

---

# Der Übergang vom Kondoeffekt im Quantendot zur 0.7 Leitwert-Anomalie im Quantenpunktkontakt

Jan Heyder

---



München 2009



---

# **Der Übergang vom Kondoeffekt im Quantendot zur 0.7 Leitwert-Anomalie im Quantenpunktkontakt**

**Jan Heyder**

---

Diplomarbeit  
an der Fakultät für Physik  
der Ludwig-Maximilians-Universität  
München

vorgelegt von  
Jan Heyder  
aus München

München, den 18. Dezember 2009

Erstgutachter: Prof. J. von Delft  
Zweitgutachter: Prof. U. Gerland

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen</b>	<b>5</b>
2.1	Die Physik in einer Dimension . . . . .	5
2.1.1	Der Quantendraht . . . . .	5
2.1.2	Der Ladungstransport in einem Quantendraht . . . . .	5
2.2	Der Quantenpunktkontakt . . . . .	6
2.2.1	Die Quantisierung des Leitwerts . . . . .	6
2.3	Die 0.7 Anomalie . . . . .	9
2.3.1	Der g-Faktor . . . . .	10
2.4	Der Kondoeffekt in einem ausgedehnten Metall . . . . .	11
2.5	Der Quantendot . . . . .	14
2.5.1	Der Kondoeffekt im QD . . . . .	15
2.5.2	Die Phase . . . . .	18
<b>3</b>	<b>Das Modell</b>	<b>21</b>
3.1	Vorbemerkung . . . . .	21
3.2	Motivation . . . . .	21
3.3	Der Modell-Hamiltonian . . . . .	22
3.4	Die Projektion auf den Kontaktbereich - Die Selbstenergie . . . . .	25
3.5	Die Berechnung physikalischer Größen . . . . .	27
3.5.1	Die Lebensdauer . . . . .	27
3.5.2	Spektralfunktion und Dichte . . . . .	28
3.5.3	Die Wechselwirkung . . . . .	28
3.5.4	Die Berechnung des Leitwerts . . . . .	29
<b>4</b>	<b>Die Methode fRG</b>	<b>31</b>
4.1	Der Einfluss der Wechselwirkung . . . . .	31
4.2	Störungstheorie . . . . .	31
4.3	Renormierungsgruppen . . . . .	31
4.4	fRG . . . . .	32
<b>5</b>	<b>Ergebnisse</b>	<b>35</b>
5.1	Der Quantendot . . . . .	37
5.1.1	Magnetfeldverhalten des Leitwerts . . . . .	38
5.1.2	Definition einer Energieskala - die Kondotemperatur . . . . .	38
5.1.3	Magnetisierung und Suszeptibilität . . . . .	40
5.2	Der Übergang vom Quantendot zum Quantenpunktkontakt . . . . .	45
5.2.1	Leitwert und Energieskala . . . . .	45

---

5.2.2	Entwicklung der Suszeptibilität . . . . .	47
5.3	Der Quantenpunktkontakt . . . . .	51
5.3.1	Die Wahl des Potentials und der Krümmungsparameter $\omega$ . . . . .	51
5.3.2	Der Pinchoff . . . . .	51
5.3.3	Die 0.7 Anomalie . . . . .	54
5.3.4	Der effektive g-Faktor . . . . .	56
5.3.5	Die Energieskala $T^*$ im Quantenpunktkontakt . . . . .	57
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>65</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>77</b>

# 1 Einleitung

Die physikalischen Eigenschaften eines Systems sind stark an seine Ausdehnung gekoppelt. Während Mechanismen der klassischen Physik auf großen Längenskalen von Kontinuität und Determinismus geprägt sind, machen sich mit abnehmender Ausdehnung eines physikalischen Systems die Einflüsse der Quantenmechanik (QM) mehr und mehr bemerkbar: Das Verhalten wird nun zunehmend von Unbestimmtheit und Quantisierung bestimmt. Zwischen den Längenskalen der klassischen Physik ( $> \mu m$ ) und der QM ( $< nm$ ) existiert ein Bereich, in dem die Einflüsse beider grundlegend verschiedenen Gesetzmäßigkeiten gleichermaßen spürbar sind. Man spricht hierbei von mesoskopischer Physik, die im Größenordnungsbereich von  $nm$  anzusiedeln ist. Dieser noch recht junge Zweig der Physik beschäftigt sich mit Phänomenen, die einerseits, zur gesamtheitlichen Beschreibung, klassischer Größen bedürfen, deren nächstkleinere Substituenten jedoch schon der QM unterworfen sind [1]. Besonders in der modernen Festkörperphysik hat sich der mesoskopische Physik zunehmend zu einem zentralen Gebiet entwickelt. Unterstützt von der stetigen technischen Weiterentwicklung von Halbleiterelementen hin zur Nanometerskala [2][3], schafft sie sich zusehens einen zentralen Platz in der modereren physikalischen Forschung.

Besonders offenbar wird der mesoskopische Charakter eines System, wenn sowohl eine bestimmte räumliche Ausdehnung, als auch eine bestimmte räumliche Beschränkung vorliegen. Es muss zum einen eine genügend große Abmessung haben um klassisches Verhalten zu zeigen, zum anderen bedarf es einer extremen Einengung, um quantenmechanische Einflüsse wirksam zu machen. Solch ein System muss also in unterschiedlichen Richtungen stark unterschiedliche Ausdehnungen besitzen.

