thermodynamischen Limes verschwindet die Änderung der Ein-Teilchen-Energien.

4.2 Entwicklung und Integration der Flußgleichungen

Wir möchten die Flußgleichungen für J_{kp} , V_{kp} und $Z_{kpk'p'}$ nach der Kopplungskonstanten entwickeln. Dafür empfiehlt es sich, folgende Setzungen zu treffen:

$$J_{kp} = \frac{D}{N} J_0 \tilde{J}_{kp}, \quad V_{kp} = \frac{D}{N} J_0 \tilde{V}_{kp}, \quad Z_{kpk'p'} = \frac{D}{N} J_0 \tilde{Z}_{kpk'p'}, \quad \epsilon_k = D\tilde{\epsilon}_k, \quad l = \frac{1}{D^2} \tilde{l},$$

$$r(\tilde{\epsilon}) = \frac{1}{N} \sum_k \delta(\tilde{\epsilon} - \tilde{\epsilon}_k) = Dr(\epsilon),$$

hierbei bedeutet

D	die halbe Bandbreite
N	die Anzahl der Gitterplätze
J_0	eine dimensionslose Kopplungsstärke, nach welcher wir entwickeln,
$r(\epsilon)$	die Zustandsdichte im betrachteten Band und
$\tilde{J}_{kp}, \tilde{V}_{kp}, \tilde{Z}_{kpk'p'}$	dimensionslose Zahlen der Ordnung 1.

Außerdem bezeichnen wir mit $\tilde{\eta}_{kp}^i$ die dimensionslosen Anteile an der Erzeugenden η analog zur Gl.(4.7).

An dieser Stelle möchten wir gleich folgende Symmetrien unterstellen:
Es gelte

$$J_{kp} = J_{pk}, \quad V_{kp} = V_{pk} \quad \text{und} \quad Z_{kpk'p'} = Z_{p'k'pk}, \quad (4.10)$$

was aus der Hermitizität des Hamiltonoperators folgt, sowie

$$Z_{kpk'p'} = -Z_{k'p'kp}, \quad (4.11)$$

eine Beziehung, die sich aus der Vertauschung der ungestrichenen und der gestrichenen Indizes ergibt. Dabei werden alle Kopplungen als reell angesehen.

Schließlich gilt

$$\eta_{kp} = -\eta_{pk} \quad (4.12)$$

wegen der Antihermitizität der Erzeugenden.

Da $\frac{dJ_{kp}}{dt} = \frac{dJ_{pk}}{dt}$ bzw. $\frac{dV_{kp}}{dt} = \frac{dV_{pk}}{dt}$ bzw. $\frac{dZ_{kpk'p'}}{dt} = \frac{dZ_{p'k'pk}}{dt}$, bleibt diese Symmetrie auch unter dem Fluß erhalten.

Die dimensionslosen Flußgleichungen für \tilde{J}_{kp} , \tilde{V}_{kp} und $\tilde{Z}_{kpk'p'}$ lauten dann

$$\begin{aligned}
 \frac{d\tilde{J}_{kp}}{d\tilde{l}} &= -(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p) \tilde{\eta}_{kp}^1 + 2 \frac{J_0}{N} \sum_q (2f_q - 1) (\tilde{\eta}_{kq}^1 \tilde{J}_{qp} - \tilde{J}_{kq} \tilde{\eta}_{qp}^1) \\
 &\quad + \frac{J_0}{N} \sum_q (\tilde{\eta}_{kq}^2 \tilde{J}_{qp} - \tilde{J}_{kq} \tilde{\eta}_{qp}^2) + \frac{J_0}{N} \sum_q (\tilde{\eta}_{kq}^1 \tilde{V}_{qp} - \tilde{V}_{kq} \tilde{\eta}_{qp}^1) \\
 \frac{d\tilde{V}_{kp}}{d\tilde{l}} &= -(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p) \tilde{\eta}_{kp}^2 + 3 \frac{J_0}{N} \sum_q (\tilde{\eta}_{kq}^1 \tilde{J}_{qp} - \tilde{J}_{kq} \tilde{\eta}_{qp}^1) + \frac{J_0}{N} \sum_q (\tilde{\eta}_{kq}^2 \tilde{V}_{qp} - \tilde{V}_{kq} \tilde{\eta}_{qp}^2) \\
 \frac{d\tilde{Z}_{kpk'p'}}{d\tilde{l}} &= -(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p + \tilde{\epsilon}_{k'} - \tilde{\epsilon}_{p'}) \tilde{\eta}_{kpk'p'}^3 + \frac{1}{2} \frac{J_0}{N} (\tilde{\eta}_{k'p'}^1 \tilde{J}_{kp} - \tilde{J}_{k'p'} \tilde{\eta}_{kp}^1)
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

Wir werden nun zuerst die Differentialgleichungen für \tilde{J}_{kp} und \tilde{V}_{kp} lösen und danach mit Hilfe der hierfür gewonnenen Terme sowie weiterer Vereinfachungen diejenige für $\tilde{Z}_{kpk'p'}$ lösen.

4.2.1 Die Ordnung J_0^0

In niedrigster Ordnung stellen sich die Flußgleichungen dar als

$$\begin{aligned}
 \frac{d\tilde{J}_{kp}}{d\tilde{l}} &= -(f_k + f_p - 2f_k f_p) (\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p)^2 \tilde{J}_{kp} \\
 \frac{d\tilde{V}_{kp}}{d\tilde{l}} &= -(f_k + f_p - 2f_k f_p) (\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p)^2 \tilde{V}_{kp} .
 \end{aligned} \tag{4.14}$$

Da ϵ_k unabhängig von l ist (siehe Gl.(4.9)), lassen sich diese Differentialgleichungen leicht integrieren, und man erhält

$$\begin{aligned}
 \tilde{J}_{kp} &= \hat{J}_{kp} \exp(-(f_k + f_p - 2f_k f_p) (\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p)^2 \tilde{l}) \\
 \tilde{V}_{kp} &= \hat{V}_{kp} \exp(-(f_k + f_p - 2f_k f_p) (\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p)^2 \tilde{l}) ,
 \end{aligned} \tag{4.15}$$

wobei die Startwerte \hat{J}_{kp} bzw. \hat{V}_{kp} für $\tilde{l} = 0$ gelten.

An den Lösungen ist zu erkennen, daß in dieser Ordnung \hat{J}_{kp} bzw. \hat{V}_{kp} für $\tilde{l} \rightarrow \infty$ verschwinden, falls $k \cdot p < 0$ ist, denn dann ist $f_k + f_p - 2f_k f_p = 1$ und $\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p \neq 0$, während für $k \cdot p > 0$ die Gleichung $f_k + f_p - 2f_k f_p = 0$ gilt.

4.2.2 Die Ordnung J_0^1

In nächster Ordnung ergibt sich

$$\begin{aligned}
 \frac{d\tilde{J}_{kp}}{d\tilde{l}} &= -(f_k + f_p - 2f_k f_p)(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p)^2 \tilde{J}_{kp} \\
 &+ \frac{J_0}{N} \left\{ (f_k - f_p)(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p) \sum_q (1 - 2f_q) \left(2\hat{J}_{kq}\hat{J}_{qp}(2f_q - 1) + \hat{V}_{kq}\hat{J}_{qp} + \hat{J}_{kq}\hat{V}_{qp} \right) \right. \\
 &\cdot \exp \left(f_k(2f_q - 1)(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_q)^2 + f_p(2f_q - 1)(\tilde{\epsilon}_q - \tilde{\epsilon}_p)^2 - f_q \left((\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_q)^2 + (\tilde{\epsilon}_q - \tilde{\epsilon}_p)^2 \right) \tilde{l} \right) \left. \right\} \\
 &+ \frac{J_0}{N} \left\{ 2 \sum_q (2f_q - 1) \left(f_q(\tilde{\epsilon}_k + \tilde{\epsilon}_p) - (2f_q - 1)(f_k \tilde{\epsilon}_k + f_p \tilde{\epsilon}_p) \right) \right. \\
 &+ \left((2f_q - 1)(f_k + f_p) - 2f_q \right) \tilde{\epsilon}_q \hat{J}_{kq} \hat{J}_{qp} \\
 &\cdot \exp \left(f_k(2f_q - 1)(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_q)^2 + f_p(2f_q - 1)(\tilde{\epsilon}_q - \tilde{\epsilon}_p)^2 - f_q \left((\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_q)^2 + (\tilde{\epsilon}_q - \tilde{\epsilon}_p)^2 \right) \tilde{l} \right) \left. \right\} \\
 &+ \frac{J_0}{N} \left\{ \sum_q \left(f_q(\tilde{\epsilon}_k + \tilde{\epsilon}_p) - (2f_q - 1)(f_k \tilde{\epsilon}_k + f_p \tilde{\epsilon}_p) \right) \right. \\
 &+ \left((2f_q - 1)(f_k + f_p) - 2f_q \right) \tilde{\epsilon}_q \left(\hat{J}_{kq}\hat{V}_{qp} + \hat{V}_{kq}\hat{J}_{qp} \right) \\
 &\cdot \exp \left(f_k(2f_q - 1)(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_q)^2 + f_p(2f_q - 1)(\tilde{\epsilon}_q - \tilde{\epsilon}_p)^2 - f_q \left((\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_q)^2 + (\tilde{\epsilon}_q - \tilde{\epsilon}_p)^2 \right) \tilde{l} \right) \left. \right\} \\
 \frac{d\tilde{V}_{kp}}{d\tilde{l}} &= -(f_k + f_p - 2f_k f_p)(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p)^2 \tilde{V}_{kp} \\
 &+ \frac{J_0}{N} \left\{ (f_k - f_p)(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p) \sum_q (1 - 2f_q) \left(3\hat{J}_{kq}\hat{J}_{qp} + \hat{V}_{kq}\hat{V}_{qp} \right) \right. \\
 &\cdot \exp \left(f_k(2f_q - 1)(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_q)^2 + f_p(2f_q - 1)(\tilde{\epsilon}_q - \tilde{\epsilon}_p)^2 - f_q \left((\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_q)^2 + (\tilde{\epsilon}_q - \tilde{\epsilon}_p)^2 \right) \tilde{l} \right) \left. \right\} \\
 &+ \frac{J_0}{N} \left\{ \sum_q \left(f_q(\tilde{\epsilon}_k + \tilde{\epsilon}_p) - (2f_q - 1)(f_k \tilde{\epsilon}_k + f_p \tilde{\epsilon}_p) \right) \right. \\
 &+ \left((2f_q - 1)(f_k + f_p) - 2f_q \right) \tilde{\epsilon}_q \left(3\hat{J}_{kq}\hat{J}_{qp} + \hat{V}_{kq}\hat{V}_{qp} \right) \\
 &\cdot \exp \left(f_k(2f_q - 1)(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_q)^2 + f_p(2f_q - 1)(\tilde{\epsilon}_q - \tilde{\epsilon}_p)^2 - f_q \left((\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_q)^2 + (\tilde{\epsilon}_q - \tilde{\epsilon}_p)^2 \right) \tilde{l} \right) \left. \right\}.
 \end{aligned} \tag{4.16}$$

Für die weiteren Rechnungen werden folgende Abkürzungen eingeführt:

$$\begin{aligned}
 F_1 &:= f_q(\tilde{\epsilon}_k + \tilde{\epsilon}_p) - (2f_q - 1)(f_k \tilde{\epsilon}_k + f_p \tilde{\epsilon}_p) + \left((2f_q - 1)(f_k + f_p) - 2f_q \right) \tilde{\epsilon}_q \\
 F_2 &:= f_k(2f_q - 1)(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_q)^2 + f_p(2f_q - 1)(\tilde{\epsilon}_q - \tilde{\epsilon}_p)^2 - f_q \left((\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_q)^2 + (\tilde{\epsilon}_q - \tilde{\epsilon}_p)^2 \right) \\
 \alpha &:= \tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

Die Integration dieser beiden Differentialgleichungen ergibt

$$\begin{aligned}
 \tilde{J}_{kp}(\tilde{l}) &= \hat{J}_{kp} \exp(-(f_k + f_p - 2f_k f_p)\alpha^2 \tilde{l}) \\
 &\quad + \exp(-(f_k + f_p - 2f_k f_p)\alpha^2 \tilde{l}) \cdot \frac{J_0}{N} \\
 &\quad \left\{ (f_k - f_p)\alpha \sum_q (1 - 2f_q) \left(2\hat{J}_{kq}\hat{J}_{qp}(2f_q - 1) + \hat{V}_{kq}\hat{J}_{qp} + \hat{J}_{kq}\hat{V}_{qp} \right) \right. \\
 &\quad \left. + 2 \sum_q (2f_q - 1)F_1 \hat{J}_{kq}\hat{J}_{qp} + \sum_q F_1 \left(\hat{J}_{kq}\hat{V}_{qp} + \hat{V}_{kq}\hat{J}_{qp} \right) \right\} \cdot \frac{\exp(F_2 \cdot \tilde{l}) - 1}{F_2 + (f_k + f_p - 2f_k f_p)\alpha^2} \\
 \\
 \tilde{V}_{kp}(\tilde{l}) &= \hat{V}_{kp} \exp(-(f_k + f_p - 2f_k f_p)\alpha^2 \tilde{l}) \\
 &\quad + \exp(-(f_k + f_p - 2f_k f_p)\alpha^2 \tilde{l}) \cdot \frac{J_0}{N} \left\{ (f_k - f_p)\alpha \sum_q (1 - 2f_q) \left(3\hat{J}_{kq}\hat{J}_{qp} + \hat{V}_{kq}\hat{V}_{qp} \right) \right. \\
 &\quad \left. + \sum_q F_1 \left(3\hat{J}_{kq}\hat{J}_{qp} + \hat{V}_{kq}\hat{V}_{qp} \right) \right\} \cdot \frac{\exp(F_2 \cdot \tilde{l}) - 1}{F_2 + (f_k + f_p - 2f_k f_p)\alpha^2}.
 \end{aligned} \tag{4.18}$$

Behufs besserer Übersichtlichkeit wollen wir drei Bereiche der $k-p$ -Ebene getrennt betrachten: im ersten Fall die beiden Quadranten, welche durch $k \cdot p < 0$ festgelegt sind, im zweiten Fall solle gelten $k < 0$ und $p < 0$, während im dritten Fall $k > 0$ und $p > 0$ gesetzt wird.

In allen Fällen ersetzen wir die Summation über q durch eine Integration über ϵ in den Grenzen $-D$ bis D , wobei wir die Koeffizienten J_{kp} durch $J(\epsilon_k, \epsilon_p)$ bzw. V_{kp} durch $V(\epsilon_k, \epsilon_p)$ ersetzen sowie die Verteilungsfunktion anstelle f_k mit $f(\epsilon_k)$ bezeichnen.

1. $k \cdot p < 0$

Wir können wegen $J_{kp} = J_{pk}$ bzw. $V_{kp} = V_{pk}$ ohne Beschränkung der Allgemeinheit $k < 0$ voraussetzen. Da wir den Fall $T = 0$ betrachten, vereinfachen sich die Ausdrücke (4.18) zu

$$\begin{aligned}
 \tilde{J}_{kp}(\tilde{l}) &= \hat{J}_{kp} \exp(-\alpha^2 \tilde{l}) \\
 &+ J_0 \left\{ \int_{\tilde{\epsilon} < 0} d\tilde{\epsilon} r(\tilde{\epsilon}) \left[\left(2 \cdot (2\tilde{\epsilon}_p - \tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}) \hat{J}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon}) \hat{J}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) \right. \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. \left. - (\tilde{\epsilon}_k - 2\tilde{\epsilon}_p + \tilde{\epsilon}) (\hat{J}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon}) \hat{V}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) + \hat{V}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon}) \hat{J}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p)) \right) \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. \cdot \frac{e^{-(\tilde{\epsilon} - \tilde{\epsilon}_p)^2 \tilde{l}} - e^{-\alpha^2 \tilde{l}}}{-(\tilde{\epsilon} - \tilde{\epsilon}_p)^2 + \alpha^2} \right] \right. \\
 &+ \int_{\tilde{\epsilon} > 0} d\tilde{\epsilon} r(\tilde{\epsilon}) \left[(\tilde{\epsilon}_p - 2\tilde{\epsilon}_k + \tilde{\epsilon}) \left(2\hat{J}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon}) \hat{J}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) - \hat{J}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon}) \hat{V}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) - \hat{V}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon}) \hat{J}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) \right) \right. \\
 &\quad \left. \cdot \frac{e^{-(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon})^2 \tilde{l}} - e^{-\alpha^2 \tilde{l}}}{-(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon})^2 + \alpha^2} \right] \left. \right\} \\
 \\
 \tilde{V}_{kp}(\tilde{l}) &= \hat{V}_{kp} \exp(-\alpha^2 \tilde{l}) \\
 &+ J_0 \left\{ \int_{\tilde{\epsilon} < 0} d\tilde{\epsilon} r(\tilde{\epsilon}) (2\tilde{\epsilon}_p - \tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}) \left(3\hat{J}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon}) \hat{J}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) + \hat{V}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon}) \hat{V}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) \right) \cdot \frac{e^{-(\tilde{\epsilon} - \tilde{\epsilon}_p)^2 \tilde{l}} - e^{-\alpha^2 \tilde{l}}}{-(\tilde{\epsilon} - \tilde{\epsilon}_p)^2 + \alpha^2} \right. \\
 &+ \int_{\tilde{\epsilon} > 0} d\tilde{\epsilon} r(\tilde{\epsilon}) (2\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p - \tilde{\epsilon}) \left(3\hat{J}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon}) \hat{J}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) + \hat{V}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon}) \hat{V}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) \right) \cdot \frac{e^{-(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon})^2 \tilde{l}} - e^{-\alpha^2 \tilde{l}}}{-(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon})^2 + \alpha^2} \left. \right\}
 \end{aligned} \tag{4.19}$$

Im hier betrachteten Fall gilt wegen $k \cdot p < 0 : \tilde{\epsilon}_k \neq \tilde{\epsilon}_p$, also $\alpha \neq 0$.
Somit gilt

$$\begin{aligned}
 \lim_{\tilde{l} \rightarrow \infty} \tilde{J}_{kp}(\tilde{l}) &= 0 \\
 \lim_{\tilde{l} \rightarrow \infty} \tilde{V}_{kp}(\tilde{l}) &= 0.
 \end{aligned} \tag{4.20}$$

Dieses Ergebnis zeigt, daß es uns gelungen ist, das Ziel des Flusses zu erreichen, nämlich das Eliminieren derjenigen Anteile des Hamiltonoperators, welche Zustände unterhalb mit solchen oberhalb der Fermikante verknüpfen. Diese Terme entsprechen gerade den J_{kp} bzw. V_{kp} für $k \cdot p < 0$.

