

Jan 15, 2010

Quantum Impurity Models

and the numerical renormalization group (NRG)

K.G. Wilson Rev Mod. Phys. 47, 773 (1975)

→ static properties for general T (temperature)

→ dynamic properties : T.A. Costi & A.C. Hewson (1993)

→ connection to density matrix formalism : DM-NRG (Wolke, 2000)

→ real-time evolution based on complete basis set
F. Anders & A. Schiller (2005)

→ complete basis set : general application to
spectral functions (chain derivation) A.W. & Jan v. Delft (2000)

Quantenstille

Single impurity Anderson model (SIAM)

B-field



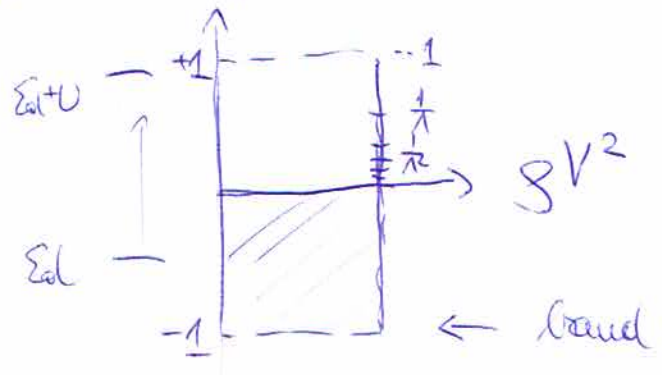
$$H = \sum_c \epsilon_c \hat{n}_{dc} + \sum_c \int d\varepsilon V_{\varepsilon c} (d_c^\dagger c_{\varepsilon c} + h.c.) + \sum_c \int d\varepsilon \varepsilon \hat{n}_{\varepsilon c} + U \cdot \hat{n}_{d\uparrow} \cdot \hat{n}_{d\downarrow} \quad (1)$$

$$\hat{n}_{dc} = d_c^\dagger d_c$$

interaction $\Rightarrow$ ground state consists of "many Slater determinants"

$$| \Psi_0 \rangle = \sum_{\{c_i\}} c_{\{c_i\}} \left(\prod_{i \in \{c_i\}} c_i^\dagger \right) | \rangle$$

Wilson's logarithmic discretization



discretization parameter Λ
("coarse graining")
typically $\Lambda \approx 2$

Sequence $\frac{1}{\Lambda^n} \rightarrow$ determines discretized states

why logarithmic? expect dynamically generated small energy scale (Kondo screening of impurity spin $\rightarrow$ Kondo temperature T_K)

SIAM : $T_K = \sqrt{\frac{U\Gamma}{2}} e^{\pi \frac{\epsilon_d(\epsilon_d+U)}{2U\Gamma}}$
 < 0 for $\epsilon_d \in [-U, 0]$

exponentially small, non-analytic!
 $\hookrightarrow$ perturbation theory fails for $T < T_K$!

(1) $\rightarrow H = H_{\text{dot}}(\epsilon_d, U) + \sum_k \underbrace{V_{k0}}_{\sim (\frac{1}{\Lambda})^{1/2}} (c_{k0}^\dagger d_0 + \text{h.c.}) + \sum_k \underbrace{\epsilon_k \hat{n}_{k0}}_{\sim (\frac{1}{\Lambda})^n}$
 $= \underbrace{\left(\sum_k V_{k0} c_{k0}^\dagger \right)}_{\sim (\frac{1}{\Lambda})^{1/2}} d_0 + \text{h.c.}$
 $=: \sqrt{\frac{2\Gamma}{\pi}} \hat{f}_0^\dagger \dots$ lin. superposition of states in the bath (2)