Obwohl ein physikalisches System a priori dreidimensional ist, bewirkt eine starke räumliche Einschränkung in einer oder mehreren Dimensionen eine effektive Erniedrigung der Dimensionalität. Die Quantelung der Zustände dieser, auf kleinem Raum beschränkten, Dimensionen wirkt sich in den ausgedehnten Dimensionen gewissermaßen als Potentiallandschaft aus.

So ist beispielsweise die Propagation eines Teilchens entlang einer ausgedehnten Dimension stark von der Abmessung des Systems senkrecht zur Bewegungsrichtung abhängig. Besitzt es nicht die nötige Energie zumindest den Grundzustand in einer orthogonalen Dimension einzunehmen, wird ein weiterer Transport unmöglich. Solche und ähnliche bemerkenswerte Eigenschaften niederdimensionaler Systeme führten in den letzten 70 Jahren zu der Entdeckung einer Reihe erstaunlicher Phänomene, darunter z. B. der zweidimensionale Quanten-Hall-Effekt [4], das Mermin-Wagner-Theorem<sup>1</sup> [5] oder die Leitwertquantisierung in einem eindimensionalen System, einem sogenannten Quantendraht [6] [7].

Viele der Eigenschaften mesoskopischer Systeme, die in den letzten Jahren theoretisch oder experimentell gefundenen wurden, sind nicht allein mit ihren geometrischen Abmessungen zu

---

<sup>1</sup>Eine kontinuierliche Symmetrie kann in zwei Dimensionen nur bei  $T = 0$  in einer Dimension überhaupt nicht gebrochen werden.

erklären. Allerdings liefern diese die nötigen Rahmenbedingungen eines weiteren entscheidenden Faktors, den der Wechselwirkung der Teilchen untereinander. Solange die Ausdehnung eines Systems groß ist, kann sich ein Teilchen üblicherweise dem Einfluss anderer Teilchen entziehen. Die Einschränkung ihrer 'Fluchtmöglichkeiten' durch eine Begrenzung auf kleinen Raum zwingt die Substituenten eines mesoskopischen Systems gewissermaßen zur Interaktion. Die Folgen der Wechselwirkung werden beispielsweise bei Aggregatzuständen wie der Luttinger-Flüssigkeit [8]<sup>2</sup> oder dem Kondoeffekt in einem Quantendot (QD) [9], einem null-dimensionalen System, sichtbar.

Während viele experimentell gefundenen Phänomene der mesoskopischen Physik gut durch theoretische Modelle beschrieben werden, gibt es auch heute noch gewissermaßen weiße Flecken in ihrer Erklärungslandschaft. Ein solcher weißer Fleck ist die sogenannte *0.7 Anomalie*. Sie ist ein Phänomen, dass mit der Leitwertquantisierung, also einer elektrischen Transporteigenschaft, in einem eindimensionalen System (einem Quantendraht) zusammenhängt. Es handelt sich bei ihr um einen Wechselwirkungseffekt, was wie in dieser Arbeit dargestellt wird die Beschreibung erheblich kompliziert. Während die Theorie eine Quantisierung des Leitwerts (als Funktion der Kanalbreite) in Einheiten des sogenannten Leitwertquantums  $g_0 = 2e^2/h$  vorhersagt [10], zeigt sich im Experiment bei geeignetem Magnetfeld oder geeigneter Temperatur eine zusätzliche Zwischenstufe bei  $\sim 0.7g_0$  [11]. Entdeckt in den 90er Jahren bedingt die 0.7 Anomalie seitdem die Veröffentlichung zahlreicher Erklärungsversuche [12] [13]. Doch allen Anstrengungen zum Trotz konnte bis heute kein Modell gefunden werden, dass die mannigfaltigen Eigenschaften der Anomalie allumfassend erklärt.

Diese Arbeit enthält eine Art Bestandsaufnahme der Eigenschaften der Anomalie am Temperaturnullpunkt. Die Modellierung des Quantendrahts durch eine Tight-Binding Kette ermöglicht eine systematische Auswertung des Leitwertverhaltens und der lokalen Dichte in Abhängigkeit unterschiedlicher Systemgrößen [14]. Dazu gehören:

- die Länge des Quantendrahtes,
- die Form des effektiven Potentials im Draht,
- die Stärke der Wechselwirkung der Elektronen,
- die Stärke eines angelegten Magnetfelds.

Da die 0.7 Anomalie oft mit einem weiteren Wechselwirkungseffekt, dem sogenannten Kondoeffekt, in Verbindung gebracht wird [12], wird in dieser Arbeit besonderen Wert auf die Herausarbeitung von Gemeinsamkeiten und Unterschieden beider Phänomene gelegt. Damit kann sie als ein Anknüpfungspunkt für weitere Erklärungsversuche dienen.

Der Einfluss der Wechselwirkung verwehrt a priori eine exakte Lösung des Problems. Als Alternative zu einer störungstheoretischen Behandlung bieten sich Renormierungsgruppen an. Um orts aufgelöste Information über das System des Quantendrahtes zu erhalten, ist die Funktionale Renormierungs Gruppe (fRG) perfekt geeignet. Die Wechselwirkung wird beim Fluss von typischen fRG-Differentialgleichungen (Flussgleichungen) bezüglich eines Flussparameters generiert [15] [16].