2. $k < 0, \quad p < 0$

Wir erhalten

$$\begin{aligned}
 \tilde{J}_{kp}(\tilde{l}) &= \hat{J}_{kp} \\
 &+ J_0 \int_{\tilde{\epsilon} > 0} d\tilde{\epsilon} r(\tilde{\epsilon})(\tilde{\epsilon}_k + \tilde{\epsilon}_p - 2\tilde{\epsilon}) \left(-2\hat{J}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon})\hat{J}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) \right. \\
 &\quad \left. + \hat{J}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon})\hat{V}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) + \hat{V}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon})\hat{J}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) \right) \cdot \frac{1 - e^{-((\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon})^2 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\epsilon}_p)^2)\tilde{l}}}{(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon})^2 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\epsilon}_p)^2} \\
 \tilde{V}_{kp}(\tilde{l}) &= \hat{V}_{kp} \\
 &+ J_0 \int_{\tilde{\epsilon} > 0} d\tilde{\epsilon} r(\tilde{\epsilon})(\tilde{\epsilon}_k + \tilde{\epsilon}_p - 2\tilde{\epsilon}) \left(3\hat{J}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon})\hat{J}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) + \hat{V}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon})\hat{V}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) \right) \\
 &\quad \cdot \frac{1 - e^{-((\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon})^2 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\epsilon}_p)^2)\tilde{l}}}{(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon})^2 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\epsilon}_p)^2} \tag{4.21}
 \end{aligned}$$

und im Grenzfall $\tilde{l} \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned}
 \tilde{J}_{kp}(\infty) &= \hat{J}_{kp} \\
 &+ J_0 \int_{\tilde{\epsilon} > 0} d\tilde{\epsilon} r(\tilde{\epsilon})(\tilde{\epsilon}_k + \tilde{\epsilon}_p - 2\tilde{\epsilon}) \left(-2\hat{J}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon})\hat{J}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) + \hat{J}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon})\hat{V}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) \right. \\
 &\quad \left. + \hat{V}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon})\hat{J}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) \right) \cdot \frac{1}{(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon})^2 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\epsilon}_p)^2} \\
 \tilde{V}_{kp}(\infty) &= \hat{V}_{kp} \\
 &+ J_0 \int_{\tilde{\epsilon} > 0} d\tilde{\epsilon} r(\tilde{\epsilon})(\tilde{\epsilon}_k + \tilde{\epsilon}_p - 2\tilde{\epsilon}) \left(3\hat{J}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon})\hat{J}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) \right. \\
 &\quad \left. + \hat{V}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon})\hat{V}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) \right) \cdot \frac{1}{(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon})^2 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\epsilon}_p)^2} \tag{4.22}
 \end{aligned}$$

3. $k > 0, \quad p > 0$

Hier ergibt sich

$$\begin{aligned}
 \tilde{J}_{kp}(\tilde{l}) &= \hat{J}_{kp} \\
 &\quad - J_0 \int_{\tilde{\epsilon} < 0} d\tilde{\epsilon} r(\tilde{\epsilon})(\tilde{\epsilon}_k + \tilde{\epsilon}_p - 2\tilde{\epsilon}) \left(-2\hat{J}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon})\hat{J}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) + \hat{J}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon})\hat{V}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) \right. \\
 &\quad \left. + \hat{V}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon})\hat{J}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) \right) \cdot \frac{1 - e^{-((\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon})^2 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\epsilon}_p)^2)\tilde{l}}}{(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon})^2 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\epsilon}_p)^2} \\
 \tilde{V}_{kp}(\tilde{l}) &= \hat{V}_{kp} \\
 &\quad + J_0 \int_{\tilde{\epsilon} < 0} d\tilde{\epsilon} r(\tilde{\epsilon})(\tilde{\epsilon}_k + \tilde{\epsilon}_p - 2\tilde{\epsilon}) \left(3\hat{J}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon})\hat{J}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) \right. \\
 &\quad \left. + \hat{V}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon})\hat{V}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) \right) \cdot \frac{1 - e^{-((\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon})^2 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\epsilon}_p)^2)\tilde{l}}}{(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon})^2 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\epsilon}_p)^2} \tag{4.23}
 \end{aligned}$$

und im Limes $\tilde{l} \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned}
 \tilde{J}_{kp}(\infty) &= \hat{J}_{kp} \\
 &\quad - J_0 \int_{\tilde{\epsilon} < 0} d\tilde{\epsilon} r(\tilde{\epsilon})(\tilde{\epsilon}_k + \tilde{\epsilon}_p - 2\tilde{\epsilon}) \left(-2\hat{J}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon})\hat{J}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) + \hat{J}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon})\hat{V}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) \right. \\
 &\quad \left. + \hat{V}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon})\hat{J}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) \right) \cdot \frac{1}{(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon})^2 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\epsilon}_p)^2} \\
 \tilde{V}_{kp}(\infty) &= \hat{V}_{kp} \\
 &\quad + J_0 \int_{\tilde{\epsilon} < 0} d\tilde{\epsilon} r(\tilde{\epsilon})(\tilde{\epsilon}_k + \tilde{\epsilon}_p - 2\tilde{\epsilon}) \left(3\hat{J}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon})\hat{J}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) \right. \\
 &\quad \left. + \hat{V}(\tilde{\epsilon}_k, \tilde{\epsilon})\hat{V}(\tilde{\epsilon}, \tilde{\epsilon}_p) \right) \cdot \frac{1}{(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon})^2 + (\tilde{\epsilon} - \tilde{\epsilon}_p)^2} \tag{4.24}
 \end{aligned}$$

4.2.3 Auswertung der Gleichungen für $\tilde{J}_{kp}(\infty)$ und $\tilde{V}_{kp}(\infty)$

Da wir im nächsten Abschnitt die eben errechneten Größen für weitere Rechnungen benötigen, möchten wir an dieser Stelle die Integrale von $\tilde{J}_{kp}(\infty)$ und $\tilde{V}_{kp}(\infty)$ unter Zusatzbedingungen auswerten und für die Berechnung von $\tilde{Z}_{kpk'p'}(\infty)$ verwenden.

1. Wir wollen annehmen, daß die Anfangswerte der Spin-Spin-Wechselwirkung Impuls- bzw. Energieunabhängigkeit aufweisen, mit anderen Worten, daß gilt

$$\hat{J}(\epsilon_k, \epsilon_p) = \hat{J} \quad \text{für alle } \epsilon_k, \epsilon_p \in [-D, D]. \quad (4.25)$$

2. Da der Potentialstreuungsterm ursprünglich nicht Teil des Hamiltonoperators war und wir ihn lediglich zwecks Schließen der Flußgleichungen hinzugenommen haben, dürfen wir die Anfangswerte Null setzen, das heißt

$$\hat{V}(\epsilon_k, \epsilon_p) = 0 \quad \text{für alle } \epsilon_k, \epsilon_p \in [-D, D]. \quad (4.26)$$

3. Wir nehmen eine konstante Zustandsdichte an, also

$$r(\epsilon) = r \quad \text{für alle } \epsilon \in [-D, D]. \quad (4.27)$$

Mit diesen Annahmen lassen sich die Integrale über ϵ analytisch berechnen und zwar im 2. Fall $k < 0$ und $p < 0$:

$$\begin{aligned} \tilde{J}_{kp}(\infty) &= \hat{J} + J_0 \cdot \hat{J}^2 r \cdot \ln \frac{(D - \epsilon_k)^2 + (D - \epsilon_p)^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_p^2} \\ \tilde{V}_{kp}(\infty) &= -\frac{3}{2} J_0 \cdot \hat{J}^2 r \cdot \ln \frac{(D - \epsilon_k)^2 + (D - \epsilon_p)^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_p^2} \end{aligned} \quad (4.28)$$

und im 3. Fall $k > 0$ und $p > 0$:

$$\begin{aligned} \tilde{J}_{kp}(\infty) &= \hat{J} + J_0 \cdot \hat{J}^2 r \cdot \ln \frac{(D + \epsilon_k)^2 + (D + \epsilon_p)^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_p^2} \\ \tilde{V}_{kp}(\infty) &= \frac{3}{2} J_0 \cdot \hat{J}^2 r \cdot \ln \frac{(D + \epsilon_k)^2 + (D + \epsilon_p)^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_p^2} \end{aligned} \quad (4.29)$$

An dieser Stelle weichen die Ergebnisse von unserer Diplomarbeit [Vog] ab, dort erhielten wir in Ordnung \hat{J}^2 ein jeweils umgekehrtes Vorzeichen.

Da wir im nächsten Kapitel auf die Terme für $J_{kp}(\infty)$ und $V_{kp}(\infty)$ zurückgreifen werden, sei bereits hier eine vereinfachte Schreibweise eingeführt:

$k > 0, p > 0$:

$$\begin{aligned}
 J_{kp}(\infty) &= \frac{D}{N} J_0 \tilde{J}_{kp}(\infty) \\
 &= \frac{D}{N} J_0 \hat{J} + \frac{D}{N} J_0^2 \hat{J}^2 r \ln \frac{(D + \epsilon_k)^2 + (D + \epsilon_p)^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_p^2} \\
 &=: \frac{J}{N} \left(1 + Jr \ln \frac{(D + \epsilon_k)^2 + (D + \epsilon_p)^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_p^2} \right), \tag{4.30}
 \end{aligned}$$

wobei wir $J := DJ_0 \hat{J}$ gesetzt haben, und

$$\begin{aligned}
 V_{kp}(\infty) &= \frac{D}{N} J_0 \tilde{V}_{kp}(\infty) \\
 &= \frac{3J}{2N} Jr \ln \frac{(D + \epsilon_k)^2 + (D + \epsilon_p)^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_p^2}, \tag{4.31}
 \end{aligned}$$

4.2.4 Berechnung von $\tilde{Z}_{kpk'p'}(\infty)$

Wir führen noch einmal Gleichung (4.13) an:

$$\frac{d\tilde{Z}_{kpk'p'}}{d\tilde{l}} = -(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p + \tilde{\epsilon}_{k'} - \tilde{\epsilon}_{p'}) \tilde{\eta}_{kpk'p'}^3 + \frac{1}{2} \frac{J_0}{N} (\tilde{\eta}_{k'p'}^1 \tilde{J}_{kp} - \tilde{J}_{k'p'} \tilde{\eta}_{kp}^1)$$

und ersetzen $\tilde{\eta}_{kpk'p'}^3$ und $\tilde{\eta}_{kp}^1$ bzw. $\tilde{\eta}_{k'p'}^1$ durch die entsprechenden Ausdrücke:

$$\begin{aligned}
 \frac{d\tilde{Z}_{kpk'p'}}{d\tilde{l}} &= -(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p + \tilde{\epsilon}_{k'} - \tilde{\epsilon}_{p'})^2 f_{kpk'p'} \tilde{Z}_{kpk'p'} \\
 &\quad - \frac{1}{2} \frac{J_0}{N} \tilde{J}_{kp} \tilde{J}_{k'p'} ((\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p)(2f_{kp} - f_{k'p'}) - (\tilde{\epsilon}_{k'} - \tilde{\epsilon}_{p'})(2f_{k'p'} - f_{kp})) \tag{4.32}
 \end{aligned}$$

Diese Differentialgleichung läßt sich integrieren und man erhält

$$\begin{aligned} \tilde{Z}_{kp'k'p'}(\tilde{l}) = & \exp(-(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p + \tilde{\epsilon}_{k'} - \tilde{\epsilon}_{p'})^2 f_{kp'k'p'} \tilde{l}) \cdot \left(\hat{Z}_{kp'k'p'} \right. \\ & - \int_0^{\tilde{l}} \frac{J_0}{2N} \left((\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p)(2f_{kp} - f_{k'p'}) - (\tilde{\epsilon}_{k'} - \tilde{\epsilon}_{p'})(2f_{k'p'} - f_{kp}) \right) \cdot \\ & \left. \tilde{J}_{kp} \tilde{J}_{k'p'} \cdot e^{((\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p + \tilde{\epsilon}_{k'} - \tilde{\epsilon}_{p'})^2 f_{kp'k'p'} t)} dt \right) \quad (4.33) \end{aligned}$$

In dieser Gleichung steht $\hat{Z}_{kp'k'p'}$ für den Startwert der Kopplungskonstanten $Z_{kp'k'p'}$. Da wir nur bis zur Ordnung J_0^2 rechnen, genügt es, für die in dem Integral auftretenden \tilde{J}_{kp} bzw. $\tilde{J}_{k'p'}$ die Ordnung J_0 , d.h. gemäß (4.15)

$\tilde{J}_{kp}(t) = \hat{J}_{kp} \exp(-f_{kp} (\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p)^2 t)$ zu verwenden, so daß sich damit ergibt:

$$\begin{aligned} \tilde{Z}_{kp'k'p'}(\tilde{l}) = & \exp(-(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p + \tilde{\epsilon}_{k'} - \tilde{\epsilon}_{p'})^2 f_{kp'k'p'} \tilde{l}) \cdot \\ & \left(\hat{Z}_{kp'k'p'} - \frac{J_0}{2N} \left((\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p)(2f_{kp} - f_{k'p'}) - (\tilde{\epsilon}_{k'} - \tilde{\epsilon}_{p'})(2f_{k'p'} - f_{kp}) \right) \hat{J}_{kp} \hat{J}_{k'p'} \cdot \right. \\ & \left. \frac{e^{((\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p + \tilde{\epsilon}_{k'} - \tilde{\epsilon}_{p'})^2 f_{kp'k'p'} - (\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p)^2 f_{kp} - (\tilde{\epsilon}_{k'} - \tilde{\epsilon}_{p'})^2 f_{k'p'}) \tilde{l}} - 1}{(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p + \tilde{\epsilon}_{k'} - \tilde{\epsilon}_{p'})^2 f_{kp'k'p'} - (\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p)^2 f_{kp} - (\tilde{\epsilon}_{k'} - \tilde{\epsilon}_{p'})^2 f_{k'p'}} \right) \quad (4.34) \end{aligned}$$

Wir setzen an dieser Stelle $\hat{Z}_{kp'k'p'} = 0$ und lassen \tilde{l} gegen ∞ streben.

In Abhängigkeit von den Werten $f_{kp'k'p'}$, f_{kp} und $f_{k'p'}$ ergeben sich folgende Werte:

Ist $k < 0$, $p > 0$, $k' > 0$ und $p' < 0$ oder umgekehrt $k > 0$, $p < 0$, $k' < 0$ und $p' > 0$, so bleibt die Quasi-Teilchen-Zahl erhalten, da ein Elektron von unterhalb nach oberhalb der Fermikante hüpfet und ein anderes von oberhalb nach unterhalb der Fermikante. In diesem Fall nimmt $\tilde{Z}_{kp'k'p'}(\infty)$ folgenden Wert an:

$$\tilde{Z}_{kp'k'p'}(\infty) = \frac{J_0}{2N} \hat{J}_{kp} \hat{J}_{k'p'} \frac{-(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p) + (\tilde{\epsilon}_{k'} - \tilde{\epsilon}_{p'})}{(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\epsilon}_p)^2 + (\tilde{\epsilon}_{k'} - \tilde{\epsilon}_{p'})^2} \quad (4.35)$$

Transformiert man nun wieder von den geschlängelten Größen zu den ursprünglichen, erhält man folgendes Endergebnis:

Fall 1: $k < 0, p > 0, k' > 0, p' < 0$ oder $k > 0, p < 0, k' < 0, p' > 0$

$$Z_{kp k' p'}(\infty) = -\frac{1}{2} \frac{J^2}{N^2} \frac{(\epsilon_k - \epsilon_p) - (\epsilon_{k'} - \epsilon_{p'})}{(\epsilon_k - \epsilon_p)^2 + (\epsilon_{k'} - \epsilon_{p'})^2} \quad (4.36)$$

Fall 2: sonst

$$Z_{kp k' p'}(\infty) = 0 \quad (4.37)$$

5. Der Grundzustand des Ein-Kanal-Kondo-Modells und die Kondo-Temperatur

Mit den im vorherigen Kapitel errechneten Größen für die Matrixelemente der Spin-Spin-Wechselwirkung, der Potentialstreuung und der Zwei-Teilchen-Wechselwirkung wollen wir nun versuchen, den Grundzustand des mittels des Flußgleichungsverfahrens transformierten Hamiltonoperators zu ermitteln. Wie bereits erwähnt wurde, bildet der Grundzustand des Kondo-Systemes ein Singulett, und es tritt eine Energieabsenkung gegenüber dem System ohne Spin-Spin-Wechselwirkung bzw. ohne Störstelle auf. Von besonderem Interesse ist die Grundzustandsenergie deswegen, weil mit der Energieabsenkung die Kondo-Temperatur als charakteristische Größe direkt verknüpft ist.

In einem Artikel von 1966 hat Yosida [Yos] die Energieabsenkung errechnet, wobei er angenommen hatte, daß die Elektronen unterhalb der Fermikante nicht an der Spin-Spin-Wechselwirkung teilnehmen, sondern nur Elektronen oberhalb der Fermikante. Insbesondere hat er diejenigen Terme vernachlässigt, in welchen Zustände unterhalb mit Zuständen oberhalb der Fermikante verknüpft werden. Diese Näherung führte zu einer etwas zu kleinen Energieabsenkung. Wir haben den Hamiltonoperator indessen gerade so transformiert, daß die letztgenannten Terme verschwinden, dafür wurden andere Anteile modifiziert bzw. generiert.

Wir wollen also versuchen, mit einem ähnlichen Ansatz die Energieabsenkung zu berechnen, wobei wir ebenfalls vernünftigerweise annehmen, daß die Elektronen unterhalb der Fermikante nicht an der Wechselwirkung beteiligt sind.

5.1 Der Grundzustand

Der Hamiltonoperator lautet demnach

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{k,\alpha} \epsilon_k : c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} : + \sum_{\substack{k,p,\alpha,\beta \\ k,p>0}} J_{kp}(\infty) : c_{k\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{p\beta} : \vec{\tau} + \sum_{\substack{k,p,\alpha \\ k,p>0}} V_{kp}(\infty) : c_{k\alpha}^\dagger c_{p\alpha} : \\
 & + \sum_{\substack{k,p,\alpha,\beta \\ k',p',\alpha',\beta'}} \sum_{l,m,n} Z_{kpk'p'}(\infty) \epsilon_{lmn} : c_{k\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^l c_{p\beta} c_{k'\alpha'}^\dagger \sigma_{\alpha'\beta'}^m c_{p'\beta'} : \tau^n
 \end{aligned} \quad (5.1)$$

mit

$$\begin{aligned}
 J_{kp}(\infty) &= \frac{J}{N} \left(1 + Jr \ln \frac{(D + \epsilon_k)^2 + (D + \epsilon_p)^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_p^2} \right), \\
 V_{kp}(\infty) &= \frac{3J}{2N} Jr \ln \frac{(D + \epsilon_k)^2 + (D + \epsilon_p)^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_p^2}, \\
 Z_{kpk'p'}(\infty) &= -\frac{1}{2} \frac{J^2}{N^2} \frac{(\epsilon_k - \epsilon_p) - (\epsilon_{k'} - \epsilon_{p'})}{(\epsilon_k - \epsilon_p)^2 + (\epsilon_{k'} - \epsilon_{p'})^2}
 \end{aligned} \quad (5.2)$$

gemäß den Ergebnissen aus Kapitel 4. Die Konstante E_0 haben wir nicht berücksichtigt. Die Indizes l, m, n stehen der Kürze wegen gleich für Elemente aus $\{+, -, z\}$.

Für die Wellenfunktion machen wir den Ansatz

$$\psi = \sum_{k>k_F} \left\{ \left(\Gamma_{k\uparrow}^\alpha c_{k\uparrow}^\dagger + \Gamma_{k\downarrow}^\alpha c_{k\downarrow}^\dagger \right) \psi_v \alpha + \left(\Gamma_{k\uparrow}^\beta c_{k\uparrow}^\dagger + \Gamma_{k\downarrow}^\beta c_{k\downarrow}^\dagger \right) \psi_v \beta \right\} \quad (5.3)$$

mit Entwicklungskoeffizienten Γ_{ks}^i , der Wellenfunktion des Fermisees ψ_v und den Eigenfunktionen des Störstellenspins, dessen Quantenzahl als $t = 1/2$ angenommen wird, α für $t_z = +1/2$ und β für $t_z = -1/2$.

