Condensed-Matter Theory - Special Topics

Problem 3 — Störstellen-Anderson-Modell
Der Hamiltonian des (spinlosen) nichtwechselwirkenden Störstellen-Anderson-Modells ist durch

$$H = H_0 + H_V$$

gegeben, wobei

$$H_0 = \varepsilon_0 d^\dagger d + \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k$$

und

$$H_V = \sum_k V_k (d^\dagger c_k + c_k^\dagger d)$$

ist.

a) Berechnen Sie zunächst die freien Green-Funktionen $\langle\langle d; d^\dagger \rangle\rangle^{(0)}$ und $\langle\langle c_k; c_{k'}^\dagger \rangle\rangle^{(0)}$!

b) Nutzen Sie die Diagrammtheorie für Potenzialstreuung, um jetzt $G_d(\omega) = \langle\langle d; d^\dagger \rangle\rangle$ und $G_{kk'}(\omega) = \langle\langle c_k; c_{k'}^\dagger \rangle\rangle$ zu bestimmen!

c) Drücken Sie die Ergebnisse für $G_d(\omega)$ und für $\sum_{kk'} V_k G_{kk'}(\omega) V_{k'}$ durch die sogenannte Hybridisierungsfunktion

$$\Delta(\omega) = \sum_k V_k G_{kk}^{(0)} V_k$$

aus!

d) Betrachten Sie jetzt das (spinvolle) Modell mit Hubbard-Wechselwirkung auf dem d-Orbital:

$$H = \sum_\sigma \varepsilon_0 d_\sigma^\dagger d_\sigma + \sum_k \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} V_k (d_\sigma^\dagger c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma) + \frac{U}{2} \sum_\sigma n_{d\sigma} n_{d-\sigma}$$

mit $n_{d\sigma} = d_\sigma^\dagger d_\sigma$.

Begründen Sie mit Hilfe diagrammatischer Argumente, dass die Selbstenergie lokal und nur auf dem d-Orbital von Null verschieden ist, und drücken Sie die wechselwirkende Green-Funktion des d-Orbitals $G_{d,U}(\omega) = \langle\langle d; d^\dagger \rangle\rangle_U$ durch die Selbstenergie und die Hybridisierungsfunktion aus!