---

<sup>2</sup>In einer Dimension bewirkt die Wechselwirkung eine Ausschmierung der Impulsverteilung an der Fermifläche.



Die Arbeit ist wie folgt gegliedert:

- **Grundlagen:** In diesem Kapitel werden Grundeigenschaften des Transportverhaltens in eindimensionalen Systemen beschrieben. Ein besonderes Augenmerk wird auf die Beschreibung des Kondoeffekts und der 0.7 Anomalie gelegt.
- **Das Modell:** Nach einer Motivation wird, unter der Berücksichtigung der grundsätzlichen physikalischen Phänomenologie des Systems, ein Modell für den Quantendraht herausgearbeitet.
- **Die Methode:** Hier wird ein kurzer Einblick in die Funktionsweise der Funktionalen Renormierungsgruppe (fRG) gegeben. Da die Herleitung der entscheidenden Gleichungen, der sogenannten Flussgleichungen, eine Redundanz zu vorangegangenen Veröffentlichungen [15] [16] darstellen würde, wird darauf in dieser Arbeit verzichtet.
- **Ergebnisse:** Dieser Abschnitt präsentiert die Ergebnisse der numerischen Berechnungen. Das Kapitel gliedert sich in drei Unterkapitel:
  - Der Quantendot
  - Übergang vom Quantendot zum Quantenpunktkontakt
  - Der Quantenpunktkontakt
- Abschließend präsentiert eine **Zusammenfassung** die wichtigsten Ergebnisse und Schlussfolgerungen dieser Arbeit und gibt einen Ausblick auf mögliche Ansatzpunkte weiterer Forschung.



## 2 Grundlagen

In diesem Kapitel sollen einige Grundlagen und Begrifflichkeiten geklärt werden, die zum Verständnis der, in dieser Arbeit erzielten, Ergebnisse unbedingt notwendig sind. Insbesondere werden räumlich beschränkte Systeme, wie der Quantendraht, der Quantenpunktkontakt (QPC) und der Quantendot (QD) diskutiert. An ihnen werden wichtige Phänomene, einschließlich der Leitwertquantisierung und des Kondoeffekts, besprochen. Der Aufbau dieses Kapitels richtet sich nach der historischen Entwicklung dieses Gebiets.

### 2.1 Die Physik in einer Dimension

#### 2.1.1 Der Quantendraht

Ein quasi-eindimensionales mesoskopisches System wird als Quantendraht (quantum wire) bezeichnet. Während die Zustände von Ladungsträgern in longitudinaler Drahtrichtung wegen der großen Ausdehnung freien Wellen entsprechen, führt die räumliche Einschränkung in transversaler Richtung zu stehenden Wellen und einer starken Quantisierung der Energiezustände. Ein Ladungstransport kann somit nur entlang des Drahtes stattfinden. Die Abmessung des Systems in transversaler Richtung führt zu einer Propagationsbedingung an die Ladungsträger: Ein Elektron kann an einem bestimmten Punkt  $x_0$  im Draht nur dann einen Zustand besetzen, wenn es zumindest die Grundzustandsenergie bezüglich der transversalen Richtung besitzt. Bei einer Verengung oder Erweiterung des Drahtes erhöht bzw. erniedrigt sich die benötigte Energie.

#### 2.1.2 Der Ladungstransport in einem Quantendraht

Um elektrische Transporteigenschaften wie Strom und Widerstand zu berechnen, bedarf es der Zustandsdichte im Draht. Man braucht Information über die Anzahl und jeweilige Energie (also 'Geschwindigkeit') der propagierenden Ladungsträger. Dazu betrachten wir einen unendlich hohen Potentialtopf der Breite  $L$ . Diese entspricht der Ausdehnung des Quantendrahtes in longitudinaler Richtung, also der oben erwähnten Einschränkung der Dimension, die die Propagationsbedingung festlegt. Die zugehörigen Eigenenergien dieses Systems finden sich leicht durch Lösen der stationären Schrödingergleichung. Aus ihnen erhält man eine Quantisierungsbedingung des Wellenvektors:

$$\Delta k = \frac{2\pi}{L}. \quad (2.1)$$

Die Anzahl besetzter Zustände in Propagationsrichtung bis zu einem Wellenvektor  $k$  pro Längeneinheit lautet damit unter Berücksichtigung des Spins der Teilchen<sup>1</sup>

$$N(k) = \frac{k}{\pi}. \quad (2.2)$$

Daraus ergibt sich die Zustandsdichte als Ableitung von  $N(k)$  nach der Energie

$$D_1(\varepsilon) = \frac{dN(k)}{dk} \frac{dk}{d\varepsilon} = \frac{1}{\pi} \frac{dk}{d\varepsilon} \propto E^{-\frac{1}{2}} \quad (2.3)$$

Die Form der Zustandsdichte in einer Dimension  $D(\varepsilon) \propto \varepsilon^{-\frac{1}{2}}$  hat, wie sich zeigen wird, entscheidenden Einfluss auf die Transporteigenschaften des Systems. Sie führt insbesondere zu einer Quantisierungsbedingung des linearen Leitwerts  $G = \frac{dI}{dV}|_{V \sim 0}$ , also der Änderung des Stromes bei kleiner angelegten Spannung an den Drahtenden, wie im weiteren Verlauf dieses Kapitels herausgearbeitet wird.