Aus der zeitunabhängigen Schrödingergleichung $H\psi = E\psi$ gewinnen wir mittels Koeffizientenvergleich folgende vier Gleichungen

$$\Gamma_{k\uparrow}^\alpha(\epsilon_k - E) + \frac{J}{N} \sum_{k'} J_{kk'} \Gamma_{k'\uparrow}^\alpha + \frac{J}{N} \sum_{k'} V_{kk'} \Gamma_{k'\uparrow}^\alpha = 0 \quad (5.4)$$

$$\Gamma_{k\downarrow}^\alpha(\epsilon_k - E) - \frac{J}{N} \sum_{k'} J_{kk'} \Gamma_{k'\downarrow}^\alpha + 2 \frac{J}{N} \sum_{k'} J_{kk'} \Gamma_{k'\uparrow}^\beta + \frac{J}{N} \sum_{k'} V_{kk'} \Gamma_{k'\downarrow}^\alpha = 0 \quad (5.5)$$

$$\Gamma_{k\uparrow}^\beta(\epsilon_k - E) - \frac{J}{N} \sum_{k'} J_{kk'} \Gamma_{k'\uparrow}^\beta + 2 \frac{J}{N} \sum_{k'} J_{kk'} \Gamma_{k'\downarrow}^\alpha + \frac{J}{N} \sum_{k'} V_{kk'} \Gamma_{k'\uparrow}^\beta = 0 \quad (5.6)$$

$$\Gamma_{k\downarrow}^\beta(\epsilon_k - E) + \frac{J}{N} \sum_{k'} J_{kk'} \Gamma_{k'\downarrow}^\beta + \frac{J}{N} \sum_{k'} V_{kk'} \Gamma_{k'\downarrow}^\beta = 0 \quad (5.7)$$

Die Summationen sind nur über positive k' auszuführen! Die $J_{kk'}$ bzw. $V_{kk'}$ bezeichnen nun die Kopplungskonstanten nach Division mit J/N gemäß Gleichungen (5.2).

Warum taucht kein Beitrag von dem Zwei-Teilchen-Term mit Kopplungsgröße $Z_{kp k' p'}$ auf? Bei der Temperatur $T = 0$ befinden sich alle Elektronen (außer dem einen hinzugefügten) unterhalb der Fermikante, und dort sind auch alle Zustände besetzt. Da der Zwei-Teilchen-Term nur Beiträge liefert, wenn sich ein Elektron von oberhalb nach unterhalb und ein Elektron von unterhalb nach oberhalb der Fermikante bewegt, müßte das höhere Elektron in das erst entstehende Loch unterhalb der Fermikante gelangen. Dann wären aber zwei Impulse (also z.B. k und p') gleich, ein Beitrag, der wegen der Normalordnung bereits in den Ein-Teilchen-Termen berücksichtigt ist. Tatsächlich ergibt die Reduktion des Zwei-Teilchen-Termes auf Beiträge mit zwei identischen Impulsen den Wert Null.

Die Gleichungen (5.5) und (5.6) können wir selbstkonsistent und simultan lösen, indem wir $\Gamma_{k\downarrow}^\alpha = -\Gamma_{k\uparrow}^\beta$ setzen, was, wie sich zeigen wird, der Erwartung eines Singulett-Zustandes gerecht wird.

Wir erhalten dann

$$\Gamma_{k\downarrow}^\alpha(\epsilon_k - E) - 3 \cdot \frac{J}{N} \sum_{k'} J_{kk'} \Gamma_{k'\downarrow}^\alpha + \frac{J}{N} \sum_{k'} V_{kk'} \Gamma_{k'\downarrow}^\alpha = 0 \quad (5.8)$$

und daraus

$$\Gamma_{k\downarrow}^\alpha(\epsilon_k - E) - \frac{3J}{2N} \sum_{k'} \left(2 + Jr \ln \frac{(D + \epsilon_k)^2 + (D + \epsilon_{k'})^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_{k'}^2} \right) \Gamma_{k'\downarrow}^\alpha = 0. \quad (5.9)$$

Im Anhang B wird gezeigt, wie sich der Ausdruck $\left(2 + Jr \ln \frac{(D+\epsilon_k)^2+(D+\epsilon_{k'})^2}{\epsilon_k^2+\epsilon_{k'}^2}\right)$ faktorisieren läßt; wir verwenden hier diese Näherung:

$$2 + Jr \ln \frac{(D + \epsilon_k)^2 + (D + \epsilon_{k'})^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_{k'}^2} = h_k \cdot h_{k'} , \quad (5.10)$$

wobei $h_k = \sqrt{2 + 2Jr \ln \frac{D+\epsilon_k}{\epsilon_k}}$.

Es kann also geschrieben werden

$$\Gamma_{k\downarrow}^\alpha(\epsilon_k - E) - \frac{3J}{2N} h_k \sum_{k'} h_{k'} \Gamma_{k'\downarrow}^\alpha = 0 \quad (5.11)$$

und hieraus

$$1 - \frac{3J}{2N} \sum_{k>0} \frac{h_k^2}{\epsilon_k - E} = 0 \quad (5.12)$$

oder eben

$$1 - \frac{3J}{2N} \sum_{k>0} \frac{2 + 2Jr \ln \frac{D+\epsilon_k}{\epsilon_k}}{\epsilon_k - E} = 0 . \quad (5.13)$$

Wir ersetzen wiederum die Summation über k durch eine Integration über ϵ und erhalten unter der Annahme $|E| \ll D$ folgendes Ergebnis, wobei wir hinsichtlich der Integration auf den Anhang C verweisen.

$$1 - 3Jr \ln \frac{D}{|E|} - 3J^2 r^2 \left(\frac{\pi^2}{4} + \frac{1}{2} \left(\ln \frac{D}{|E|} \right)^2 \right) = 0 \quad (5.14)$$

Mit $x := \ln \frac{D}{|E|}$ folgt eine quadratische Gleichung

$$x^2 + \frac{2}{Jr} x - \frac{2}{3J^2 r^2} + \frac{\pi^2}{2} = 0 \quad (5.15)$$

Da J in unserer Betrachtung sehr klein ist (derjenige Parameter, nach welchem wir störungstheoretisch entwickelt haben), kann der lineare Term $\pi^2/2$ gegen $1/J^2 r^2$

vernachlässigt werden.

Die zwei Lösungen für x lauten

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{1}{Jr} \cdot \left(+\sqrt{\frac{5}{3}} - 1 \right) \approx +0,58 \cdot \frac{1}{2Jr} \\ x_2 &= \frac{1}{Jr} \cdot \left(-\sqrt{\frac{5}{3}} - 1 \right) \approx -4,58 \cdot \frac{1}{2Jr} \end{aligned} \quad (5.16)$$

Da wir $x := \ln \frac{D}{|E|}$ gesetzt haben und wir $|E| \ll D$ annehmen dürfen, ist $\frac{D}{|E|} \gg 1$ und somit $x = \ln \frac{D}{|E|} > 0$. Somit betrachten wir nur die positive Lösung x_1 .

Für die Energieabsenkung E ergeben sich dadurch die Lösungen

$$E_{1/2} \approx \pm D \exp\left(-\frac{0,58}{2Jr}\right) \quad (5.17)$$

Es gibt also zwei konsistente Lösungen der Schrödingergleichung für einen Singulett-Zustand, wovon der energetisch günstigere der Grundzustand ist. Wir erhalten demnach für die Energieabsenkung

$$E_0 = -D \exp\left(-\frac{0,58}{2Jr}\right). \quad (5.18)$$

Wir möchten nun noch den Triplett-Zustand betrachten. Die Bestimmungsgleichung für die Energie erhalten wir aus Gl.(5.4) oder äquivalent aus Gl.(5.7):

$$\Gamma_{k\uparrow}^\alpha(\epsilon_k - E) + \frac{J}{N} \sum_{k'} (J_{kk'} + V_{kk'}) \Gamma_{k'\uparrow}^\alpha = 0 \quad (5.19)$$

beziehungsweise

$$\Gamma_{k\uparrow}^\alpha(\epsilon_k - E) + \frac{J}{N} \sum_{k'} \left(1 + \frac{5}{2} Jr \ln \frac{(D + \epsilon_k)^2 + (D + \epsilon_{k'})^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_{k'}^2} \right) \Gamma_{k'\uparrow}^\alpha = 0. \quad (5.20)$$

Unter der Annahme der Faktorierbarkeit erhalten wir

$$1 + \frac{J}{N} \sum_k \frac{\left(1 + 5Jr \ln \frac{D+\epsilon_k}{\epsilon_k}\right)}{\epsilon_k - E} = 0 \quad (5.21)$$

und wieder mit $x := \ln \frac{D}{|E|}$ und der Unterstellung, daß $|E| \ll D$,

$$x^2 + \frac{2}{5Jr}x + \frac{2}{5J^2r^2} = 0, \quad (5.22)$$

eine Gleichung ohne reelle Lösungen. Verzichten wir auf die letzte Näherung und werten Gleichung (5.21) aus, so erhalten wir anstelle der quadratischen Gleichung eine transzendente Gleichung, nämlich

$$1 + Jr \ln \left| \frac{D-E}{E} \right| + 5J^2r^2 \left(\frac{\pi^2}{4} + \ln 2 \ln \left| \frac{D-E}{D+E} \right| + \frac{1}{2} (\ln \left| \frac{E}{D+E} \right|)^2 + \operatorname{dilog} \frac{D-E}{D+E} \right) = 0 \quad (5.23)$$

Die numerische Lösung - gewonnen mit einem Maple-Programm - erweist sich als exponentiell klein unterhalb der oberen Bandkante D , nämlich

$$E = D(1 - e^{-\frac{1}{Jr}}) \quad (5.24)$$

Dieses Ergebnis ist indessen nicht unkritisch zu akzeptieren, da nach wie vor die Faktorierbarkeit gemäß (5.21) unterstellt wird. Wir können dennoch ablesen, daß der Triplett-Zustand keine geringere Energie aufweist als der Singulett-Zustand, welcher dann auch als Grundzustand angesehen werden kann.

Es soll nicht unerwähnt bleiben, daß sich diese Ergebnisse reproduzieren lassen, wenn wir nicht wie im Ansatz Gl. (5.3) ein Elektron hinzunehmen, sondern in unserer Wellenfunktion ein Loch erzeugen, also den Ansatz

$$\psi' = \sum_{k < k_F} \left\{ \left(\Gamma_{k\uparrow}^\alpha c_{k\uparrow} + \Gamma_{k\downarrow}^\alpha c_{k\downarrow} \right) \psi_{v\alpha} + \left(\Gamma_{k\uparrow}^\beta c_{k\uparrow} + \Gamma_{k\downarrow}^\beta c_{k\downarrow} \right) \psi_{v\beta} \right\} \quad (5.25)$$

verwenden und die Matrixelemente für $k < 0, p < 0$ berücksichtigen, das heißt

$$\begin{aligned} J_{kp}(\infty) &= \frac{J}{N} \left(1 + Jr \ln \frac{(D - \epsilon_k)^2 + (D - \epsilon_p)^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_p^2} \right) \\ V_{kp}(\infty) &= -\frac{3J}{2N} Jr \ln \frac{(D - \epsilon_k)^2 + (D - \epsilon_p)^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_p^2}. \end{aligned} \quad (5.26)$$

Wir erhalten dann wieder vier Gleichungen aus $H\psi' = E\psi'$:

$$\Gamma_{k\uparrow}^\alpha(-\epsilon_k - E) - \frac{J}{N} \sum_{k'} J_{kk'} \Gamma_{k'\uparrow}^\alpha - 2 \frac{J}{N} \sum_{k'} J_{kk'} \Gamma_{k'\downarrow}^\beta - \frac{J}{N} \sum_{k'} V_{kk'} \Gamma_{k'\uparrow}^\alpha = 0 \quad (5.27)$$

$$\Gamma_{k\downarrow}^\alpha(-\epsilon_k - E) + \frac{J}{N} \sum_{k'} J_{kk'} \Gamma_{k'\downarrow}^\alpha - \frac{J}{N} \sum_{k'} V_{kk'} \Gamma_{k'\downarrow}^\alpha = 0 \quad (5.28)$$

$$\Gamma_{k\uparrow}^\beta(-\epsilon_k - E) + \frac{J}{N} \sum_{k'} J_{kk'} \Gamma_{k'\uparrow}^\beta - \frac{J}{N} \sum_{k'} V_{kk'} \Gamma_{k'\uparrow}^\beta = 0 \quad (5.29)$$

$$\Gamma_{k\downarrow}^\beta(-\epsilon_k - E) - \frac{J}{N} \sum_{k'} J_{kk'} \Gamma_{k'\downarrow}^\beta - 2 \frac{J}{N} \sum_{k'} J_{kk'} \Gamma_{k'\uparrow}^\alpha - \frac{J}{N} \sum_{k'} V_{kk'} \Gamma_{k'\downarrow}^\beta = 0, \quad (5.30)$$

wobei jetzt die Summationen über $k' < 0$ durchzuführen sind.

Es ergibt sich daraus wieder dieselbe quadratische Gleichung in $\ln \frac{D}{|E|}$ für den Singulett-Zustand, und auch deren Lösungen sind mit denen des zuvor behandelten Ansatzes identisch.

5.2 Die Wellenfunktion des Grundzustandes

Wir erhalten die Grundzustandswellenfunktion ψ_s aus unserem Ansatz, indem wir $\Gamma_{k\downarrow}^\alpha = -\Gamma_{k\uparrow}^\beta = 1/(\epsilon_k - E)$ und $\Gamma_{k\uparrow}^\alpha = \Gamma_{k\downarrow}^\beta = 0$ setzen:

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_{k>0} \frac{1}{\epsilon_k - E} (c_{k\downarrow}^\dagger \alpha - c_{k\uparrow}^\dagger \beta) \psi_v. \quad (5.31)$$

Dieses ψ_s erfüllt offensichtlich die Gleichungen (5.5) und (5.6).

Mit dem Operator des Gesamtspins $\vec{\Sigma} := \vec{\sigma} + \vec{\tau}$ folgt unter Beachtung von $\Sigma^2 = \sigma^2 + \tau^2 + 2\sigma_z \tau_z + \sigma^- \tau^+ + \sigma^+ \tau^-$

$$\langle \psi_s | \Sigma^2 | \psi_s \rangle = 0 ; \quad (5.32)$$

es handelt sich also in der Tat um einen Singulett-Zustand.

Die Normierungskonstante N_0 ermittelt sich aus

$$\langle \psi_s | \psi_s \rangle = \frac{1}{N_0} \left(\sum_{k>0} \frac{1}{\epsilon_k - E} \right)^2 = 1 , \quad (5.33)$$

so daß

$$N_0 = \left(\frac{N}{J} \right)^2 \cdot \left(1 + \sqrt{\frac{5}{3}} \right)^2 . \quad (5.34)$$

Somit lautet die vollständige Wellenfunktion

$$\psi_s = \frac{J}{N} \cdot \frac{\sqrt{15} - 3}{2} \sum_{k>0} \frac{1}{\epsilon_k - E} (c_{k\downarrow}^\dagger \alpha - c_{k\uparrow}^\dagger \beta) \psi_v. \quad (5.35)$$

5.3 Die Kondo-Temperatur

Die Kondo-Temperatur als charakteristische Temperatur kennzeichnet den Übergang vom gebundenen Singulett-Zustand bei Temperaturen darunter zu einem Zustand mit freiem, lokalisiertem Spin bei Temperaturen darüber. Die Kondo-Temperatur ist also mit dem Energiegewinn bei der Singulettbildung, den wir im Abschnitt 5.1 errechnet haben, verknüpft. Wir erhalten für die Kondo-Temperatur T_K

$$k_B T_K = D e^{-\frac{0,58}{2Jr}} . \quad (5.36)$$

Der Wert, der von Wilson 1975 [Wil] ermittelt wurde, lautet

$$k_B T_K = D(c_0 + c_1 J r + c_2 J^2 r^2 \dots) \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{2Jr} + \frac{1}{2} \ln |2Jr| + 1,5824 |2Jr| + O(J^2 r^2) \right\} , \quad (5.37)$$

mit Konstanten $c_0, c_1, c_2 \dots$, während Yosida in seiner eingangs erwähnten Arbeit [Yos] in erster Näherung auf

$$k_B T_K = D e^{-\frac{4}{3} \cdot \frac{1}{2Jr}} \quad (5.38)$$

und unter Hinzunahme von Teilchen-Loch-Anregungen auf

$$k_B T_K = D e^{-1,22 \cdot \frac{1}{2Jr}} \quad (5.39)$$

kommt.

Yosida und Yoshimori geben 1973 [YY] folgenden Wert, den sie mit der Näherung der am stärksten divergierenden Beiträge ermittelt haben, sowie Tsvetick und Wiegmann 1983 [Hew] denselben Wert, der sich aus dem Bethe-Ansatz ableitet, an:

$$k_B T_K = D e^{-\frac{1}{2Jr}} . \quad (5.40)$$

Thimmel [Thim] konnte aus Selbstkonsistenzüberlegungen einen Wert von

$$k_B T_K = \frac{1}{3} D e^{-\frac{0,50}{2Jr}} \quad (5.41)$$

angeben.

6. Die Flußgleichungen und der Grundzustand des Zwei-Kanal-Kondo-Modells

Nachdem wir in den letzten beiden Kapiteln die Flußgleichungen und den Grundzustand des Ein-Kanal-Kondo-Systemes betrachtet haben, möchten wir in diesem Kapitel eine analoge Betrachtung für das Zwei-Kanal-Kondo-Modell anstrengen.

Wie bereits erwähnt, wurde dieses Modell 1980 zuerst von Nozières und Blandin [Noz80] eingeführt. Sie gestanden dem Ein-Kanal-Kondo-Modell zwar erhebliche Bedeutung als einfaches Modell zum Testen neuer Methoden zu, bemängelten aber die fehlende experimentelle Überprüfbarkeit der so erhaltenen Ergebnisse gerade wegen der zu starken Vereinfachungen.

Nozières und Blandin bezogen die Orbitalstruktur der Störstelle, ein Kristallfeld und die Spin-Bahn-Kopplung in ihre Rechnungen ein. Besondere Bedeutung gewinnt in ihrer Betrachtung der Fall, daß die Anzahl der Kanäle n größer ist als das Doppelte des Störstellenspins S , d.h. $n > 2S$. Für $T \rightarrow 0$ K wird der Störstellenspin überkompensiert, so daß eine antiferromagnetische Wechselwirkung mit den Leitungselektronen verbleibt. Dies führt zu einem kritischen Verhalten für $T \rightarrow 0$ (und $H \rightarrow 0$). Berechnungen von Tsvelick und Wiegmann 1984 [Tsv], Andrei und Destri 1984 [AnDe], Sacramento und Schlottmann 1989 [Sac89] und 1991 [Sac91] sowie von Ludwig und Affleck 1991 [Lud] mittels Bethe-Ansatzes, konformer Feldtheorie bzw. numerischer Renormierung ergaben zum einen das Bild des Grundzustandes mit einem Singulett-Zustand je Kanal, zum anderen aber auch das kritische (Nicht-Fermi-Flüssigkeits-) Verhalten im Bereich $0K < T < T_K$.