Lanczos Tridiagonalization

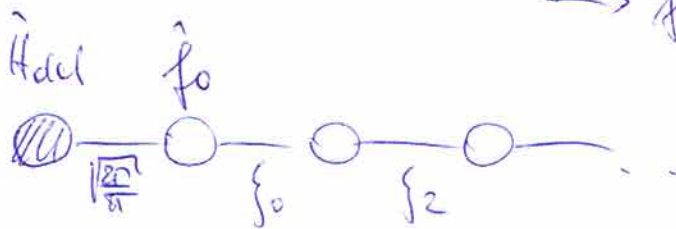
Krylov space method
~ 1950's

$$H_{\text{bath}} = \begin{pmatrix} & & \\ & \ddots & \\ & & \end{pmatrix} \xrightarrow{\hat{f}_0 \rightarrow U} \begin{pmatrix} & & \\ & \ddots & \\ & & \end{pmatrix}$$

(for each spin the same)

Tridiagonal form
diagonal + 1st off-diagonal

→ form of a "tight binding" chain!

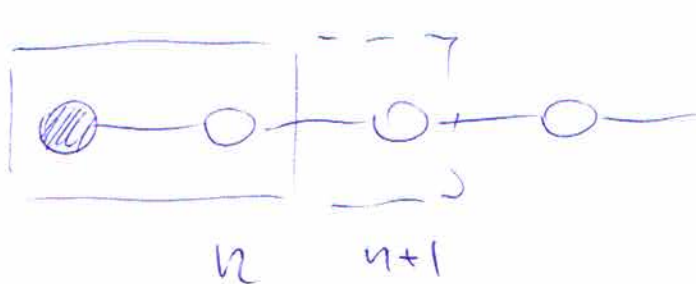


$$(2) \rightarrow H = H_{\text{dcl}} + \sqrt{\frac{2t}{n}} (\hat{f}_0^\dagger \hat{c}_0 + \text{h.c.}) + \sum_{i=0}^{\infty} \{ \hat{f}_i^\dagger \hat{f}_{i+1} + \text{h.c.} \}$$

$$\sim (\Lambda)^{-n/2} \quad (3)$$

... Couplings decay exponentially
(known analytically for Wilson chain)

→ concept of "energy scale separation"



prescription:

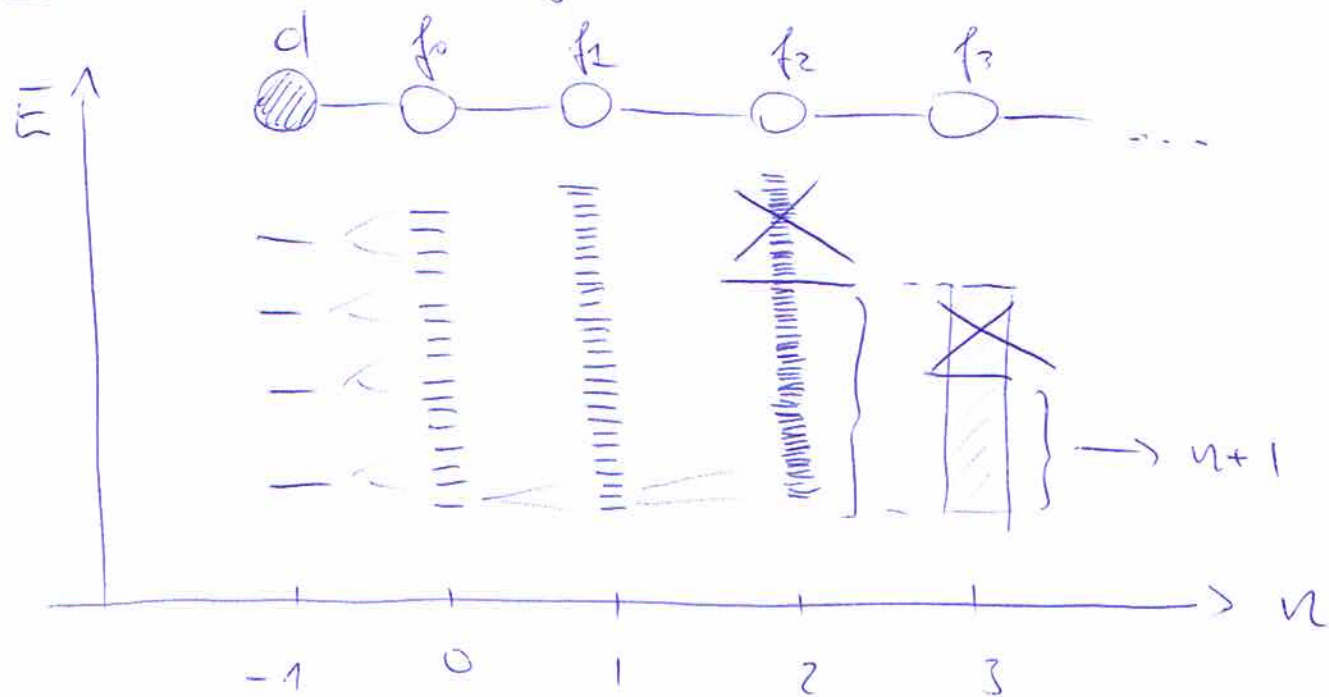
- diagonalize H_n exactly
use this eigenbasis $|S\rangle_n$
to go to / include site $(n+1)$
- too many state?