## 2.2 Der Quantenpunktkontakt

Ist ein Quantendraht links und rechts an ausgedehnte Elektronenreservoirs gekoppelt, so spricht man von einem Quantenpunktkontakt (QPC). Dieser zeichnet sich insbesondere durch eine geringe Ladungsträgerdichte in seinem Inneren aus, was Wechselwirkungseffekte verstärkt. Er ist damit, ein ideales Modellsystem zur Erforschung stark korrelierter Elektronensysteme.

### 2.2.1 Die Quantisierung des Leitwerts

Verbindet man den Draht an beiden Seiten mit Elektronenreservoirs, so können Ladungsträger durch ihn hindurch propagieren. Die beiden Reservoirs werden experimentell gewöhnlich durch ein 2-DEG (zweidimensionales Elektronengas) realisiert, also ein System, das in einer Dimension stark eingeschränkt ist. Eine analoge Rechnung zu Gl. (2.1)-Gl. (2.3) zeigt, dass die Zustandsdichte in zwei Dimensionen durch  $D_2(\varepsilon) = \frac{m}{\pi\hbar}$  gegeben, also eine Konstante ist.

Unter Kenntnis der eindimensionalen Zustandsdichte kann man den Strom durch den Quantendraht berechnen. Für eine quasi-kontinuierliche Verteilung der Energieniveaus geht die Summe  $I = e \sum_E v(E)$  in ein Integral über. Die vorhandenen Zustände im Draht werden von Kontaktelektronen beim Eintritt in den Kanal besetzt. Für einen endlichen Strom müssen sich die chemischen Potentiale des linken und rechten Reservoirs voneinander unterscheiden. Andernfalls propagieren ebenso viele Ladungsträger von links nach rechts, wie von rechts nach links. Mit den Fermifunktionen  $f_L(\varepsilon)$  und  $f_R(\varepsilon)$  sowie der Geschwindigkeit  $v(\varepsilon) = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{dk}$  erhält man schließlich [17]:

<sup>1</sup>jeder Zustand kann von  $\uparrow$  und  $\downarrow$  besetzt werden.

$$\begin{aligned}
I &= e \int_0^\infty v(E)D(E)f_l(E) dE - e \int_0^\infty v(E)D(E)f_r(E) dE \\
&= e \int_{\mu_r}^{\mu_l} \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \frac{1}{\pi} \frac{dk}{dE} dE \\
&= 2 \frac{e^2}{h} V_{SD} = g_0 V_{SD}.
\end{aligned} \tag{2.4}$$

Hier bezeichnet  $V_{SD} = e(\mu_l - \mu_r)$  die Spannungsdifferenz zwischen dem linken und dem rechten Reservoir.

Der Proportionalitätsfaktor  $g_0 = 2 \frac{e^2}{h}$  heisst Leitwertquantum. Für einen wahrhaft eindimensionalen Quantendraht ist also der Leitwert  $G = \frac{dI}{dV_{SD}} = g_0$  konstant, sobald Elektronen in den Reservoirs die nötige Energie besitzen durch den Kanal zu propagieren. Dazu müssen sie mindestens die Energie des transversalen Grundzustands an der engsten Stelle des Drahtes besitzen. Eine variierende Kanalbreite führt somit zu einem effektiven Potential für propagierende Teilchen.

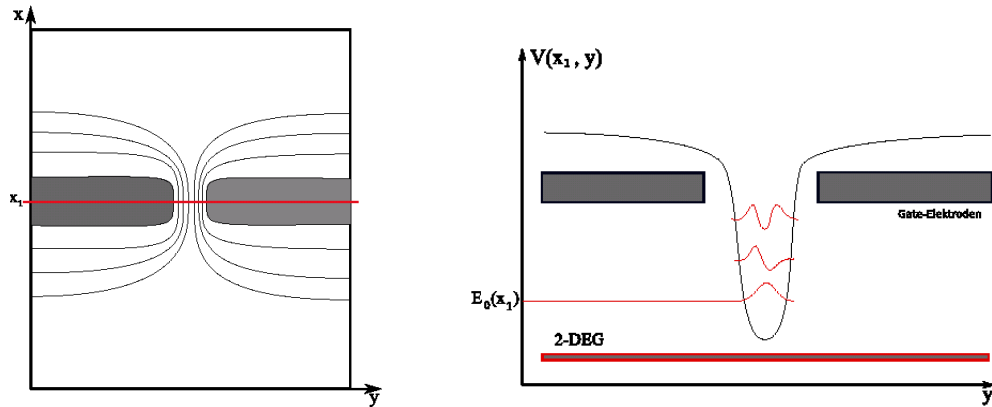
Der Strom ändert sich linear mit der angelegten Spannung. Dass der Integrand in Gl. (2.4) nicht von der Energie der Teilchen abhängt, ist ein bemerkenswertes Ergebnis. Dem zugrunde liegt die Tatsache, dass sich  $\frac{dE}{dk}$  im Geschwindigkeitsterm und  $\frac{dk}{dE}$  in der eindimensionalen Zustandsdichte gegenseitig aufheben. Anders ausgedrückt: Erhöht man  $V_{SD}$  um konstante Intervalle, erhöht also z.B.  $\mu_l$  um ein konstantes  $\Delta\mu_l$ , so werden wegen der Abnahme der Zustandsdichte mit steigender Energie (Gl.2.3) jedesmal weniger Zustände zusätzlich im Kanal besetzt. Andererseits besitzen diese Zustände aber auch eine höhere Energie und damit eine höhere Geschwindigkeit. Diese beiden Effekte löschen sich gegenseitig aus.