Als Beispiel eines Bezuges auf experimentelle Daten hat Seaman 1991 [Sea] das Verhalten von $Y_{1-x}U_xPd_3$ mit dem Zwei-Kanal-Kondo-Modell untersucht. Cichork et al. lieferten 2005 mit der Untersuchung des Nicht-Fermi-Flüssigkeitsverhaltens in $ThAsSe$ [Cich] ein aktuelleres Beispiel, bei welchem mit Hilfe des Zwei-Kanal-Kondo-Modells experimentelle Befunde gedeutet werden konnten. Hierbei wird das Zwei-Kanal-Kondo-Modell durch eine Wechselwirkung zwischen den Leitungselektronen und Zwei-Niveau-Systemen (TLS) realisiert. Eine Einschränkung hinsichtlich der Anwendbarkeit auf reale Proben besteht indessen in der selten vorliegenden Entartung der Leitungsbänder.

Wir möchten in diesem Kapitel zeigen, daß der Grundzustand des Zwei-Kanal-Kondo-Modells bei der Temperatur $T = 0$ um eine der Kondo-Temperatur T_K entsprechende Energie abgesenkt ist. Dazu transformieren wir den Hamilton-Operator

mittels des Flußgleichungsverfahrens so, daß die quasi-teilchenzahlverletzenden Prozesse eliminiert werden. Danach verwenden wir einen analogen Ansatz wie beim Ein-Kanal-Kondo-Modell, erhalten indessen Gleichungen, die wir nicht analytisch lösen konnten. Numerische Rechnungen bestätigen jedoch eine exponentiell kleine Absenkung des Grundzustandes gegenüber der Fermi-Energie.

6.1 Die Flußgleichungen und deren Lösungen

Wir verwenden als Hamilton-Operator wieder in Normalordnung

$$\begin{aligned}
 H = & E_0 + \sum_{k,\alpha,e} \epsilon_k : c_{k\alpha e}^\dagger c_{k\alpha e} : + \sum_{k,p,\alpha,\beta,e} J_{kp} : c_{k\alpha e}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{p\beta e} : \vec{\tau} + \sum_{k,p,\alpha,e} V_{kp} : c_{k\alpha e}^\dagger c_{p\alpha e} : \\
 & + \sum_{\substack{k,p,\alpha,\beta,e \\ k',p',\alpha',\beta',e'}} \sum_{l,m,n} Z_{kp k' p'} \epsilon_{lmn} : c_{k\alpha e}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^l c_{p\beta e} c_{k'\alpha'e'}^\dagger \sigma_{\alpha'\beta'}^m c_{p'\beta'e'} : \tau^n \quad (6.1)
 \end{aligned}$$

In dieser Setzung bezeichnet wie schon beim Ein-Kanal-Kondo-Modell E_0 die Grundzustandsenergie (wegen Einführung der Normalordnung), J_{kp} ist die Stärke der Spin-Spin-Wechselwirkung (wieder sei $J_{kp} > 0$ für eine antiferromagnetische Wechselwirkung), V_{kp} ist die Stärke der Potentialstreuung und $Z_{kp k' p'}$ beschreibt die Stärke der Zwei-Teilchen-Wechselwirkung. e kennzeichnet den Kanalindex und nimmt die Werte 1 und 2 an, eine direkte Wechselwirkung zwischen den beiden entarteten Kanälen existiert nicht. Insofern ähnelt der Hamilton-Operator auf den ersten Blick demjenigen des Ein-Kanal-Kondo-Modells. Die Kopplungskonstanten entsprechen sich jeweils. Allein, die Tatsache, daß ein zweites, entartetes Leitungsband, welches mit dem ersten Band nicht wechselwirkt, hinzugefügt wird, führt zu einem neuen physikalischen Verhalten bei endlichen Temperaturen. Wir werden sehen, daß sich bei $T = 0$ die beiden Bänder gleich verhalten und damit zu einer Überkompensierung des Störstellenspins führen, so daß nach außen ein neuer lokalisierter Spin auftritt. Deshalb hat im Gegensatz zum Ein-Kanal-Kondo-Modell die Abschirm- oder Kondo-Kohärenzlänge ξ_K auch keinen endlichen Wert.

Entsprechend unserer Vorgehensweise beim Ein-Kanal-Kondo-Modell im vorhergehenden Kapitel eliminieren wir wieder diejenigen Prozesse, die die Quasi-Teilchenzahl verletzen. Wir setzen Fermi-Energie und Fermi-Impuls gleich Null und erhalten für die Erzeugende η :

$$\begin{aligned}
 \eta = & \sum_{k,p,\alpha,\beta,e} \eta_{kp}^1 : c_{k\alpha e}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{p\beta e} : \vec{\tau} + \sum_{k,p,\alpha,e} \eta_{kp}^2 : c_{k\alpha e}^\dagger c_{p\alpha e} : \\
 & + \sum_{\substack{k,p,k',p' \\ \alpha,\beta,\alpha',\beta' \\ e,e'}} \eta_{kp k' p'}^3 \sum_{l,m,n} \epsilon_{lmn} : c_{k\alpha e}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^l c_{p\beta e} c_{k'\alpha'e'}^\dagger \sigma_{\alpha'\beta'}^m c_{p'\beta'e'} : \tau^n \quad (6.2)
 \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
\eta_{kp}^1 &= (\epsilon_k - \epsilon_p) J_{kp} f_{kp} \\
&\quad + (f_p - f_k) \sum_q (1 - 2f_q) (2J_{kq} J_{qp} (2f_q - 1) + V_{kq} J_{qp} + J_{kq} V_{qp}) \\
\eta_{kp}^2 &= (\epsilon_k - \epsilon_p) V_{kp} f_{kp} + (f_p - f_k) \sum_q (1 - 2f_q) (3J_{kq} J_{qp} + V_{kq} V_{qp}) \\
\eta_{kp k' p'}^3 &= \frac{1}{2} J_{kp} J_{k' p'} (f_{kp} - f_{k' p'}) + (\epsilon_k - \epsilon_p + \epsilon_{k'} - \epsilon_{p'}) Z_{kp k' p'} f_{kp k' p'} \quad (6.3)
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
f_{kp} &= f_k + f_p - 2f_k f_p \\
f_{kp k' p'} &= (f_{kp} - f_{k' p'})^2 + f_k (1 - f_p) f_{k'} (1 - f_{p'}) + f_p (1 - f_k) f_{p'} (1 - f_{k'}) \quad (6.4)
\end{aligned}$$

Damit erhalten wir die folgenden Flußgleichungen für J_{kp} , V_{kp} und $Z_{kp k' p'}$:

$$\begin{aligned}
\frac{dJ_{kp}}{dl} &= -(\epsilon_k - \epsilon_p) \eta_{kp}^1 + 2 \sum_q (2f_q - 1) (\eta_{kq}^1 J_{qp} - J_{kq} \eta_{qp}^1) \\
&\quad + \sum_q (\eta_{kq}^2 J_{qp} - J_{kq} \eta_{qp}^2 + \eta_{kq}^1 V_{qp} - V_{kq} \eta_{qp}^1) \quad (6.5)
\end{aligned}$$

$$\frac{dV_{kp}}{dl} = -(\epsilon_k - \epsilon_p) \eta_{kp}^2 + 3 \sum_q (\eta_{kq}^1 J_{qp} - J_{kq} \eta_{qp}^1) + \sum_q (\eta_{kq}^2 V_{qp} - V_{kq} \eta_{qp}^2) \quad (6.6)$$

$$\frac{dZ_{kp k' p'}}{dl} = -(\epsilon_k - \epsilon_p + \epsilon_{k'} - \epsilon_{p'}) \eta_{kp k' p'}^3 + \frac{1}{2} (\eta_{k' p'}^1 J_{kp} - J_{k' p'} \eta_{kp}^1) \quad (6.7)$$

In die letzte Flußgleichung für $Z_{kp k' p'}$ setzen wir zwecks besserer Übersicht die in den Gleichungen (6.3) angegebenen Werte für η ein und erhalten:

$$\begin{aligned}
\frac{dZ_{kp k' p'}}{dl} &= -(\epsilon_k - \epsilon_p + \epsilon_{k'} - \epsilon_{p'})^2 f_{kp k' p'} Z_{kp k' p'} \\
&\quad - \frac{1}{2} J_{kp} J_{k' p'} ((\epsilon_k - \epsilon_p) (2f_{kp} - f_{k' p'}) - (\epsilon_{k'} - \epsilon_{p'}) (2f_{k' p'} - f_{kp})) \quad (6.8)
\end{aligned}$$

Wir entwickeln und integrieren die Flußgleichungen und erhalten folgende Ergebnisse:

$k > 0, p > 0$:

$$J_{kp}(\infty) = \frac{J}{N} \left(1 + Jr \ln \frac{(D + \epsilon_k)^2 + (D + \epsilon_p)^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_p^2} \right) \quad (6.9)$$

$$V_{kp}(\infty) = \frac{3J}{2N} Jr \ln \frac{(D + \epsilon_k)^2 + (D + \epsilon_p)^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_p^2}, \quad (6.10)$$

und

Fall 1: $k < 0, p > 0, k' > 0, p' < 0$ oder $k > 0, p < 0, k' < 0, p' > 0$

$$Z_{kpk'p'}(\infty) = -\frac{1}{2} \frac{J^2}{N^2} \frac{(\epsilon_k - \epsilon_p) - (\epsilon_{k'} - \epsilon_{p'})}{(\epsilon_k - \epsilon_p)^2 + (\epsilon_{k'} - \epsilon_{p'})^2} \quad (6.11)$$

Fall 2: sonst

$$Z_{kpk'p'}(\infty) = 0 \quad (6.12)$$

6.2 Der Grundzustand

6.2.1 Klassifizierung der Zustände

Wir verwenden einen Ansatz, bei dem wir zum gefüllten Fermisee in jeden Kanal ein Elektron hinzufügen. In voller Allgemeinheit lautet diese Wellenfunktion

$$\begin{aligned}
\psi = \sum_{k_1, k_2, b_1, b_2} \{ & \Gamma^{\uparrow\uparrow\uparrow}(k_1, k_2, b_1, b_2) c_{k_1\uparrow b_1}^\dagger c_{k_2\uparrow b_2}^\dagger \psi_v \alpha \\
& + \Gamma^{\downarrow\uparrow\uparrow}(k_1, k_2, b_1, b_2) c_{k_1\downarrow b_1}^\dagger c_{k_2\uparrow b_2}^\dagger \psi_v \alpha \\
& + \Gamma^{\uparrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2, b_1, b_2) c_{k_1\uparrow b_1}^\dagger c_{k_2\downarrow b_2}^\dagger \psi_v \alpha \\
& + \Gamma^{\uparrow\uparrow\downarrow}(k_1, k_2, b_1, b_2) c_{k_1\uparrow b_1}^\dagger c_{k_2\uparrow b_2}^\dagger \psi_v \beta \\
& + \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2, b_1, b_2) c_{k_1\downarrow b_1}^\dagger c_{k_2\downarrow b_2}^\dagger \psi_v \alpha \\
& + \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k_2, b_1, b_2) c_{k_1\downarrow b_1}^\dagger c_{k_2\uparrow b_2}^\dagger \psi_v \beta \\
& + \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2, b_1, b_2) c_{k_1\uparrow b_1}^\dagger c_{k_2\downarrow b_2}^\dagger \psi_v \beta \\
& + \Gamma^{\downarrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2, b_1, b_2) c_{k_1\downarrow b_1}^\dagger c_{k_2\downarrow b_2}^\dagger \psi_v \beta \} \quad (6.13)
\end{aligned}$$

Hierbei bedeuten die $\Gamma^{\mu\nu\xi}(k_1, k_2, b_1, b_2)$ die Entwicklungskoeffizienten und ψ_v der Fermisee. Außerdem haben wir wieder die Eigenfunktionen des Störstellenspins, dessen Quantenzahl als $t = 1/2$ angenommen wird, α für $t_z = +1/2$ und β für $t_z = -1/2$. Die acht Summanden der Wellenfunktion lassen sich hinsichtlich ihres Gesamtspines, der die Werte $\frac{3}{2}$ oder $\frac{1}{2}$ annehmen kann, und hinsichtlich der z -Komponente des Spines mit den möglichen Werten $+\frac{3}{2}$, $+\frac{1}{2}$, $-\frac{1}{2}$ und $-\frac{3}{2}$ ordnen. Die Indizes b_1 und b_2 kennzeichnen den Kanal.

Weiterhin unterstellen wir, dass gilt:

$$\Gamma^{\mu\nu\xi}(k_1, k_2, b_1, b_2) = \Gamma(b_1, b_2) \cdot \Gamma^{\mu\nu\xi}(k_1, k_2) \quad (6.14)$$

Damit lassen sich diese Wellenfunktionen in Zustände mit einer Band-Symmetrie, d.h. mit $\Gamma(b_1, b_2) = \Gamma(b_2, b_1)$, und Zustände mit einer Band-Antisymmetrie mit $\Gamma(b_1, b_2) = -\Gamma(b_2, b_1)$ diskriminieren.

Verwenden wir die Quantenzahlen Q für die Anzahl der hinzugefügten Elektronen (gleichsam die Ladung in Einheiten der Elektronenladung), s für den Eigenwert des Gesamtspins und s_z für den Wert der z -Komponente des Gesamtspins, so lassen sich folgende Zustände mit den Indizes (Q, s, s_z) klassifizieren:

$$\psi_{(2, \frac{3}{2}, \frac{3}{2})} = \sum_{k_1, k_2, b_1, b_2} \Gamma(b_1, b_2) \Gamma^{\uparrow\uparrow\uparrow}(k_1, k_2) c_{k_1\uparrow b_1}^\dagger c_{k_2\uparrow b_2}^\dagger \psi_v \alpha$$

$$\psi_{(2, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})} = \sum_{k_1, k_2, b_1, b_2} \Gamma(b_1, b_2) \Gamma^\uparrow(k_1, k_2) (c_{k_1\downarrow b_1}^\dagger c_{k_2\uparrow b_2}^\dagger \psi_v \alpha + c_{k_1\uparrow b_1}^\dagger c_{k_2\downarrow b_2}^\dagger \psi_v \alpha + c_{k_1\uparrow b_1}^\dagger c_{k_2\uparrow b_2}^\dagger \psi_v \beta)$$

$$\psi_{(2, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2})} = \sum_{k_1, k_2, b_1, b_2} \Gamma(b_1, b_2) \Gamma^\downarrow(k_1, k_2) (c_{k_1\downarrow b_1}^\dagger c_{k_2\downarrow b_2}^\dagger \psi_v \alpha + c_{k_1\downarrow b_1}^\dagger c_{k_2\uparrow b_2}^\dagger \psi_v \beta + c_{k_1\uparrow b_1}^\dagger c_{k_2\downarrow b_2}^\dagger \psi_v \beta)$$

$$\psi_{(2, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2})} = \sum_{k_1, k_2, b_1, b_2} \Gamma(b_1, b_2) \Gamma^{\downarrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) c_{k_1\downarrow b_1}^\dagger c_{k_2\downarrow b_2}^\dagger \psi_v \beta$$

$$\begin{aligned} \psi_{(2, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})} = \sum_{k_1, k_2, b_1, b_2} \Gamma(b_1, b_2) \left\{ \right. & \Gamma^{\downarrow\uparrow\uparrow}(k_1, k_2) c_{k_1\downarrow b_1}^\dagger c_{k_2\uparrow b_2}^\dagger \psi_v \alpha \\ & + \Gamma^{\uparrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) c_{k_1\uparrow b_1}^\dagger c_{k_2\downarrow b_2}^\dagger \psi_v \alpha \\ & \left. + \Gamma^{\uparrow\uparrow\downarrow}(k_1, k_2) c_{k_1\uparrow b_1}^\dagger c_{k_2\uparrow b_2}^\dagger \psi_v \beta \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \psi_{(2, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2})} = \sum_{k_1, k_2, b_1, b_2} \Gamma(b_1, b_2) \left\{ \right. & \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) c_{k_1\uparrow b_1}^\dagger c_{k_2\downarrow b_2}^\dagger \psi_v \beta \\ & + \Gamma^{\downarrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) c_{k_1\downarrow b_1}^\dagger c_{k_2\uparrow b_2}^\dagger \psi_v \beta \\ & \left. + \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) c_{k_1\downarrow b_1}^\dagger c_{k_2\downarrow b_2}^\dagger \psi_v \alpha \right\} \end{aligned}$$

Wir werden in der weiteren Berechnung diese Zustände untersuchen, wobei wir nur Zustände mit einer Band-Antisymmetrie betrachten. Im Falle einer Band-Symmetrie kann man durch eine Transformation der Form $\sum c_{k_s b_1}^\dagger c_{k_s b_2}$ das Zwei-Kanal-Modell auf das Ein-Kanal-Modell abbilden.

6.2.2 Untersuchung des Zustandes $(2, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$

Wir beginnen unsere Untersuchung willkürlich mit dem Zustand $(2, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$ in der Erwartung, dass der Grundzustand ebenfalls den Wert $s = \frac{1}{2}$ annehmen wird und dabei entartet ist. Somit lautet unser vereinfachter Ansatz:

$$\begin{aligned} \psi = \sum_{k_1, k_2, b_1, b_2} \Gamma(b_1, b_2) \cdot \left\{ \begin{aligned} & \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) c_{k_1\uparrow b_1}^\dagger c_{k_2\downarrow b_2}^\dagger \psi_v \beta \\ & + \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k_2) c_{k_1\downarrow b_1}^\dagger c_{k_2\uparrow b_2}^\dagger \psi_v \beta \\ & + \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) c_{k_1\downarrow b_1}^\dagger c_{k_2\downarrow b_2}^\dagger \psi_v \alpha \end{aligned} \right\} \quad (6.15) \end{aligned}$$

Unter gleichzeitiger Vertauschung von k_1 und k_2 sowie b_1 und b_2 erhalten wir unter Berücksichtigung der Band-Antisymmetrie, d.h. $\Gamma(b_1, b_2) = -\Gamma(b_2, b_1)$,

$$\begin{aligned} \psi &= \sum_{k_1, k_2, b_1, b_2} \Gamma(b_2, b_1) \cdot \left\{ \begin{aligned} & \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_2, k_1) c_{k_2\uparrow b_2}^\dagger c_{k_1\downarrow b_1}^\dagger \psi_v \beta \\ & + \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_2, k_1) c_{k_2\downarrow b_2}^\dagger c_{k_1\uparrow b_1}^\dagger \psi_v \beta \\ & + \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_2, k_1) c_{k_2\downarrow b_2}^\dagger c_{k_1\downarrow b_1}^\dagger \psi_v \alpha \end{aligned} \right\} \\ &= \sum_{k_1, k_2, b_1, b_2} \Gamma(b_1, b_2) \cdot \left\{ \begin{aligned} & \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) c_{k_1\uparrow b_1}^\dagger c_{k_2\downarrow b_2}^\dagger \psi_v \beta \\ & + \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k_2) c_{k_1\downarrow b_1}^\dagger c_{k_2\uparrow b_2}^\dagger \psi_v \beta \\ & + \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) c_{k_1\downarrow b_1}^\dagger c_{k_2\downarrow b_2}^\dagger \psi_v \alpha \end{aligned} \right\} \quad (6.16) \end{aligned}$$

und daraus die Beziehungen

$$\Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) = \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_2, k_1) \quad \text{und} \quad \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) = \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_2, k_1) \quad (6.17)$$

Eine weitere Gleichung erhalten wir, wenn wir den Operator des Gesamtspines Σ^2 auf die Wellenfunktion anwenden, die Eigenfunktion zum Wert $s \cdot (s + 1) = \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} = \frac{3}{4}$ ist. Daraus folgt die Beziehung

$$\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) + \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) + \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k_2) = 0 \quad (6.18)$$

Wir setzen diesen Ansatz in die zeitunabhängige Schrödingergleichung $H\psi = E\psi$ ein und erhalten durch Koeffizientenvergleich folgende drei Gleichungen:

$$\begin{aligned}
 (\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) &= \sum_k \left((J_{k_1k} - V_{k_1k}) \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) + (J_{kk_2} - V_{kk_2}) \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k) \right. \\
 &\quad \left. - 2 \cdot J_{k_1k} \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2) - 2 \cdot J_{kk_2} \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k) \right) \quad (6.19)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) &= \sum_k \left(-2 \cdot J_{k_1k} \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) + (J_{k_1k} - V_{k_1k}) \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2) \right. \\
 &\quad \left. - (J_{kk_2} + V_{kk_2}) \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k) \right) \quad (6.20)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k_2) &= \sum_k \left(-2 \cdot J_{kk_2} \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k) + (J_{kk_2} - V_{kk_2}) \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k) \right. \\
 &\quad \left. - (J_{k_1k} + V_{k_1k}) \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k, k_2) \right) \quad (6.21)
 \end{aligned}$$

Diese Gleichungen konnten wir in Ordnung J^2 nicht lösen, siehe dazu Anhang D.