→ skip eigenstates with
largest energies (interested
in low energy manifold)

analogy: hydrogen atom

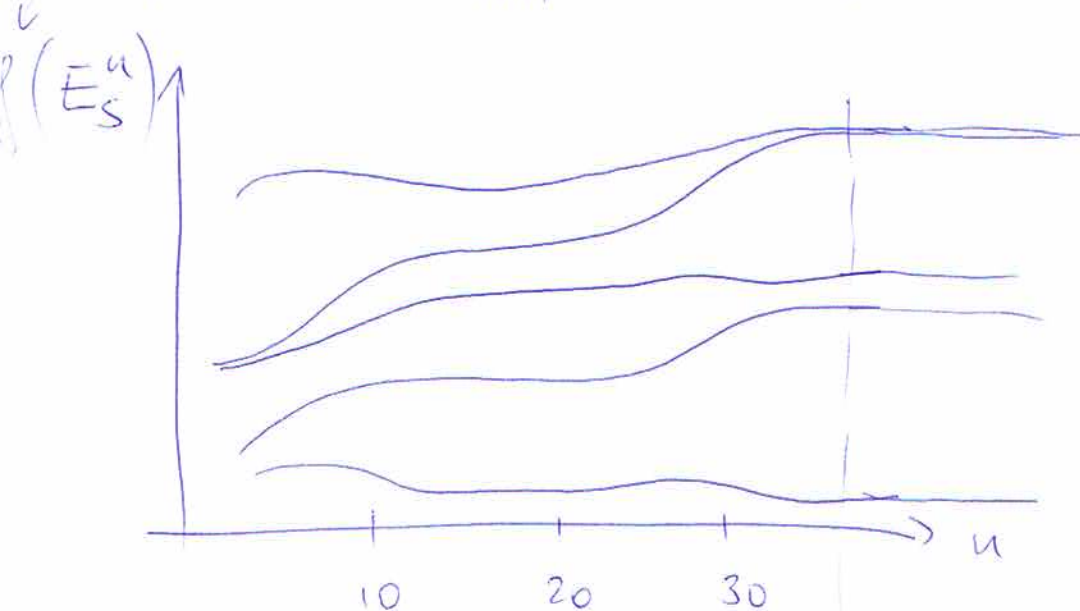
electronic orbitals spin orbit
coupling hyperfine
structure

Iterative Diagonalisierung



"Energy flow diagram" (finite size spectrum)