Für die Berechnung der Zustandsdichte im Quantenkanal (Gl. (2.3)) sind wir von einem wahrhaft eindimensionalen System ausgegangen, d.h. an jedem Orts des Drahts war in transversaler Richtung nur ein Zustand besetzbar. In einem realen mesoskopischen Quantenkanal existieren jedoch deutlich mehr transversale Zustände, deren Energiequantelung durch die Breite des Kanals gegeben ist. Die Fermienergie der Reservoirs gibt an, wie viele dieser Energieniveaus, den sogenannten Moden, von propagierenden Elektronen bevölkert werden können. Da Gl. (2.4) für jede dieser Moden gilt, erhält man für den Strom durch einen realen Quantendraht:

$$I = N g_0 V_{SG}. \tag{2.5}$$

$N$  gibt nun die Anzahl stromtragender Moden im Kanal an. Diese Anzahl ist über die Kanalbreite bestimmbar. Je breiter der Kanal, desto mehr Moden werden besetzt.

Die erste experimentelle Bestätigung dieser Formel gelang Van Wees et al. (1988) [6]. Dazu verwendeten sie eine GaAs-AlGaAs Heterostruktur, um ein 2-DEG zu erzeugen. An Gate-Elektroden, die über dem Elektronengas angebracht waren, wurde eine negative Gatterspannung  $V_g$  angelegt, um die Elektronen darunter zu verdrängen. Abb. 2.1(a) zeigt schematisch die Äquipotentiallinien und den daraus entstehenden Kanal. In Abb. 2.1(b) wird der Querschnitt an der engsten Stelle  $x_1$  des Kanals gezeigt. Die Energie der transversalen Zustände bestimmt die lokale Höhe der effektiven Potentiale der Moden.

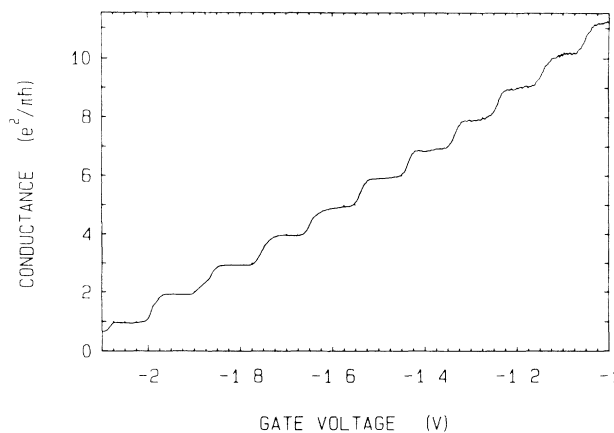


(a) Schematische Darstellung der Aufsicht auf den experimentellen Aufbau von van Wees et al.: Über einem 2-DEG werden Gates mit variabler negativer Spannung angebracht, die zu einer Verdrängung der Elektronen führt. Das Bild zeigt die dadurch entstehenden Äquipotentiallinien. Es bildet sich ein enger, eindimensionaler Kanal, der die entstandenen Reservoirs (oben und unten) verbindet.

(b) Querschnitt von 2.1(a) an der engsten Stelle des Kanals: Durch die Begrenzung der Wellenfunktion in Transversalrichtung bilden sich gequantelte Energieniveaus aus, sogenannte Moden. Zur Durchquerung des Kanals muss ein Elektron klassisch mindestens die Energie der Grundmode besitzen. Quantenmechanisches Tunneln weicht diese Bedingung leicht auf.

**Abbildung 2.1:** Schematische Darstellungen eines QPC

Durch das Anlegen der negativen Gatterspannung  $V_g$  erhält man zwei Elektronenreservoirs, die durch einen engen Kanal verbunden sind. Die Variation von  $V_g$  variiert die Breite des Kanals und damit die Energie der Moden im Kanal. Der Leitwert als Funktion von  $V_g$  ist in Abb. 2.2 gezeigt. Man erkennt deutlich die Leitwertplateaus bei Vielfachen von  $g_0$ , woraus man direkt die Anzahl stromtragender Moden ablesen kann. Den Bereich der Übergangs von Null auf eine Mode nennt man den Pinchoff.