Wir lösen die Gleichungen (6.19) bis (6.21) in Ordnung J und setzen folgende Werte ein:

$$J_{kp} = \frac{J}{N} \quad \text{und} \quad V_{kp} = 0 \quad (6.22)$$

Damit vereinfachen sich diese Gleichungen zu:

$$\begin{aligned}
 (\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) &= \frac{J}{N} \cdot \sum_k \left(\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) + \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k) \right. \\
 &\quad \left. - 2 \cdot \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2) - 2 \cdot \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k) \right) \quad (6.23)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) &= -\frac{J}{N} \cdot \sum_k \left(2 \cdot \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) \right. \\
 &\quad \left. - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2) + \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k) \right) \quad (6.24)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k_2) &= -\frac{J}{N} \cdot \sum_k \left(2 \cdot \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k) \right. \\
 &\quad \left. - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k) + \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k, k_2) \right) \quad (6.25)
 \end{aligned}$$

Wir setzen nun

$$\frac{1}{N} \sum_k \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) =: \gamma_1(k_2) \quad (6.26)$$

$$\frac{1}{N} \sum_k \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k) =: \gamma_1(k_1) \quad (6.27)$$

$$\frac{1}{N} \sum_k \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k) =: \gamma_2(k_1) \quad (6.28)$$

$$\frac{1}{N} \sum_k \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2) =: \gamma_3(k_2) , \quad (6.29)$$

so daß hiermit auch gilt:

$$\frac{1}{N} \sum_k \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k) = \frac{1}{N} \sum_k \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_1) = \gamma_3(k_1) \quad (6.30)$$

Mit diesen neu definierten Größen lassen sich Gleichungen (6.23) bis (6.25) folgendermaßen schreiben:

$$(\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) = J \cdot (\gamma_1(k_2) + \gamma_1(k_1) - 2\gamma_3(k_2) - 2\gamma_3(k_1)) \quad (6.31)$$

$$(\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) = -J \cdot (2\gamma_1(k_2) - \gamma_3(k_2) + \gamma_2(k_1)) \quad (6.32)$$

$$(\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) = -J \cdot (2\gamma_1(k_1) - \gamma_3(k_1) + \gamma_2(k_2)) \quad (6.33)$$

Diese wiederum lassen sich mit den Definitionen (6.26) bis (6.29) verknüpfen:

$$\gamma_1(k_2) = \frac{1}{N} \sum_k \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) = \frac{J}{N} \cdot \sum_k \frac{\gamma_1(k_2) + \gamma_1(k) - 2\gamma_3(k_2) - 2\gamma_3(k)}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E} \quad (6.34)$$

$$\gamma_2(k_2) = \frac{1}{N} \sum_k \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_2, k) = -\frac{J}{N} \cdot \sum_k \frac{2\gamma_1(k) - \gamma_3(k) + \gamma_2(k_2)}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E} \quad (6.35)$$

$$\gamma_3(k_2) = \frac{1}{N} \sum_k \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2) = -\frac{J}{N} \cdot \sum_k \frac{2\gamma_1(k_2) - \gamma_3(k_2) + \gamma_2(k)}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E} \quad (6.36)$$

Aus Gleichung (6.18) folgt außerdem:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_k \left(\Gamma^{\uparrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) + \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2) + \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_2, k) \right) \\ = \gamma_1(k_2) + \gamma_2(k_2) + \gamma_3(k_2) = 0 \end{aligned} \quad (6.37)$$

Damit können wir (6.35) und (6.36) auch schreiben als:

$$\gamma_2(k_2) = \frac{J}{N} \cdot \sum_k \frac{2\gamma_2(k) + 3\gamma_3(k) - \gamma_2(k_2)}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E} \quad (6.38)$$

$$\gamma_3(k_2) = \frac{J}{N} \cdot \sum_k \frac{2\gamma_2(k_2) + 3\gamma_3(k_2) - \gamma_2(k)}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E} \quad (6.39)$$

Diese beiden Gleichungen lassen sich vektoriell darstellen:

$$\gamma_i(k_1) = Jf(\epsilon_{k_1} - E) \cdot \sum_j F_{ij} \gamma_j(k_1) + \frac{J}{N} \sum_{j,k} \frac{1}{\epsilon_k + \epsilon_{k_1} - E} G_{ij} \gamma_j(k) \quad (6.40)$$

wobei wir setzen

$$f(x) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{\epsilon_k + x} \quad (6.41)$$

und

$$F = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (6.42)$$

Nach einer nicht orthogonalen Ähnlichkeits-Transformation L erhalten wir:

$$L\gamma(k_1) = Jf(\epsilon_{k_1} - E)LF\gamma(k_1) + \frac{J}{N} \sum_k \frac{1}{\epsilon_k + \epsilon_{k_1} - E} LG\gamma(k). \quad (6.43)$$

Wir definieren

$$L\gamma =: \hat{\gamma}, \quad (6.44)$$

so daß $LF\gamma = LFL^{-1}\hat{\gamma}$, $LG\gamma = LGL^{-1}\hat{\gamma}$ folgt, und gewinnen

$$\hat{\gamma}(k_1) = Jf(\epsilon_{k_1} - E)LFL^{-1}\hat{\gamma}(k_1) + \frac{J}{N} \sum_k \frac{1}{\epsilon_k + \epsilon_{k_1} - E} LGL^{-1}\hat{\gamma}(k). \quad (6.45)$$

L kann so gewählt werden, daß LFL^{-1} und LGL^{-1} beide hermitesch werden. Das gelingt mit

$$L = \begin{pmatrix} a & a-b \\ b & a+b \end{pmatrix}, \quad L^{-1} = \frac{1}{a^2 + b^2} \begin{pmatrix} a+b & b-a \\ -b & a \end{pmatrix} \quad (6.46)$$

Man erhält dann

$$LFL^{-1} = \frac{1}{a^2 + b^2} \begin{pmatrix} a^2 - 4ab + b^2 & 2(a^2 - b^2) \\ 2(a^2 - b^2) & a^2 + 4ab + b^2 \end{pmatrix}, \quad (6.47)$$

$$LGL^{-1} = \frac{1}{a^2 + b^2} \begin{pmatrix} 2a^2 - b^2 & 3ab \\ 3ab & 2b^2 - a^2 \end{pmatrix}. \quad (6.48)$$

Damit hat man ein Eigenwertproblem für eine hermitesche Matrix. Wir werden im folgenden für verschiedene vorgegebene Energien E das zugehörige J numerisch mit einem Pascal-Programm berechnen lassen.

Dazu treffen wir die Wahl $a = b = 1$ und erhalten die Gleichungen

$$\hat{\gamma}(k_1) = Jf(\epsilon_{k_1} - E)LFL^{-1}\hat{\gamma}(k_1) + \frac{J}{N} \sum_k \frac{1}{\epsilon_k + \epsilon_{k_1} - E} LGL^{-1}\hat{\gamma}(k) \quad (6.49)$$

mit

$$LFL^{-1} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad LGL^{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 3 & 1 \end{pmatrix}. \quad (6.50)$$

Das verwendete Pascal-Programm ist im Anhang F angegeben.

Wie in nachfolgender Tabelle wiedergegeben ist, haben wir verschiedene Energien E - zwecks besserer Übersichtlichkeit als $\log|E|$ - vorgegeben und je einen Wert $\frac{1}{J}$ erhalten. Es bestätigt sich ein exponentieller Zusammenhang der Form

$$E \sim e^{-\frac{k}{J}} \quad (6.51)$$

mit den in der Tabelle angegebenen Werten k .

$\log E $	$\frac{1}{J}$	k
-1	7,1940	3,12433
-2	13,845	3,00649
-3	20,726	3,00041
-4	27,631	3,00000
-5	34,539	2,99999
-6	41,446	2,99998
-7	48,354	2,99998
-8	55,262	2,99999
-9	62,169	2,99999
-10	69,078	3,00000
-11	75,985	3,00000
-15	103,615	2,99999
-17	117,432	2,99999
-21	145,062	2,99999

Der Wert für k kann über einen weiten Bereich als konstant mit dem Wert 3 angesehen werden. Verwendet man ferner für die Zustandsdichte r den Wert $r = \frac{1}{2}$ und für die halbe Bandbreite $D = 1$, so läßt sich die Energie schreiben als

$$|E| = D \cdot e^{-\frac{3}{2Jr}} \quad (6.52)$$

Die Energie des von uns betrachteten Zustandes weist demnach eine exponentielle Abhängigkeit von der Kopplungsstärke J auf, entsprechend dem Ein-Kanal-Kondo-Modell.

6.2.3 Untersuchung des Zustandes $(2, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2})$

Wir möchten zum Vergleich auch den Zustand mit den Quantenzahlen $(2, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2})$ betrachten und die zugehörige Energie E in erster Ordnung J berechnen.

Es sei wieder $J_{kp} = \frac{J}{N}$.

Hierzu verwenden wir die Wellenfunktion

$$\psi_{(2, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2})} = \sum_{k_1, k_2, b_1, b_2} \Gamma(b_1, b_2) \cdot \Gamma^{\downarrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) c_{k_1 \downarrow b_1}^\dagger c_{k_2 \downarrow b_2}^\dagger \psi_{\nu\beta} \quad (6.53)$$

Es kann leicht nachgerechnet werden, daß hinsichtlich des Gesamtspins gilt:

$$\Sigma^2 \psi_{(2, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2})} = \frac{15}{4} \psi_{(2, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2})} \quad (6.54)$$

Die Schrödingergleichung $H\psi_{(2, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2})} = E\psi_{(2, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2})}$ liefert

$$(\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) \Gamma^{\downarrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) + \frac{J}{N} \cdot \sum_k \left(\Gamma^{\downarrow\downarrow\downarrow}(k_1, k) + \Gamma^{\downarrow\downarrow\downarrow}(k, k_2) \right) = 0 \quad (6.55)$$

Wir unterstellen $\Gamma^{\downarrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) = \Gamma(k_1) \cdot \Gamma(k_2)$ sowie $E = E_1 + E_2$. Damit erhalten wir

$$(\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E_1 - E_2) \Gamma(k_1) \cdot \Gamma(k_2) + \frac{J}{N} \cdot \left(\Gamma(k_1) + \Gamma(k_2) \right) \sum_k \Gamma(k) = 0 \quad (6.56)$$

oder

$$(\epsilon_{k_1} - E_1) + \frac{J}{N} \cdot \frac{\sum_k \Gamma(k)}{\Gamma(k_1)} + (\epsilon_{k_2} - E_2) + \frac{J}{N} \cdot \frac{\sum_k \Gamma(k)}{\Gamma(k_2)} = 0 \quad (6.57)$$

Da k_1 und k_2 unabhängig voneinander sind, muß gelten:

$$(\epsilon_{k_1} - E_1) + \frac{J}{N} \cdot \frac{\sum_k \Gamma(k)}{\Gamma(k_1)} = 0 \quad (6.58)$$

und

$$(\epsilon_{k_2} - E_2) + \frac{J}{N} \cdot \frac{\sum_k \Gamma(k)}{\Gamma(k_2)} = 0 \quad (6.59)$$

Daraus folgt offenbar $E_1 = E_2$ und

$$1 + \frac{J}{N} \cdot \sum_{k_1} \frac{1}{\epsilon_{k_1} - E_1} = 0 \quad (6.60)$$

und nach Ersetzen der Summation durch eine Integration

$$1 + Jr \int_0^D \frac{1}{\epsilon - E_1} d\epsilon = 0 \quad (6.61)$$

Wir erhalten als Lösungen

$$E_1 = E_2 = D \cdot \frac{1}{1 + e^{-\frac{1}{Jr}}} \approx D, \quad (6.62)$$

somit einen Wert erheblich größer als die Energie des zuvor betrachteten Zustandes.

6.2.4 Untersuchung der übrigen Zustände

Wir beginnen mit dem $s = \frac{3}{2}$ -Zustand $(2, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})$.

Aufgrund der Bedingung $\Sigma^2 \psi_{(2, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})} = \frac{3}{2} \cdot \frac{5}{2} \cdot \psi_{(2, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})} = \frac{15}{4} \cdot \psi_{(2, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})}$ gilt die Beziehung

$$\Gamma^{\downarrow\uparrow\uparrow}(k_1, k_2) = \Gamma^{\uparrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) = \Gamma^{\uparrow\uparrow\downarrow}(k_1, k_2), \quad (6.63)$$

so daß wir setzen konnten

$$\Gamma^{\downarrow\uparrow\uparrow}(k_1, k_2) = \Gamma^{\uparrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) = \Gamma^{\uparrow\uparrow\downarrow}(k_1, k_2) =: \Gamma^{\uparrow}(k_1, k_2). \quad (6.64)$$

Es folgt somit aus $H\psi_{(2, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})} = E\psi_{(2, \frac{3}{2}, \frac{1}{2})}$ die Gleichung

$$(\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) \Gamma^{\uparrow}(k_1, k_2) + \frac{J}{N} \cdot \sum_k \left(\Gamma^{\uparrow}(k_1, k) + \Gamma^{\uparrow}(k, k_2) \right) = 0 \quad (6.65)$$

und somit erneut Gleichung (6.55), woran wir erkennen:

Alle Zustände $(2, \frac{3}{2}, s_z)$ mit $s_z \in \{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\}$ sind entartet.

Der fehlende Zustand $(2, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ wird durch folgende Wellenfunktion beschrieben:

$$\begin{aligned} \psi_{(2, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})} = \sum_{k_1, k_2, b_1, b_2} \Gamma(b_1, b_2) \left\{ \begin{aligned} & \Gamma^{\downarrow\uparrow\uparrow}(k_1, k_2) c_{k_1\downarrow b_1}^\dagger c_{k_2\uparrow b_2}^\dagger \psi_v \alpha \\ & + \Gamma^{\uparrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) c_{k_1\uparrow b_1}^\dagger c_{k_2\downarrow b_2}^\dagger \psi_v \alpha \\ & + \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) c_{k_1\uparrow b_1}^\dagger c_{k_2\uparrow b_2}^\dagger \psi_v \beta \end{aligned} \right\} \quad (6.66) \end{aligned}$$

mit den (6.17) und (6.18) analogen Bedingungen

$$\Gamma^{\uparrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) = \Gamma^{\downarrow\uparrow\uparrow}(k_2, k_1) \quad \text{und} \quad \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) = \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_2, k_1) \quad (6.67)$$

$$\Gamma^{\uparrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) + \Gamma^{\downarrow\uparrow\uparrow}(k_1, k_2) + \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) = 0 \quad (6.68)$$

Es ergeben sich letztlich den Gleichungen (6.23) bis (6.25) entsprechende Beziehungen, so daß als Ergebnis folgt:

Der Zustand $(2, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ hat dieselbe Energie wie der zuvor untersuchte Zustand $(2, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$, die Zustände $(2, \frac{1}{2}, s_z)$ mit $s_z \in \{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\}$ sind demnach zweifach entartet.

6.2.5 Untersuchung anderer Ansätze

Den Resultaten beim Ein-Kanal-Kondo-Modell entsprechend, erhalten wir dieselben Ergebnisse wie eben, wenn wir anstelle zweier Elektronen zwei Löcher hinzufügen.

Ebenfalls haben wir untersucht, welche Gleichungen sich bei Betrachtung einer Teilchen-Loch-Anregung ergeben. Aufgrund der unter dem Fluß eliminierten Terme tragen die Zwei-Teilchen-Wechselwirkungen nur dann bei, wenn bei der Teilchen-Loch-Anregung das Quasi-Teilchen und das Loch denselben Kanalindex aufweisen. Dann findet eine Streuung der Anregung entweder in denselben oder aber in den anderen Kanal statt. Die sich ergebenden Gleichungen sind jedoch auch hier so kompliziert, dass sie nicht gelöst werden konnten.

Eine Darstellung findet sich in Anhang E.

6.2.6 Zusammenfassung

Wir können demnach zusammenfassend sagen, daß der Grundzustand des Zwei-Kanal-Kondo-Modells eine von der Kopplungsstärke J exponentiell abhängige Energieabsenkung aufweist und ein Eigenzustand zu den Werten (siehe 6.2.1) $Q = 2$, $s = \frac{1}{2}$, $s_z = \pm\frac{1}{2}$ ist. Dadurch wird das Bild bestätigt, daß die beiden je Kanal hinzugefügten Elektronen eine zum Ein-Kanal-Kondo-Modell analoge Bindung mit der Störstelle eingehen. Die zugehörige Energieabsenkung entspricht auch hier der Kondo-Temperatur. Trotzdem darf nicht übersehen werden, daß es durch die beiden Kanäle zu einer Überkompensierung der Spin-Abschirmung kommt, so daß weitere Wechselwirkungen mit den Leitungselektronen auftreten. Dies führt zu einer für Nicht-Fermi-Flüssigkeiten typischen Temperaturabhängigkeit von physikalischen Größen wie elektrische Leitfähigkeit, spezifische Wärmekapazität usw., die wir hier aber nicht betrachten, da wir nur den Fall $T = 0$ K untersuchen.

Außerdem konnte gezeigt werden, daß es zwei Zustände mit gleicher Grundzustandsenergie gibt, daß also der Grundzustand zweifach entartet ist.

Die Grundzustandsentropie sollte demnach $S(T = 0) = \ln 2$ betragen.

6.3 Die Entropie des Grundzustandes

In verschiedenen Untersuchungen [Gui], [AnDe] und [Sac89] ist man zu dem Ergebnis gelangt, daß die Entropie des Grundzustandes des Zwei-Kanal-Kondo-Modells laute

$$S(T = 0) = \frac{1}{2} \ln 2, \quad (6.69)$$

was der Anschauung widerspricht, daß doch die Grundzustandsentropie die Entartung des Grundzustandes, mithin eine natürliche Zahl, widerspiegelt. Hier wäre die Entartung allerdings $\sqrt{2}$.