- Grundzustandsenergie E_0^n stabilisiert
- mit $\ast (\frac{1}{\Lambda})^{\frac{1}{2}}$ reskaliert



iteratives Diagonalisieren
kann gestoppt werden ("man
braucht nichts mehr neues")

→ stabile Fixpunkt erreicht
(Konvergenz in den
Zuständen $|k\rangle_n$ beobachtet)

Vollständige Basis



$\uparrow$
 n

N

Gesamtlänge der Wilsonkette
die betrachtet untersucht wird

$|s\rangle_n$

$|e\rangle_n$

vollständige Basis (Fockraum)
auf dem Rest der Kette bzgl. n

$|se\rangle_n$

Zustände für die gesamte
Wilsonkette $n = -1, 0, 1, \dots, N$

Iteration n : $|se\rangle_n \rightarrow \begin{cases} |se\rangle_n^D \dots \text{"Hochenergiezustände", die bei} \\ \text{Iteration } n \text{ trunciert werden} \\ |se\rangle_n^K \dots \text{"Kept" ... Zustände die} \\ \text{für die nächste Iteration} \\ \text{behalten werden} \end{cases}$

$\Rightarrow |se\rangle_n^D$ sind alle orthogonal aufeinander
(weil $\langle s | s' \rangle_n = \delta_{ss'}$ für $n = n'$ und $|e\rangle_n$ orthogonal
(per Konstruktion))

$$\sum_{se, n} |se\rangle_n^D \langle se| = \mathbb{1}^{(d^N)}$$

vollständige Basis
auf d^N dimensionalen
Hilbert Raum !!

$$H |se\rangle_n \approx E_s |se\rangle_n$$

$\uparrow$ NRG Energieskalenextrapolation

extrem praktisch: kann in der NRG vollständig
behandelt werden (weil quasi-eindimensional)

Anwendung der vollständigen Basis

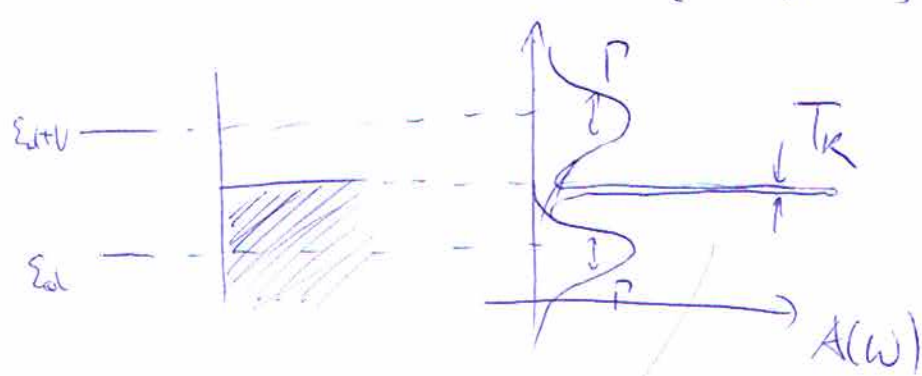
- explizite Zeitabhängigkeit

$$e^{-iHt} |se\rangle_n \cong e^{-iE_s^n t} |se\rangle_n$$

- Korrelationsfunktionen allgemein mit Bezug auf die Störstelle

z.B.: Spektralfunktion mit $A_d(\omega) \equiv \frac{1}{\pi} G_d(\omega)$

wobei $G_d(t) = -i \chi(t) \langle \{ c(t), c^\dagger \} \rangle_T$



extrem scharfe Resonanz an der Fermikante $\rightarrow$ Kondoabschirmung des SIAM Störstellenspins durch das Bad

- Einschränkung: Diskretisierung $\Lambda \gtrsim 1.7$

um Energieskalenvergrößerung zu gewährleisten
andernfalls: Kontinuumlimit $\Lambda \rightarrow 1^+$

$\hookrightarrow$ endliche Auflösung von spektralen Eigenschaften bei endl. Frequenz