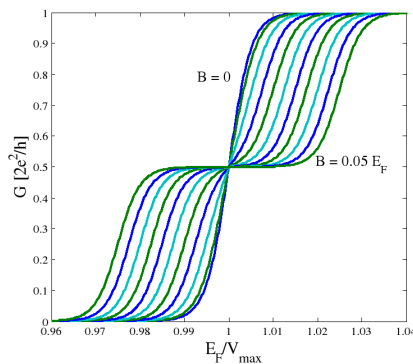


**Abbildung 2.2:** Leitwertquantisierung

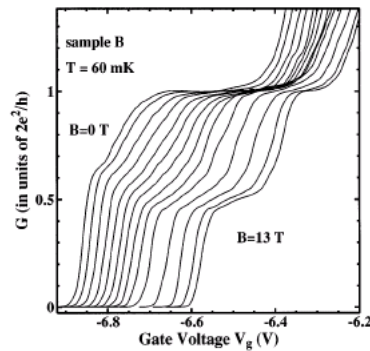
## 2.3 Die 0.7 Anomalie

Bei genauerem Hinsehen fällt im Leitwertplot von Abb. 2.2 auf, dass die Leitwertkurve am Übergang von einem geschlossenen Kanal zu einer besetzten Mode abgeschnitten wurde. Die Ursache hier war eine Fehlerinterpretation der Ergebnisse, die obwohl sie einem neuen Effekt zeigten als falsch angesehen wurden. Schon die zweite Stufe zeigt keinen glatten Übergang von  $g_0$  nach  $2g_0$ , sondern eine weitere kleine Zwischenstufe bei etwa  $1.7g_0$ . In der ersten Stufe ist dieser Effekt noch verstärkt. Ein schulterförmiges Zwischenplateau zeigt sich bei  $\sim 0.7g_0$ . Diese unerwartete Anomalie assoziierten Van Wees et al. mit einer Verunreinigung in ihrer Probe bzw mit Rückstreuungseffekten am Kanaleingang oder im Kanal selbst und zeigten nur die verlässlichen Daten ab der zweiten Stufe.

Erst im Verlauf der weiteren Forschung, stellte sich heraus, dass es sich hierbei um einen echt neuen Effekt handelte: die 0.7 Anomalie. 1996 wurde die Struktur erstmal in einer Veröffentlichung erwähnt. Thomas et al. hatten bei Messungen des Leitwerts in einem eindimensionalen Kanal generisch die Zwischenstufe bei  $0.7 g_0$  beobachtet und Magnetfeld-, sowie Temperaturabhängigkeit untersucht [11].



(a) Der erwartete Leitwert als Funktion von  $\frac{E_F}{V_{max}}$  für unterschiedliche Magnetfelder im Bereich der ersten Stufe. Das Minimum der Steigung im Bereich des Pichoffs ist durchgehend bei  $0.5 \frac{e^2}{h}$ . Der energetische Abstand der Leitwertabschnürungen beider Submoden ist durch die Zeemanaufspaltung  $\Delta E = B$  gegeben.  $V_{max}$  im Bild bezeichnet den Wert der Gatterspannung, an dem das Maximum des effektiven Potentials die Fermienergie erreicht.



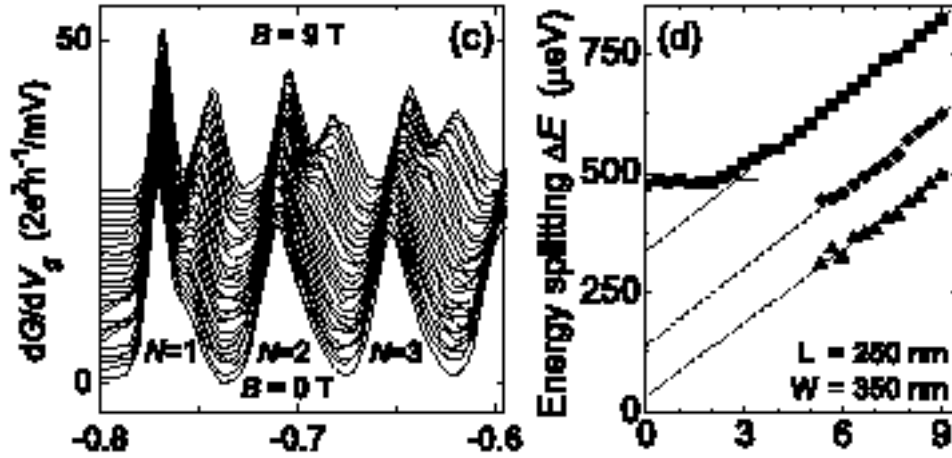
(b) Magnetfeldabhängigkeit der 0.7 Anomalie nach Thomas et al [11]:

Im Kanal wird ein Magnetfeld  $\mathbf{B} \parallel \mathbf{I}$  angelegt. Die 0.7 Anomalie entwickelt sich von 'oben' herab in eine spin-aufgelöste Stufe bei  $0.5 \frac{e^2}{h}$ . In diesem Plot wurden die Leitwertkurven in  $V_g$ -Richtung gegeneinander verschoben, um sie deutlicher voneinander abzuheben.

Abbildung 2.3: Magnetfeldabhängigkeit des Leitwerts

### Magnetfeldabhängigkeit der 0.7 Anomalie

Um die Magnetfeldabhängigkeit der Struktur zu untersuchen wurde im Kanal ein Magnetfeld parallel zum Strom angelegt. Diese Ausrichtung von  $\mathbf{B}$  führt zu einer Aufspaltung jeder



**Abbildung 2.4:** Die Bestimmung des effektiven g-Faktors nach [19]. links: Die Steigung des Leitwertes als Funktion der Gatterspannung. Die zwei Maxima einer jeden Mode bestimmen  $\Delta E$ . rechts: Die Auftragung des Magnetfelds gegen die Submoden-Aufspaltung. Die Steigung bestimmt den effektiven g-Faktor. Der endliche Ordinatenabschnitt  $\Delta E_0$  ist eine Folge der 0.7 Anomalie bei verschwindendem Magnetfeld und endlicher Temperatur.