Rozhkov [Roz] hat jedoch 1998 in Fortsetzung von [Lud94] gezeigt, daß die Reihenfolge der Grenzübergänge nicht vertauschbar ist (ebenso [Zar]):

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \lim_{T \rightarrow 0} S = \ln 2 \neq \lim_{T \rightarrow 0} \lim_{L \rightarrow \infty} S = \frac{1}{2} \ln 2. \quad (6.70)$$

Er schließt, daß es in endlichen Systemen keine gebrochenzahlige Entropie gibt, sondern die Entropie - entsprechend unserem Ergebnis - den Wert

$$S(T = 0) = \ln 2 \quad (6.71)$$

aufweist.

7. Zusammenfassung und Ausblick

Wir haben in der vorliegenden Arbeit das Ein-Kanal- und das Zwei-Kanal-Kondo-Modell in Hinblick auf die Energie des Grundzustandes untersucht und daraus die Kondo-Temperatur bestimmt. Als Methode wurde das Flußgleichungsverfahren gewählt. Hierbei ist die Entscheidung zu treffen, wie der Hamiltonoperator in einen Diagonal- und einen Restteil aufgeteilt wird. Wir haben versucht, die quasi-teilchenzahlverletzenden Terme zu eliminieren. Dieses Ziel ist auch erreicht worden, und wir haben nach der Transformation einen blockdiagonalen Hamiltonoperator erhalten, wobei die Blockgrenze im k -Raum der Fermi-Impuls ist.

In einem ersten Teil (Kapitel 4 und 5) haben wir für diesen Hamiltonoperator in einem modifizierten Variationsansatz den Grundzustand des Ein-Kanal-Kondo-Modelles und seine Energie berechnet. Dabei haben wir auch unter dem Fluß entstehende Zwei-Teilchen-Terme berücksichtigt, soweit sie bis zur Ordnung J^2 generiert werden. Damit sind wir über unsere Diplomarbeit hinausgegangen und haben die da gewonnenen Ergebnisse bestätigt und erweitert. Aus der Energie des Grundzustandes, die der Bindungsenergie des Singulett-Zustandes zwischen Störstelle und Leitungselektronen entspricht, läßt sich die Kondo-Temperatur ermitteln, wofür wir den Wert

$$k_B T_K = D e^{-0,58 \cdot \frac{1}{2Jr}}$$

erhalten haben, während in führender Ordnung der Wert

$$k_B T_K = D e^{-1,00 \cdot \frac{1}{2Jr}}$$

zu erwarten wäre.

Mit anderen Methoden wurden bisher ähnliche Werte erzielt:

Numerische Renormierung [Wil]

$$k_B T_K = D e^{-1,00 \cdot \frac{1}{2Jr} + \frac{1}{2} \ln |2Jr| + O(Jr)} ,$$

Variationsansatz [Yos] und [YY]

$$k_B T_K = D e^{-1,33 \cdot \frac{1}{2Jr}}$$

$$k_B T_K = D e^{-1,22 \cdot \frac{1}{2Jr}}$$

Bethe-Ansatz [Hew]

$$k_B T_K = D e^{-1,00 \cdot \frac{1}{2Jr}} .$$

Selbstkonsistenzüberlegungen [Thim]

$$k_B T_K = \frac{1}{3} D e^{-0,50 \cdot \frac{1}{2Jr}}$$

Wir haben somit mit relativ gutem Zahlenwert die exponentielle Abhängigkeit der Kondo-Temperatur von der Kopplungskonstanten J gezeigt.

Im Anschluß an diese Ergebnisse könnte beim Ein-Kanal-Kondo-Modell die Frage aufgeworfen werden, ob und wie sich das Ergebnis für die Grundzustandsenergie verändert, wenn höhere Ordnungen in J berücksichtigt werden. Eine Untersuchung meinerseits ergab jedoch eine schon in Ordnung J^3 überbordende Vielfalt von Termen, die analytisch nicht mehr bewältigt werden konnten. Ebenfalls deutlich komplexer wird die Untersuchung nach dem Hinzufügen von Drei-Teilchen-Wechselwirkungen, die unseres Erachtens auch keine wesentlichen Änderungen der Ergebnisse erwarten lassen.

In einem zweiten Teil (Kapitel 6) haben wir uns dem Zwei-Kanal-Kondo-Modell zugewandt, einer Erweiterung des Ein-Kanal-Kondo-Modelles um ein entartetes Leitungsband. Auch hier haben wir den Grundzustand untersucht, konnten die hergeleiteten Gleichungen aber nicht analytisch lösen. Numerische Berechnungen zeigten indessen auch hier dieselbe funktionale Abhängigkeit zwischen der Grundzustandsenergie E und der Kopplungskonstanten J wie beim Ein-Kanal-Kondo-Modell. Der numerische Zahlenwert ergab den Zusammenhang

$$k_B T_K = D e^{-3,00 \cdot \frac{1}{2Jr}}$$

Zum Vergleich gebe ich hier Ergebnisse an von

S. Florens [Flo] (Störungstheorie mit NCA, numerische Ergebnisse)

$$k_B T_K = D e^{-2,00 \cdot \frac{1}{2Jr}},$$

H.-U. Desgranges [Des] sowie Andrei und Destri [AnDe] als auch Tsvelick [Tsv85] (Bethe-Ansatz)

$$k_B T_K = D e^{-3,14 \cdot \frac{1}{2Jr}}$$

Andere Autoren geben bei der Untersuchung des Zwei-Kanal-Kondo-Modells vergleichbare Werte an, z.B. [Col] oder [Cox93].

Unser Ergebnis fügt sich also in die bisher mittels verschiedener Methoden erzielten Werte für die Kondo-Temperatur, somit auch für die Grundzustandsenergie, ein.

Beim Zwei-Kanal-Kondo-Modell konnte nur der Fall $T = 0$ K untersucht werden. Eine Erweiterung auf endliche Temperaturen scheint nahe zu liegen, kann jedoch vom derzeitigen Standpunkt aus nicht überblickt werden. Vor allem ist die Frage, inwiefern sich das Nicht-Fermi-Flüssigkeitsverhalten auswirkt, ungeklärt. Ob sich hier das Flußgleichungsverfahren anbietet, bleibt einer weiteren Untersuchung überlassen.

Anhang A. Zwei-Niveau-System

Als Erweiterung des in Kapitel 3 betrachteten Beispiels möchten wir hier ein System mit einem Elektron und einem Störstellenspin sowie zwei Elektronen-Energieniveaus betrachten.

Der Hamiltonoperator hat die Form

$$H = \sum_{k=1,\alpha}^2 \epsilon_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} + \sum_{k,p=1,\alpha}^2 J_{kp} c_{k\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{p\beta} \vec{\tau} . \quad (\text{A.1})$$

Wir legen die beiden Energieniveaus symmetrisch um Null, so daß die Energiewerte $\pm U$ betragen; außerdem setzen wir $J_{kp} = J$. Bei den Zuständen gehen wir von folgender Basis aus, welche wir klassifizieren durch |Niveau 1, Niveau 2, Störstelle):

$$\begin{aligned} &|\uparrow, 0, \uparrow\rangle \quad , \quad |0, \uparrow, \uparrow\rangle \\ &|\downarrow, 0, \uparrow\rangle \quad , \quad |0, \downarrow, \uparrow\rangle \\ &|\uparrow, 0, \downarrow\rangle \quad , \quad |0, \uparrow, \downarrow\rangle \\ &|\downarrow, 0, \downarrow\rangle \quad , \quad |0, \downarrow, \downarrow\rangle \end{aligned}$$

Damit hat der Hamiltonoperator die Gestalt

$$H = \begin{pmatrix} U+J & 0 & 0 & 0 & J & 0 & 0 & 0 \\ 0 & U-J & 2J & 0 & 0 & -J & 2J & 0 \\ 0 & 2J & U-J & 0 & 0 & 2J & -J & 0 \\ 0 & 0 & 0 & U+J & 0 & 0 & 0 & J \\ J & 0 & 0 & 0 & -U+J & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -J & 2J & 0 & 0 & -U-J & 2J & 0 \\ 0 & 2J & -J & 0 & 0 & 2J & -U-J & 0 \\ 0 & 0 & 0 & J & 0 & 0 & 0 & -U+J \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

Diese Matrix läßt sich diagonalisieren, wir erhalten näherungsweise für kleine J :

$$H = \begin{pmatrix} U+J & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & U+J & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & U+J & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & U-3J & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -U+J & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -U+J & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -U+J & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -U-3J \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

Dem kleinsten Eigenwert $-U - 3J$ ist der Eigenvektor

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|0, \downarrow, \uparrow\rangle - |0, \uparrow, \downarrow\rangle) \quad , \quad (\text{A.4})$$

also ein Singulett-Zustand, zugeordnet.

Gehen wir nach dem Flußgleichungsverfahren vor und eliminieren diejenigen Matrixelemente, die Niveau 1 mit Niveau 2 verknüpfen (analog unserem Vorgehen), dann erhalten wir für den Diagonalteil H^d

$$H^d = \begin{pmatrix} U+J & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & U-J & 2J & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2J & U-J & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & U+J & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -U+J & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -U-J & 2J & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2J & -U-J & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -U+J \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

und für den Restteil H^r

$$H^r = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & J & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -J & 2J & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2J & -J & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J \\ J & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -J & 2J & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2J & -J & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & J & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

Zur Vereinfachung arbeiten wir fürderhin mit Projektoren auf den Singulett- bzw. Triplett-Zustand. Diese sind definiert als

$$P_S := \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

für den Singulett-Projektor und

$$P_T := \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.8})$$

für den Triplett-Projektor.

Damit nimmt H^d folgende Form an:

$$H^d = \begin{pmatrix} a_S P_S + a_T P_T & 0 \\ 0 & b_S P_S + b_T P_T \end{pmatrix} \quad (\text{A.9})$$

sowie H^r :

$$H^r = \begin{pmatrix} 0 & c_S P_S + c_T P_T \\ c_S P_S + c_T P_T & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.10})$$

mit den Startwerten

$$\begin{aligned}
a_S(0) &= U - 3J & a_T(0) &= U + J \\
b_S(0) &= -U - 3J & b_T(0) &= -U + J \\
c_S(0) &= -3J & c_T(0) &= J .
\end{aligned} \tag{A.11}$$

Die Erzeugende ergibt sich aus $\eta = [H^d, H^r]$

$$\eta = \begin{pmatrix} 0 & (a_S - b_S)c_S P_S + (a_T - b_T)c_T P_T \\ -(a_S - b_S)c_S P_S - (a_T - b_T)c_T P_T & 0 \end{pmatrix} . \tag{A.12}$$

Mit dieser Erzeugenden gewinnen wir die Flußgleichungen aus $\frac{dH}{dl} = [\eta, H]$

$$\begin{aligned}
\frac{da_S}{dl} &= 2(a_S - b_S)c_S^2 & \frac{da_T}{dl} &= 2(a_T - b_T)c_T^2 \\
\frac{db_S}{dl} &= -2(a_S - b_S)c_S^2 & \frac{db_T}{dl} &= -2(a_T - b_T)c_T^2 \\
\frac{dc_S}{dl} &= -(a_S - b_S)^2 c_S & \frac{dc_T}{dl} &= -(a_T - b_T)^2 c_T .
\end{aligned} \tag{A.13}$$

Man stellt fest, daß die Gleichungen symmetrisch und ungekoppelt für Singulett- und Triplett-Anteile sind, so daß wir nur noch die Singulett-Ausdrücke betrachten. Ein Integral gewinnt man dadurch, daß man statt a_S, b_S die Summe $a_S + b_S$ bzw. Differenz $a_S - b_S$ betrachtet:

$$\begin{aligned}
\frac{d(a_S + b_S)}{dl} &= 0 \\
\frac{d(a_S - b_S)}{dl} &= 4(a_S - b_S)c_S^2 \\
\frac{dc_S}{dl} &= -(a_S - b_S)^2 c_S .
\end{aligned} \tag{A.14}$$

$a_S + b_S$ ist konstant und hat den Wert $a_S(0) + b_S(0)$.

Wir nehmen nun an, daß $J \ll U$, so daß wir die verbleibenden beiden Differentialgleichungen näherungsweise lösen können. Da in der Gleichung für $a_S - b_S$ das c_S quadratisch auftritt und $|c_S(0)| = 3J \ll 2U = (a_S - b_S)(0)$, können wir in erster Näherung $a_S - b_S = d_S = \text{const.}$ setzen.

Mit diesem Ergebnis lösen wir dann die Differentialgleichung für c_S , welche die Form

$$\frac{dc_S}{dl} = -d_S^2 c_S \quad (\text{A.15})$$

hat, so daß folgt:

$$c_S(l) = c_S(0) \cdot e^{-d_S^2 l} . \quad (\text{A.16})$$

Damit gewinnen wir die nächste Ordnung in der Gleichung für $a_S - b_S$:

$$\frac{d(a_S - b_S)}{dl} = 4(a_S - b_S)c_S^2(0)e^{-2d_S^2 l} \quad (\text{A.17})$$

mit der Lösung

$$(a_S - b_S)(l) = d_S \cdot \exp\left(2\frac{c_S^2(0)}{d_S^2} (1 - e^{-2d_S^2 l})\right) . \quad (\text{A.18})$$

Vollziehen wir schließlich den Grenzübergang $l \rightarrow \infty$, dann erhalten wir für die Koeffizienten

$$\begin{aligned} a_S - b_S &= (a_S - b_S)(0) + 2\frac{c_S^2(0)}{(a_S - b_S)(0)} \\ c_S &= 0 . \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Betrachten wir nun wieder die gesamte Matrix und setzen die Anfangswerte ein, dann erhalten wir in der 2.Ordnung für die transformierten Koeffizienten:

$$\begin{aligned} a_S(\infty) &= U - 3J + \frac{9J^2}{2U} & a_T(\infty) &= U + J + \frac{J^2}{2U} \\ b_S(\infty) &= -U - 3J - \frac{9J^2}{2U} & b_T(\infty) &= -U + J - \frac{J^2}{2U} \\ c_S(\infty) &= 0 & c_T(\infty) &= 0 , \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

so daß wir eine blockdiagonale Matrix der folgenden Gestalt erhalten:

$$\begin{aligned}
 & H(\infty) = \\
 & \left(\begin{array}{cccccccc}
 U + J + \frac{J^2}{2U} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & U - J + \frac{5J^2}{2U} & 2J - \frac{2J^2}{U} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 2J - \frac{2J^2}{U} & U - J + \frac{5J^2}{2U} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & U + J + \frac{J^2}{2U} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & -U + J - \frac{J^2}{2U} & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -U - J - \frac{5J^2}{2U} & 2J + \frac{2J^2}{U} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2J + \frac{2J^2}{U} & -U - J - \frac{5J^2}{2U} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -U + J - \frac{J^2}{2U}
 \end{array} \right)
 \end{aligned}
 \tag{A.21}$$

Anhang B. Faktorisiertbarkeit

In der Gleichung (5.10) verwenden wir, daß sich der Term

$$T_{kk'} = 2 + Jr \ln \frac{(D + \epsilon_k)^2 + (D + \epsilon_{k'})^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_{k'}^2} \quad (\text{B.1})$$

faktorisieren läßt, d.h. sich in der Form $h_k h_{k'}$ darstellen läßt. Diese Eigenschaft wird auch Separabilität genannt.

Betrachten wir die Näherung $T_{kk'} \approx \sqrt{T_{kk} T_{k'k'}} =: \hat{T}_{kk'}$, also

$$\hat{T}_{kk'} = \sqrt{2 + 2Jr \ln \frac{D + \epsilon_k}{\epsilon_k}} \cdot \sqrt{2 + 2Jr \ln \frac{D + \epsilon_{k'}}{\epsilon_{k'}}}. \quad (\text{B.2})$$

Für $\epsilon_k = \epsilon_{k'}$ ist der Ausdruck exakt, d.h. $T_{kk} = \hat{T}_{kk}$. Gilt $\epsilon_k \approx \epsilon_{k'} \ll D$, so folgt, wenn wir $\epsilon_k = \epsilon_{k'} + \delta$ setzen:

$$\left(\frac{T_{kk'}}{\hat{T}_{kk'}} \right)^2 \approx \frac{4 + 4Jr \ln \frac{D^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_k \delta + \delta^2/2} + J^2 r^2 \ln^2 \frac{D^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_k \delta + \delta^2/2}}{4 + 4Jr \ln \frac{D^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_k \delta} + J^2 r^2 \ln^2 \frac{D^2}{\epsilon_k^2}} \approx 1, \quad (\text{B.3})$$

solange $\delta \ll \epsilon_k$.

Gilt andererseits $\epsilon_{k'} = \epsilon_k + \delta \approx D$, so sorgt der Faktor J , welcher die ln-Terme der Ordnung 1 unterdrückt, für $T_{kk'} \approx 2$ und $\hat{T}_{kk'} \approx 2$.

Die Näherung wird schlechter, wenn ϵ_k und $\epsilon_{k'}$ unterschiedliche Größenordnungen annehmen. Ein extremer Fall liegt vor, wenn zum Beispiel $\epsilon_k \ll D$, aber $\epsilon_{k'} = D$ ist. Dann ist

$$T_{kk'} \approx 2 + Jr \ln \frac{5D^2}{D^2} = 2 + Jr \ln 5, \quad (\text{B.4})$$

aber

$$\begin{aligned}
 \hat{T}_{kk'} &= \sqrt{2 + 2Jr \ln \frac{D}{\epsilon_k}} \cdot \sqrt{2 + 2Jr \ln 2} \\
 &= 2\sqrt{1 + Jr \left(\ln \frac{D}{\epsilon_k} + \ln 2 \right) + J^2 r^2 \left(\ln 2 \ln \frac{D}{\epsilon_k} \right)} \quad (\text{B.5})
 \end{aligned}$$

Nehmen wir an, Jr sei klein, und $Jr \ln \frac{D}{\epsilon_k} = \frac{1}{2}$ (das entspräche gerade dem Fall, daß $\epsilon_k = E \ll D$), dann wäre $T_{kk'} \approx 2$ und $\hat{T}_{kk'} \approx 2 \cdot \sqrt{\frac{3}{2}} = \sqrt{6}$, so daß

$$\frac{T_{kk'}}{\hat{T}_{kk'}} \approx \frac{1}{3} \sqrt{6} \approx 0,82 \quad , \quad (\text{B.6})$$

also lediglich hinreichend nahe der Eins.

Für die darauf aufbauenden Rechnungen erweist es sich als Vorteil, daß nur die Diagonalelemente $T_{kk} = h_k^2$ benutzt werden, welche ihrerseits eine exakte Näherung darstellen. Fände sich also eine global bessere Approximation, verbesserte sich gleichwohl die Auswertung der Summanden mit den Faktoren h_k^2 nicht !

Anhang C. Integration

Wir wollen Gleichung (5.13) auswerten und wandeln sie in ein Integral um:

$$1 - \frac{3J}{2} \int_0^D d\epsilon r(\epsilon) \frac{2 + 2Jr \ln \frac{D+\epsilon}{\epsilon}}{\epsilon - E} = 0 \quad , \quad (\text{C.1})$$

wobei $r(\epsilon)$ die Zustandsdichte bedeutet, welche wir als konstant annehmen wollen: $r(\epsilon) =: r$.