Mode in zwei Submoden, bevölkert von Elektronen mit Spin  $\mathbf{S}$  parallel zu  $\mathbf{B}$  (Submode 1) und Elektronen mit Spin antiparallel zu  $\mathbf{B}$  (Submode 2). Die Elektronen in Submode 1 sehen durch die lokale Zeeman-Energie im Bereich des Magnetfelds ein erniedrigtes, die in Submode 2 ein erhöhtes effektives Potential, sodass der erwartete Leitwert eine Zwischenstufe bei  $G = 0.5 \frac{e^2}{h}$  entwickeln sollte. Bei Erniedrigung von  $V_g$  wird erst der Leitwert in Submode 2, später dann der in Submode 1 abgeschnürt. Eine 0.7 Anomalie ist nicht zu erwarten. Sie ist insbesondere in einem theoretischen physikalischen Einteilchenmodell nicht reproduzierbar. Dies wird in Abb. 2.3(a) gezeigt, die ohne Wechselwirkungseffekt mit der im folgenden Kapitel dargestellten Methode generiert wurde. Es gilt als gesichert, dass die 0.7 Leitwert-Anomalie eine Folge der Wechselwirkung im Kanal ist [18].

Die experimentellen Ergebnisse von Thomas et al zeigen bei  $B = 0$  eine generische Anomalie bei  $0.7 \frac{e^2}{h}$ , die sich mit steigendem Magnetfeld in eine spin-aufgelöste Stufe bei  $0.5 \frac{e^2}{h}$  entwickelt.

### 2.3.1 Der g-Faktor

Die Aufspaltung der Moden im Magnetfeld ist durch die Wechselwirkung stark erhöht. Während in einem nicht-wechselwirkenden Modell eine Zeeman-Aufspaltung  $\Delta E = B$  auftritt zeigen Experimente eine bis zu dreifach erhöhte Aufspaltung [19]. Für große Magnetfelder wächst  $\Delta E$  auch mit Wechselwirkung linear in  $B$ :

$$\Delta E = g^* B. \quad (2.6)$$

Der Proportionalitätsfaktor wird effektiver g-Faktor genannt. Er ist von der Stärke der Wechselwirkung im Kanal abhängig.



### Temperaturabhängigkeit der 0.7 Anomalie

Die Form des Leitwerts ändert sich mit zunehmender Temperatur. Die Fermifunktionen  $F_{L,R}(\varepsilon)$  im Integranden von Gl. (2.4) gehen von  $\Theta$ -Funktionen bei  $T = 0$  zu

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{1 + e^{\frac{1}{k_B T}(\varepsilon - \varepsilon_F)}} \quad (2.7)$$

über, d.h die Stufe ist um  $\varepsilon_F$  thermisch um  $k_B T$  verbreitert, siehe Abb. 2.5(a). Für die Berechnung des linearen Leitwerts gemäss Gl. (2.4) lässt sich die Differenz der Reservoir-Fermifunktionen als

$$f_L(\varepsilon) - F_R(\varepsilon) \approx \frac{df}{d\varepsilon}$$

schreiben. Mit der Annahme einer energieunabhängigen Transmission wird der lineare Leitwert bei endlichen Temperaturen zu

$$\frac{G(T)}{G(T=0)} = \frac{1}{1 + e^{\frac{1}{k_B T}(E - E_F)}}. \quad (2.8)$$

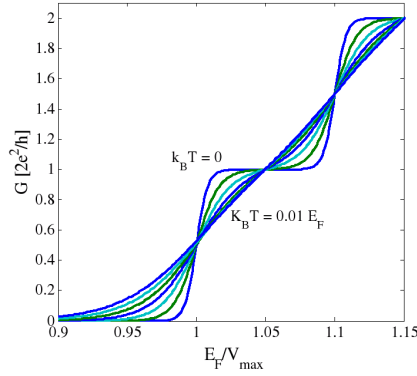
Experimentelle Messungen bestätigen diese Näherung nur zu einem gewissen Grad. Zum einen verschmieren die Leitwertplateaus erwartungsgemäss bei ganzzahligen Vielfachen von  $g_0$ , zum anderen wird die 0.7 Anomalie mit zunehmender Temperatur immer präsenter. Selbst im Bereich von mehreren Kelvin sieht man die schulterartige Zwischenstufe, während das restliche Profil des Leitwerts von der Temperatur schon nahezu komplett zerstört wurde, vgl. 2.5(b). Der Effekt scheint nicht nur sehr robust gegenüber Temperaturerhöhung zu sein (schon das wäre bemerkenswert), sondern sich mit steigender Temperatur sogar noch zu verstärken.