Der erste Summand im Integral, $I_1 = 3Jr \int_0^D d\epsilon \frac{1}{\epsilon - E}$ läßt sich elementar auswerten und ergibt

$$I_1 = 3Jr \ln \frac{D}{|E|} \quad . \quad (\text{C.2})$$

Der zweite Beitrag $I_2 = 3J^2 r^2 \int_0^D d\epsilon \frac{\ln \frac{D+\epsilon}{\epsilon}}{\epsilon - E}$ (hier der Übersichtlichkeit wegen positiv gerechnet) erweist sich als

$$\begin{aligned} I_2 = & 3J^2 r^2 \left(-\frac{\pi^2}{12} + \frac{1}{2} \ln^2 2 + \ln \left| \frac{D+E}{E} \right| \ln \frac{1}{2} \left| \frac{D-E}{E} \right| \right. \\ & \left. + \operatorname{dilog} \left(\frac{D+E}{2E} \right) + i\pi \ln \left| \frac{2E}{D+E} \right| \right) \quad . \quad (\text{C.3}) \end{aligned}$$

Hierbei bezeichnet $\operatorname{dilog}(x)$ den Eulerschen Dilogarithmus, der definiert ist als

$$\operatorname{dilog} x := \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x}{n^2} = - \int_0^x dt \frac{\ln(1-t)}{t} \quad . \quad (\text{C.4})$$

Nach der Umkehrformel für den Dilogarithmus gilt

$$\operatorname{dilog} x = -\operatorname{dilog} \frac{1}{x} - \frac{1}{2} (\ln x)^2 + \pi i \ln x + \frac{\pi^2}{3} \quad , \quad (\text{C.5})$$

so daß sich für das zweite Integral ergibt

$$I_2 = 3J^2r^2 \left(\frac{\pi^2}{4} + \frac{1}{2} \ln^2 2 - \ln \left| \frac{D+E}{E} \right| \ln 2 + \ln \left| \frac{D+E}{E} \right| \ln \left| \frac{D-E}{E} \right| - \operatorname{dilog} \left(\frac{2E}{D+E} \right) - \frac{1}{2} \left(\ln^2 \left| \frac{D+E}{E} \right| - 2 \ln 2 \ln \left| \frac{D+E}{E} \right| + \ln^2 2 \right) \right). \quad (\text{C.6})$$

In Anbetracht unserer Erwartung, daß $E \ll D$ ist, können wir $D \pm E \approx D$ setzen sowie den $\operatorname{dilog} \left(\frac{2E}{D+E} \right)$ vernachlässigen.

Wir erhalten damit

$$\begin{aligned} I_2 &= 3J^2r^2 \left(\frac{\pi^2}{4} + \frac{1}{2} \ln^2 2 - \ln 2 \ln \left| \frac{D}{E} \right| + \ln^2 \left| \frac{D}{E} \right| - \frac{1}{2} \ln^2 \left| \frac{D}{E} \right| + \ln 2 \ln \left| \frac{D}{E} \right| - \frac{1}{2} \ln^2 2 \right) \\ &= 3J^2r^2 \left(\frac{\pi^2}{4} + \frac{1}{2} \ln^2 \left| \frac{D}{E} \right| \right) \\ &= \frac{3}{2} J^2 r^2 \left(\frac{\pi^2}{2} + \ln^2 \frac{D}{|E|} \right) . \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

Anhang D. Zwei-Kanal-Kondo-Modell in Ordnung J^2

Berücksichtigen wir die 2. Ordnung in J , dann folgen aus $H\psi = E\psi$ folgende Gleichungen:

$$\begin{aligned}
(\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) &= \sum_k ((J_{k_1k} - V_{k_1k}) \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) + (J_{kk_2} - V_{kk_2}) \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k) \\
&\quad - 2 \cdot J_{k_1k} \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2) - 2 \cdot J_{kk_2} \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k)) \quad (D.1)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) &= \sum_k (-2 \cdot J_{k_1k} \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) + (J_{k_1k} - V_{k_1k}) \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2) \\
&\quad - (J_{kk_2} + V_{kk_2}) \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k)) \quad (D.2)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k_2) &= \sum_k (-2 \cdot J_{kk_2} \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k) + (J_{kk_2} - V_{kk_2}) \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k) \\
&\quad - (J_{k_1k} + V_{k_1k}) \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k, k_2)) \quad (D.3)
\end{aligned}$$

Wir setzen

$$J_{kp} - V_{kp} = \frac{J}{N} - \frac{1}{2} \frac{J}{N} J r \ln \frac{(D + \epsilon_k)^2 + (D + \epsilon_p)^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_p^2} =: h_k \cdot h_p \quad (D.4)$$

$$J_{kp} + V_{kp} = \frac{J}{N} + \frac{5}{2} \frac{J}{N} J r \ln \frac{(D + \epsilon_k)^2 + (D + \epsilon_p)^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_p^2} =: g_k \cdot g_p \quad (D.5)$$

$$\Rightarrow J_{kp} = \frac{1}{2} (h_k h_p + g_k g_p) \quad (D.6)$$

Damit folgen die Gleichungen:

$$\begin{aligned}
 (\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) &= \sum_k (h_{k_1} h_k (\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2)) \\
 &\quad + h_k h_{k_2} (\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k)) \\
 &\quad - g_{k_1} g_k \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2) - g_k g_{k_2} \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k)) \quad (D.7)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) &= \sum_k (-h_{k_1} h_k (\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2)) \\
 &\quad - g_{k_1} g_k \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) - g_k g_{k_2} \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k)) \quad (D.8)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k_2) &= \sum_k (-h_k h_{k_2} (\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k)) \\
 &\quad - g_k g_{k_2} \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k) - g_{k_1} g_k \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k, k_2)) \quad (D.9)
 \end{aligned}$$

Wir haben drei Varianten notiert:

Variante A

Wir setzen

$$\sum_k h_k \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) = \sum_k h_k \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_2, k) =: \gamma_1(k_2) \quad (D.10)$$

$$\sum_k g_k \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) = \sum_k g_k \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_2, k) =: \gamma_2(k_2) \quad (D.11)$$

$$\sum_k h_k \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2) = \sum_k h_k \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_2, k) =: \gamma_3(k_2) \quad (D.12)$$

$$\sum_k g_k \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2) = \sum_k g_k \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_2, k) =: \gamma_4(k_2) \quad (D.13)$$

$$\sum_k g_k \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_2, k) = \sum_k g_k \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k, k_2) =: \gamma_5(k_2) \quad (D.14)$$

Aus der Gleichung

$$\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) + \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) + \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k_2) = 0 \quad (\text{D.15})$$

folgt die Beziehung

$$\gamma_2(k_2) + \gamma_4(k_2) + \gamma_5(k_2) = 0 \quad (\text{D.16})$$

Damit ergeben sich in einem ersten Schritt die Gleichungen

$$\begin{aligned} (\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) &= h_{k_1} \gamma_1(k_2) - h_{k_1} \gamma_3(k_2) + h_{k_2} \gamma_1(k_1) - h_{k_2} \gamma_3(k_1) \\ &\quad - g_{k_1} \gamma_4(k_2) - g_{k_2} \gamma_4(k_1) \end{aligned} \quad (\text{D.17})$$

$$\begin{aligned} (\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) &= -h_{k_1} \gamma_1(k_2) + h_{k_1} \gamma_3(k_2) \\ &\quad - g_{k_1} \gamma_2(k_2) - g_{k_2} \gamma_5(k_1) \end{aligned} \quad (\text{D.18})$$

$$\begin{aligned} (\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k_2) &= -h_{k_2} \gamma_1(k_1) + h_{k_2} \gamma_3(k_1) \\ &\quad - g_{k_2} \gamma_2(k_1) - g_{k_1} \gamma_5(k_2) \end{aligned} \quad (\text{D.19})$$

und somit

$$\begin{aligned} \gamma_1(k_2) &= \sum_k h_k \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) = \\ \sum_k &\frac{h_k^2 \gamma_1(k_2) - h_k^2 \gamma_3(k_2) + h_k h_{k_2} \gamma_1(k) - h_k h_{k_2} \gamma_3(k) + h_k g_k \gamma_2(k_2) + h_k g_k \gamma_5(k_2) + h_k g_{k_2} \gamma_2(k) + h_k g_{k_2} \gamma_5(k)}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \gamma_2(k_2) &= \sum_k g_k \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2) = \\ \sum_k &\frac{g_k h_k \gamma_1(k_2) - g_k h_k \gamma_3(k_2) + g_k h_{k_2} \gamma_1(k) - g_k h_{k_2} \gamma_3(k) + g_k^2 \gamma_2(k_2) + g_k^2 \gamma_5(k_2) + g_k g_{k_2} \gamma_2(k) + g_k g_{k_2} \gamma_5(k)}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E} \end{aligned}$$

$$\gamma_3(k_2) = \sum_k h_k \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k, k_2) = \sum_k \frac{-h_k^2 \gamma_1(k_2) + h_k^2 \gamma_3(k_2) - h_k g_k \gamma_2(k_2) - h_k g_{k_2} \gamma_5(k)}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E}$$

$$\gamma_5(k_2) = \sum_k g_k \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k, k_2) = \sum_k \frac{-g_k h_{k_2} \gamma_1(k) + g_k h_{k_2} \gamma_3(k) - g_k g_{k_2} \gamma_2(k) - g_k^2 \gamma_5(k_2)}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E}$$

Kurzgefaßt kann man schreiben

$$\gamma_i(k_2) = \sum_k \frac{1}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E} F_{ij} \gamma_j(k_2) + \sum_k \frac{1}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E} G_{ij} \gamma_j(k) \quad (\text{D.20})$$

mit dem Matrizen

$$F = \begin{pmatrix} h_k^2 & g_k h_k & -h_k^2 & g_k h_k \\ g_k h_k & g_k^2 & -g_k h_k & g_k^2 \\ -h_k^2 & -g_k h_k & h_k^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -g_k^2 \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} h_k h_{k_2} & g_{k_2} h_k & -h_k h_{k_2} & g_{k_2} h_k \\ g_k h_{k_2} & g_k g_{k_2} & -g_k h_{k_2} & g_k g_{k_2} \\ 0 & 0 & 0 & -g_{k_2} h_k \\ -g_k h_{k_2} & -g_k g_{k_2} & g_k h_{k_2} & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{D.21})$$

Man kann als weitere Vereinfachung anstelle $\gamma_1(k)$ und $\gamma_3(k)$ die Differenz $\gamma_1(k) - \gamma_3(k) := \gamma_1^{neu}(k)$ verwenden und somit das System um eine Gleichung verkleinern. Man erhält dann:

$$\gamma_i(k_2) = \sum_k \frac{1}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E} F_{ij} \gamma_j(k_2) + \sum_k \frac{1}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E} G_{ij} \gamma_j(k) \quad (\text{D.22})$$

mit dem Matrizen

$$F = \begin{pmatrix} 2h_k^2 & 2g_k h_k & g_k h_k \\ g_k h_k & g_k^2 & g_k^2 \\ 0 & 0 & -g_k^2 \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} h_k h_{k_2} & g_{k_2} h_k & 2g_{k_2} h_k \\ g_k h_{k_2} & g_k g_{k_2} & g_k g_{k_2} \\ -g_k h_{k_2} & -g_k g_{k_2} & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{D.23})$$

Ob und wie diese Matrizen durch eine geeignete Ähnlichkeits-Transformation L in hermitesche Matrizen überführt werden können, konnte nicht gelöst werden.

Variante B

Aus den Gleichungen (D.7) bis (D.9) gewinnen wir andererseits

$$\begin{aligned}
(\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) (\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2)) &= \sum_k [2h_{k_1}h_k(\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2)) \\
&\quad + h_k h_{k_2}(\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k)) \\
&\quad + g_{k_1}g_k (\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2)) \\
&\quad + g_k g_{k_2} (\Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k) - \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k))]
\end{aligned} \tag{D.24}$$

$$\begin{aligned}
(\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) (\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k_2)) &= \sum_k [h_{k_1}h_k(\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k, k_2)) \\
&\quad + 2h_k h_{k_2}(\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k)) \\
&\quad + g_{k_1}g_k (\Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k, k_2) - \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2)) \\
&\quad + g_k g_{k_2} (\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k))]
\end{aligned} \tag{D.25}$$

$$\begin{aligned}
(\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) (\Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k_2)) &= \sum_k [-h_{k_1}h_k(\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2)) \\
&\quad + h_k h_{k_2}(\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k)) \\
&\quad - g_{k_1}g_k (\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k, k_2)) \\
&\quad + g_k g_{k_2} (\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k))]
\end{aligned} \tag{D.26}$$

Wir setzen nun

$$\sum_k h_k (\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2)) = \sum_k h_k (\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_2, k) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_2, k)) =: \gamma_1(k_2) \quad (\text{D.27})$$

$$\sum_k g_k (\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2)) = \sum_k g_k (\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_2, k) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_2, k)) =: \gamma_2(k_2) \quad (\text{D.28})$$

$$\sum_k g_k (\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2)) = \sum_k g_k (\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_2, k) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_2, k)) =: \gamma_3(k_2) \quad (\text{D.29})$$

$$\sum_k g_k (\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2)) = \sum_k g_k (\Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_2, k) - \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_2, k)) =: \gamma_4(k_2) \quad (\text{D.30})$$

und erhalten durch Ersetzen

$$(\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) (\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2)) = 2h_{k_1}\gamma_1(k_2) + h_{k_2}\gamma_1(k_1) + g_{k_1}\gamma_2(k_2) + g_{k_2}\gamma_4(k_1) \quad (\text{D.31})$$

$$(\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) (\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2)) = h_{k_1}\gamma_1(k_2) + 2h_{k_2}\gamma_1(k_1) + g_{k_1}\gamma_4(k_2) + g_{k_2}\gamma_2(k_1) \quad (\text{D.32})$$

$$(\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) (\Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) - \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2)) = -h_{k_1}\gamma_1(k_2) + h_{k_2}\gamma_1(k_1) - g_{k_1}\gamma_3(k_2) + g_{k_2}\gamma_3(k_1) \quad (\text{D.33})$$

und weiters

$$\begin{aligned}
\gamma_1(k_2) &= \sum_k h_k (\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2)) \\
&= \sum_k \frac{2h_k^2 \gamma_1(k_2) + h_k h_{k_2} \gamma_1(k) + h_k g_k \gamma_2(k_2) + h_k g_{k_2} \gamma_4(k)}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E}
\end{aligned} \tag{D.34}$$

$$\begin{aligned}
\gamma_2(k_2) &= \sum_k g_k (\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2)) \\
&= \sum_k \frac{2g_k h_k \gamma_1(k_2) + g_k h_{k_2} \gamma_1(k) + g_k^2 \gamma_2(k_2) + g_k g_{k_2} \gamma_4(k)}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E}
\end{aligned} \tag{D.35}$$

$$\begin{aligned}
\gamma_3(k_2) &= \sum_k g_k (\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2)) \\
&= \sum_k \frac{g_k h_k \gamma_1(k_2) + 2g_k h_{k_2} \gamma_1(k) + g_k^2 \gamma_4(k_2) + g_k g_{k_2} \gamma_2(k)}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E}
\end{aligned} \tag{D.36}$$

$$\begin{aligned}
\gamma_4(k_2) &= \sum_k g_k (\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2)) \\
&= \sum_k \frac{g_k h_k \gamma_1(k_2) - g_k h_{k_2} \gamma_1(k) + g_k^2 \gamma_3(k_2) - g_k g_{k_2} \gamma_3(k)}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E}
\end{aligned} \tag{D.37}$$

In der Kurzfassung:

$$\gamma_i(k_2) = \sum_k \frac{1}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E} F_{ij} \gamma_j(k_2) + \sum_k \frac{1}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E} G_{ij} \gamma_j(k) \tag{D.38}$$

mit dem Matrizen

$$F = \begin{pmatrix} 2h_k^2 & g_k h_k & 0 & 0 \\ 2g_k h_k & g_k^2 & 0 & 0 \\ g_k h_k & 0 & 0 & g_k^2 \\ g_k h_k & 0 & g_k^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} h_k h_{k_2} & 0 & 0 & g_{k_2} h_k \\ g_k h_{k_2} & 0 & 0 & g_k g_{k_2} \\ 2g_k h_{k_2} & g_k g_{k_2} & 0 & 0 \\ -g_k h_{k_2} & 0 & -g_k g_{k_2} & 0 \end{pmatrix}. \tag{D.39}$$

Hier gilt dasselbe wie bei Variante A.

Variante C

Aus den Gleichungen (D.1) bis (D.3) kann man auch folgende Gleichungen gewinnen:

$$\begin{aligned}
 & (\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) (2\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k_2)) = \\
 & \sum_k [(2J_{k_1k} - V_{k_1k}) (2\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k, k_2)) \\
 & - 3J_{k_1k} (\Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k, k_2))] \\
 & + (2J_{kk_2} - V_{kk_2}) (2\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k)) \\
 & + 3J_{kk_2} (\Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k))] \tag{D.40}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & (\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) (\Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k_2)) = \\
 & \sum_k [-J_{k_1k} \cdot (2\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k, k_2)) \\
 & - V_{k_1k} (\Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k, k_2))] \\
 & + J_{kk_2} (2\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k)) \\
 & - V_{kk_2} (\Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k))] \tag{D.41}
 \end{aligned}$$

Da man folgendes umschreiben kann:

$$\begin{aligned}
 2J_{kp} - V_{kp} &= 2\frac{J}{N} + \frac{1}{2}\frac{J}{N} Jr \ln \frac{(D + \epsilon_k)^2 + (D + \epsilon_p)^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_p^2} =: 2J + J \cdot h_k h_p \\
 J_{kp} &= \frac{J}{N} + \frac{J}{N} Jr \ln \frac{(D + \epsilon_k)^2 + (D + \epsilon_p)^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_p^2} =: J + 2J \cdot h_k h_p \\
 V_{kp} &= \frac{3}{2}\frac{J}{N} Jr \ln \frac{(D + \epsilon_k)^2 + (D + \epsilon_p)^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_p^2} =: 3J \cdot h_k h_p \tag{D.42}
 \end{aligned}$$

könnte man setzen:

$$\gamma_1(k_2) := \sum_k (2\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k, k_2)) \quad (\text{D.43})$$

$$\gamma_2(k_2) := \sum_k h_k (2\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k, k_2)) \quad (\text{D.44})$$

$$\gamma_3(k_2) := \sum_k (\Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k, k_2)) \quad (\text{D.45})$$

$$\gamma_4(k_2) := \sum_k h_k (\Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k, k_2)) \quad (\text{D.46})$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} (\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) (2\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) - \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k_2)) = \\ 2J\gamma_1(k_2) + Jh_{k_1}\gamma_2(k_2) - 3J\gamma_3(k_2) - 6Jh_{k_1}\gamma_4(k_2) \\ + 2J\gamma_1(k_1) + Jh_{k_2}\gamma_2(k_1) - 3J\gamma_3(k_1) - 6Jh_{k_2}\gamma_4(k_1) \\ \\ (\epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} - E) (\Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) - \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k_2)) = \\ -J\gamma_1(k_2) - 2Jh_{k_1}\gamma_2(k_2) - 3Jh_{k_1}\gamma_4(k_2) \\ + J\gamma_1(k_1) + 2Jh_{k_2}\gamma_2(k_1) + 3Jh_{k_2}\gamma_4(k_1) \end{aligned} \quad (\text{D.47})$$

und ferner

$$\begin{aligned} \gamma_1(k_2) &= J \sum_k \frac{2\gamma_1(k_2) + h_k\gamma_2(k_2) - 3\gamma_3(k_2) - 6h_k\gamma_4(k_2) + 2\gamma_1(k) + h_{k_2}\gamma_2(k) - 3\gamma_3(k) - 6h_{k_2}\gamma_4(k)}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E} \\ \gamma_2(k_2) &= J \sum_k h_k \frac{2\gamma_1(k_2) + h_k\gamma_2(k_2) - 3\gamma_3(k_2) - 6h_k\gamma_4(k_2) + 2\gamma_1(k) + h_{k_2}\gamma_2(k) - 3\gamma_3(k) - 6h_{k_2}\gamma_4(k)}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E} \\ \gamma_3(k_2) &= J \sum_k \frac{-\gamma_1(k_2) + 2h_k\gamma_2(k_2) - 3h_k\gamma_4(k_2) + \gamma_1(k) + 2h_{k_2}\gamma_2(k) + 3h_{k_2}\gamma_4(k)}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E} \\ \gamma_4(k_2) &= J \sum_k h_k \frac{-\gamma_1(k_2) + 2h_k\gamma_2(k_2) - 3h_k\gamma_4(k_2) + \gamma_1(k) + 2h_{k_2}\gamma_2(k) + 3h_{k_2}\gamma_4(k)}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E} \end{aligned} \quad (\text{D.48})$$

oder kurz

$$\gamma_i(k_2) = J \cdot \sum_k \frac{1}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E} F_{ij} \gamma_j(k_2) + J \cdot \sum_k \frac{1}{\epsilon_k + \epsilon_{k_2} - E} G_{ij} \gamma_j(k) \quad (\text{D.49})$$

mit dem Matrizen

$$F = \begin{pmatrix} 2 & h_k & -3 & -6h_k \\ 2h_k & h_k^2 & -3h_k & -6h_k^2 \\ -1 & -2h_k & 0 & -3h_k \\ -h_k & -2h_k^2 & 0 & -3h_k^2 \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} 2 & h_{k_2} & -3 & -6h_{k_2} \\ 2h_k & h_k h_{k_2} & -3h_k & -6h_k h_{k_2} \\ 1 & 2h_{k_2} & 0 & 3h_{k_2} \\ h_k & 2h_k h_{k_2} & 0 & 3h_k h_{k_2} \end{pmatrix}. \quad (\text{D.50})$$

Auch nicht viel ansprechender werden die Matrizen, wenn man anstelle (D.42) setzt:

$$J_{kp} = \frac{J}{N} + \frac{J}{N} J r \ln \frac{(D + \epsilon_k)^2 + (D + \epsilon_p)^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_p^2} =: h_k h_p$$

$$V_{kp} = \frac{3J}{2N} J r \ln \frac{(D + \epsilon_k)^2 + (D + \epsilon_p)^2}{\epsilon_k^2 + \epsilon_p^2} =: g_k g_p \quad (\text{D.51})$$

Man erhält - hier ohne detaillierte Rechnung - im Ausdruck (D.49) die Matrizen

$$F = \begin{pmatrix} 2h_k^2 & -3h_k^2 & -g_k h_k & 0 \\ -h_k^2 & 0 & 0 & -g_k h_k \\ 2g_k h_k & -3g_k h_k & -g_k^2 & 0 \\ -g_k h_k & 0 & 0 & -g_k^2 \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} 2h_k h_{k_2} & -3h_k h_{k_2} & -g_{k_2} h_k & 0 \\ h_k h_{k_2} & 0 & 0 & g_{k_2} h_k \\ 2g_k h_{k_2} & -3g_k h_{k_2} & -g_k g_{k_2} & 0 \\ g_k h_{k_2} & 0 & 0 & g_k g_{k_2} \end{pmatrix}. \quad (\text{D.52})$$

Anhang E. Teilchen-Loch-Anregung beim Zwei-Kanal-Kondo-Modell

Wir verwenden wieder als Hamilton-Operator

$$\begin{aligned}
H = & E_0 + \sum_{k,\alpha,e} \epsilon_k : c_{k\alpha e}^\dagger c_{k\alpha e} : + \sum_{k,p,\alpha,\beta,e} J_{kp} : c_{k\alpha e}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{p\beta e} : \vec{\tau} + \sum_{k,p,\alpha,e} V_{kp} : c_{k\alpha e}^\dagger c_{p\alpha e} : \\
& + \sum_{\substack{k,p,\alpha,\beta,e \\ k',p',\alpha',\beta',e'}} \sum_{l,m,n} Z_{kpk'p'} \epsilon_{lmn} : c_{k\alpha e}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^l c_{p\beta e} c_{k'\alpha'e'}^\dagger \sigma_{\alpha'\beta'}^m c_{p'\beta'e'} : \tau^n \quad (E.1)
\end{aligned}$$

und als Ansatz eine Wellenfunktion mit einer Teilchen-Loch-Anregung

$$\begin{aligned}
\psi = \sum_{k_1,k_2,b} \Gamma(b,b) \cdot \left\{ \begin{aligned} & \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) c_{k_1\downarrow b}^\dagger c_{k_2\uparrow b} \psi_v \alpha \\ & + \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) c_{k_1\uparrow b}^\dagger c_{k_2\uparrow b} \psi_v \beta \\ & + \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k_2) c_{k_1\downarrow b}^\dagger c_{k_2\downarrow b} \psi_v \beta \end{aligned} \right\} \quad (E.2)
\end{aligned}$$

Die Teilchen-Loch-Anregung befindet sich in einem Kanal (der Kanalindex ist derselbe), da sonst keine Wechselwirkung mit dem Zwei-Teilchen-Term stattfinden kann.

Da es sich um einen Zustand mit Gesamtspin-Eigenwert $\frac{1}{2}$ handelt, gilt auch hier:

$$\Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) + \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) + \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k_2) = 0 . \quad (E.3)$$

Das Einsetzen in die stationäre Schrödingergleichung $H\psi = E\psi$ ergibt nach dem Sortieren folgende Gleichungen:

$$\begin{aligned}
(\epsilon_{k_1} - \epsilon_{k_2} - E) \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k_2) &= \sum_{k>0} \left((J_{k_1k} - V_{k_1k}) \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) - 2J_{k_1k} \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2) \right) \\
&+ \sum_{k<0} \left(- (J_{kk_2} + V_{kk_2}) \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k) - 2J_{kk_2} \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k_1, k) \right) \\
&- \sum_{\substack{k>0 \\ k'<0}} 8 Z_{k_1k_2k'k} \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k') - \sum_{\substack{k<0 \\ k'>0}} 8 Z_{kk'k_1k_2} \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k', k) \\
(\epsilon_{k_1} - \epsilon_{k_2} - E) \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k_2) &= \sum_{k>0} \left(-2 \cdot J_{k_1k} \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k_2) + (J_{k_1k} - V_{k_1k}) \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k, k_2) \right) \\
&+ \sum_{k<0} \left((J_{kk_2} - V_{kk_2}) \Gamma^{\uparrow\downarrow\downarrow}(k_1, k) \right) \\
&- \sum_{\substack{k>0 \\ k'<0}} 8 Z_{k_1k_2k'k} \Gamma^{\downarrow\downarrow\uparrow}(k, k') \\
(\epsilon_{k_1} - \epsilon_{k_2} - E) \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k_2) &= \sum_{k>0} \left(- (J_{k_1k} + V_{k_1k}) \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k, k_2) \right) \\
&+ \sum_{k<0} \left(-2 \cdot J_{kk_2} \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k) - (J_{kk_2} + V_{kk_2}) \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k_1, k) \right) \\
&- \sum_{\substack{k<0 \\ k'>0}} 8 Z_{kk'k_1k_2} \Gamma^{\downarrow\uparrow\downarrow}(k', k) \tag{E.4}
\end{aligned}$$

Bei diesem Ansatz trägt nun auch die Zwei-Teilchen-Wechselwirkung bei. Leider sind diese Gleichungen dadurch noch komplizierter als diejenigen im Anhang D entwickelten und wir vermochten es nicht, sie numerisch, geschweige denn analytisch zu lösen.

Anhang F. Pascal-Programm

An dieser Stelle geben wir das Pascal-Programm an, mit dem die numerischen Berechnungen in Kapitel 6 durchgeführt worden sind.

```
program Kondo;
const
n=100;
m=3;
fak=0.7;
con=0;
type
ar=array[1..m,1..2,-n..0]of double;
var
gamma:ar;
d,eps:array[-n..0] of double;
f,g:array[1..2,1..2]of double;
j,k,l:longint;
men:double;
eig:array[1..m]of double;
c:array[1..m,1..m]of double;
function fr(a:double):double;
begin
fr:=ln((1+a)/a);
end;
procedure init;
var
```

```

k:integer;
q,a,b:double;
begin
a:=1;
b:=2;
q:=a*a+b*b;
f[1,1]:=(a*a-4*a*b+b*b)/q;
f[1,2]:=2*(a*a-b*b)/q;
f[2,1]:=f[1,2];
f[2,2]:=(a*a+4*a*b+b*b)/q;
g[1,1]:=(2*a*a-b*b)/q;
g[1,2]:=3*a*b/q;
g[2,1]:=g[1,2];
g[2,2]:=(2*b*b-a*a)/q;
f[1,1]:=1; f[1,2]:=0; f[2,1]:=0; f[2,2]:=1;
g[1,1]:=1; g[1,2]:=0; g[2,1]:=0; g[2,2]:=1;
f[1,1]:=-1; f[1,2]:=0; f[2,1]:=2; f[2,2]:=3;
g[1,1]:=2; g[1,2]:=3; g[2,1]:=0; g[2,2]:=-1;
d[0]:=1-fak;
eps[0]:=sqrt(fak);
for k:=0 downto -n do
begin
gamma[1,1,k]:=1/sqrt(2);
gamma[1,2,k]:=1/sqrt(2);
gamma[2,1,k]:=1/sqrt(2);
gamma[2,2,k]:=-1/sqrt(2);
gamma[3,1,k]:=1;
gamma[3,2,k]:=k/n;

```

```

gamma[4,1,k]:=1;
gamma[4,2,k]:=sqr(k/n);
gamma[5,1,k]:=0;
gamma[5,2,k]:=(k/n)*sqr(k/n);
if k>0 then
begin
d[k]:=fak*fak*d[k+1];
eps[k]:=fak*fak*eps[k+1];
end;
writeln('***',k:3,eps[k]:10:5,d[k]:10:5,gamma[1,k]:10:5,gamma[2,k]:10:5);
end;
end;
procedure iter(men:real);men=-energie
var
ngam:ar;
h,norm:double;
i,j,k,l:integer;
begin
for j:=1 to m do
for i:=1 to 2 do
for k:=0 downto -n do
begin
h:=fr(eps[k]+men)*(f[i,1]*gamma[j,1,k]+f[i,2]*gamma[j,2,k]);
for l:=0 downto -n do
h:=h+d[l]*(g[i,1]*gamma[j,1,l]+g[i,2]*gamma[j,2,l])/(men+eps[k]+eps[l]);
ngam[j,i,k]:=h-con*gamma[j,i,k];
end;
for i:=1 to m do

```

```
for j:=1 to m do
begin
c[i,j]:=0;
for l:=1 to 2 do
for k:=0 downto -n do
c[i,j]:=c[i,j]+d[k]*ngam[i,l,k]*gamma[j,l,k];
end;
for i:=1 to m do eig[i]:=con+c[i,i];
for i:=1 to m do
begini
for j:=1 to i do
beginj
norm:=0;
for l:=1 to 2 do
for k:=0 downto -n do
norm:=norm+d[k]*ngam[i,l,k]*ngam[j,l,k];
if j<i then
for l:=1 to 2 do
for k:=0 downto -n do
ngam[i,l,k]:=ngam[i,l,k]-norm*ngam[j,l,k];
if j=i then
begin
h:=1/sqrt(norm);
for l:=1 to 2 do
for k:=0 downto -n do
ngam[i,l,k]:=h*ngam[i,l,k];
end;
end;j
end;
end;
```

```

end;i
gamma:=ngam;
end;
procedure check;
var
h1,h2,h:double;
i,j,k:integer;
begin
for j:=1 to m do
for i:=1 to 2 do
begin
h1:=0;
h2:=0;
for k:=0 downto -n do
begin
h1:=h1+gamma[j,i,k]*d[k];
h:=(f[i,1]+g[i,1])*gamma[j,1,k]+(f[i,2]+g[i,2])*gamma[j,2,k];
h2:=h2+fr(eps[k]+men)*d[k]*h;
end;
if i=1 then write('j=',j:1,h1:12:6,h2:12:6,eig[j]*h1/h2:12:6)
else writeln(h1:12:6,h2:12:6,eig[j]*h1/h2:12:6);
end;
end;
begin
init;
men:=0.0000000001;
for k:=1 to 500000 do
begin

```

```
iter(men);
if k mod 5000 = 0 then
begin
writeln(k:5);
for l:=1 to m do
begin
for j:=1 to m do write(c[l,j]:12:6);
writeln;
end;
check;
end;
end;
if true then
for l:=-n to 0 do
begin
write(eps[l]:12);
for j:=1 to m do
write(gamma[j,1,l]:10:5,gamma[j,2,l]:10:5);
writeln;
end;
end.
```

Literaturverzeichnis

- [Aff] Ian Affleck, “The Kondo Screening Cloud“, cond-mat/0111321 (2001)
- [And] P.W.Anderson, “Localized Magnetic States in Metals“, Phys.Rev.**124**, 41 (1961)
- [AnDe] N. Andrei und C. Destri, “Solution of the Multichannel Kondo Problem“, Phys. Rev. Lett **52**, 364-367 (1984)
- [Cich] T. Cichork et al., “Two-Channel Kondo-Effect in Glass-Like ThAsSe“, cond-mat/0502057 (2005)
- [Col] P. Coleman, L. Ioffe and A.M. Tsvelick, “Pedestrian Approach to the Two-Channel Kondo Model“, cond-mat/9504006 (1995)
- [Cox93] D.L. Cox, “Selection rules for two-channel Kondo models of U^{4+} and Ce^{3+} ions in metals“, Physica B 186-188, 312-316 (1993)
- [Cox96] D.L. Cox and M. Jarrell, “The two-channel Kondo route to non-Fermi-liquid metals“, J.Phys.: Condens. Matter **8** 9825-9853 (1996)
- [Cra] D.M. Cragg, P. Lloyd und P. Nozières “On the ground states of some s-d exchange Kondo Hamiltonians“, J. Phys. C: Solid St. Phys., 13, 803-817 (1980)
- [Des] H.-U. Desgranges “Thermodynamics of the n -channel Kondo problem (numerical solution)“, J. Phys. C: Solid State Phys. **18**, 5481-5486 (1985)
- [Flo] S. Florens, “Exact scaling functions of the multichannel Kondo model“, cond-mat/0310179 (2003)
- [Gui] F. Guinea, “Dynamics of a particle in an external potential interacting with a dissipative environment“, Physical Review B **32** 7518-7523 (1985)
- [Ha] W.J. de Haas, J. de Boer, G.J. van den Berg, “The Electrical Resistance of Gold, Copper and Lead at Low Temperatures“, Physica **1**, 1115 (1934)
- [Hew] A.C. Hewson, “The Kondo Problem To Heavy Fermions“, Cambridge Studies in Magnetism Vol 2 (CUP, Cambridge, 1993)
- [Hof] W. Hofstetter und S. Kehrein, “Flow equation analysis of the anisotropic Kondo model“, cond-mat/0008242 vom 16. Aug. 2000 (2000)

- [Ish] H. Ishii, "Magnetic-Field Dependence of the Bound State Due to the s-d Exchange Interaction", Prog. Theor. Phys. **40**, 201 (1968)
- [IshY] H. Ishii, K. Yosida, "Zero-Temperature Suszeptibility of a Localized Spin Exchange Coupled with the Conduction Electrons", Prog. Theor. Phys. **38**, 61 (1967)
- [KehM] S. Kehrein, A. Mielke, "Theory of the Anderson impurity modell: The Schrieffer-Wolff transformation re-examined", preprint HD-TVP-95-14, ESI preprint **270**, condmat/9510145 (1995)
- [Kon] Jun Kondo, "Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys", Prog. Theor. Phys. **32**, 37 (1964)
- [Lud] A.W.W. Ludwig und I. Affleck, "Exact, Asymptotic, Three-Dimensional, Space- and Time-Dependent, Green's Functions in the Multichannel Kondo Effect", Physical Review Letters **67**, 3160-3163 (1991)
- [Lud94] A.W.W. Ludwig, Int. J. Mod. Phys. B Vol. 8, No. 4, 1 (1994)
- [Noz74] P. Nozières, "A 'Fermi-Liquid' Description of the Kondo Problem at Low Temperatures", Journal of Low Temp. Phys. **17**, 31 (1974)
- [Noz78] P. Nozières, "Kondo Effect for spin-1/2-impurity - a minimal effort scaling approach", Journal de Phys. **39**, 1117 (1978)
- [Noz80] P. Nozières und A. Blandin "Kondo Effect in real metals", Journal de Physique **41**, 193-211 (1980)
- [Roz] A.V. Rozhkov, "The calculation of the impurity entropy for the exactly solvable two-channel Kondo model", cond-mat/9711181 (1998)
- [Sac89] P.D. Sacramento und P. Schlottmann, "The Quadrupolar Kondo Effect: Lattice Instability and large γ -Values", Physics Letters A **142**, 245-250 (1989)
- [Sac91] P.D. Sacramento und P. Schlottmann, "Thermodynamics of the n -channel Kondo model for general n and impurity spin S in a magnetic field", J. Phys. Condens. Matter **3**, 9687-9696 (1991)
- [Sea] C.L. Seaman et al., Phys. Rev. Lett **67**, 2882 (1991)
- [Thim] B. Thimmel, "Flußgleichungen für das Kondo-Modell", Diplomarbeit, Heidelberg 1996
- [Tsv85] A.M. Tsvelick, "The thermodynamics of the multichannel Kondo problem", J. Phys. C: Solid State Phys. **18**, 159-170 (1985)
- [Tsv] A.M. Tsvelick und P.B. Wiegmann, Z. Phys B **54**, 201 (1984)

- [Vog] E. Vogel, "Flußgleichungen für das Kondo-Modell", Diplomarbeit, Heidelberg 1997
- [Weg] F. Wegner, "Flow Equations for Hamiltonians", *Annalen der Physik, Leipzig* **3**, 77 (1994)
- [Wil] K.G. Wilson, "The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem", *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773 (1975)
- [Yos] K. Yosida, "Bound State Due to the s-d Exchange Interaction", *Phys. Rev.* **147**, 223 (1966)
- [Yosb] K. Yosida, "Ground State Energy of Conduction Electrons Interacting with a Localized Spin", *Progress of Theoretical Physics*, Vol. 36, No. 5, 875-886 (1966)
- [YY] K. Yosida, A. Yoshimori, "The Ground State of the s-d Model" in: *Magnetism*, eds. G.T.Rado & H.Suhl, New York Academic Press, 253 (1973)
- [Zar] G. Zarand and J. von Delft, "Simple Bosonization Solution of the 2-channel Kondo Model", *cond-mat/9812182* (1998)

Danksagung

Prof. Dr. Franz Wegner für die Bereitschaft, mich als nebenberuflichen Doktoranden anzunehmen, zu betreuen und zu unterstützen.

Prof. Dr. Heinz Horner für die freundliche Übernahme der Zweitkorrektur.