Der Temperaturmessung sind Grenzen gesetzt. Derzeit sind Messungen bei Temperaturen um die  $\approx 10$  mK möglich, doch schon diese sind mit großem Aufwand verbunden. Die Entwicklung der 0.7 Anomalie bei noch tieferen Temperaturen ist bislang experimentell nicht überprüft. Es scheint aber wissenschaftlicher Konsens zu sein, dass bei  $B=T=0$  keine 0.7 Anomalie auftritt. So lässt unter anderem auch der temperaturabhängige Leitwertplot von Thomas et al (Abb.2.5(b)) darauf schliessen, dass die Anomalie mit kleinerem  $T$  immer schwächer wird, bis sie im Limes  $T \rightarrow 0$  ganz verschwindet..

## 2.4 Der Kondoeffekt in einem ausgedehnten Metall

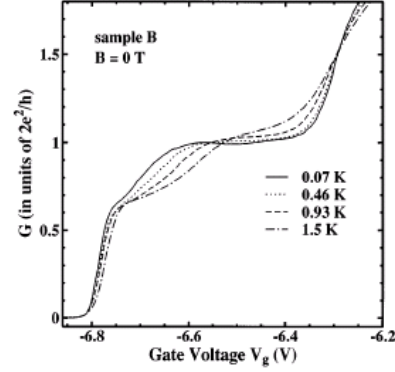
Damit an einer metallischen Probe ein Widerstand abfällt müssen Ladungsträger gestreut werden. Diese Streuung geschieht hauptsächlich an Phononen und Störstellen. Man erhält für den elektrischen Widerstand bei tiefen Temperaturen

$$\rho(T) = \rho_{st} + \rho_{ph} = \rho_{st} + aT^5 \quad (2.9)$$



(a) **Schematische Temperaturabhängigkeit des Leitwerts nach Gl. (2.8):**

Eine endliche Temperatur verbreitert die Stufe der Fermifunktion um die Größenordnung  $k_B T$ . Als Folge verschmieren die Leitwertplateaus mit zunehmender Temperatur mehr und mehr.



(b) **Temperaturabhängigkeit der 0.7 Anomalie nach Thomas et al:**

Durch Erhöhen der Temperatur verstärkt sich die 0.7 Anomalie und wird nach und nach zur ausgeprägtesten Struktur in  $G(V_g)$

**Abbildung 2.5: Temperaturabhängigkeit des Leitwerts**

Diese Beziehung nennt man die Matthiesensche Regel [1]. Für hohe Temperaturen steigt der Widerstand linear mit  $T$  an.

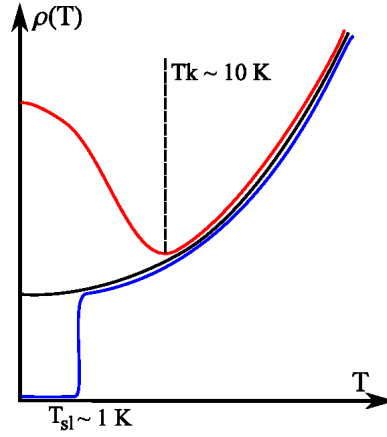
1934 fanden de Haas et al. ein untypisches Verhalten des Widerstands für tiefe Temperaturen [20]. In einer Goldprobe zeigte sich ein Minimum des Widerstands im phononendominierten  $T^5$ -Regime bei ungefähr 10K, gefolgt von einem Anstieg der Widerstandskurve bei tieferen Temperaturen. Insbesondere lag der Sättigungswert bei  $T = 0$  weit über dem erwarteten Wert. Eine spätere Untersuchung der Probe zeigte leichte Verunreinigungen mit Cobalt, die wie sich später herausstellen sollte die Ursache dieses Verhaltens waren.

Zahlreiche Experimente bestätigten in der Folge ihre Entdeckung. Entscheidend für das anormale Verhalten schien die Tatsache, dass die Verunreinigungen in der Probe magnetisch waren, dass also eine ungerade Anzahl von Valenzelektronen in den Störatomen vorlag.

Ein theoretisches Modell zur Erklärung des Effekts wurde erst 1964 von Jun Kondo formuliert [9]. Er betrachtete einen lokalisierten Spin, also eine magnetische Verunreinigung, und ließ diesen mit den Spins der Leitungselektronen wechselwirken. Der zugehörige Hamiltonian lässt sich in zweiter Quantisierung als

$$H_{Kondo} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + J(\mathbf{S}_{\text{imp}} \cdot \mathbf{S}_c) \quad (2.10)$$

schreiben. Während der erste Term in Gl. (2.10) die Dispersionsrelation der Leitungselektronen im Metall repräsentiert beschreibt der zweite Teil die Kopplung zwischen dem lokalisierten Defektspin ( $\mathbf{S}_{\text{imp}}$ ) und dem Spin der Leitungselektronen am Ort des Defektes ( $\mathbf{S}_c$ ). Die Stärke der Kopplung wird durch  $J < 0$  gegeben.



**Abbildung 2.6: Der elektrische Widerstand eines Metalls für tiefe Temperaturen:** In schwarz der Widerstand nach der Matthiasschen Formel, in rot der Verlauf für ein Metall mit magnetischen Verunreinigungen (Kondoeffekt), in blau der Verlauf für einen Supraleiter

Störungstheoretische Rechnungen an diesem Modell zeigen in zweiter Ordnung ein logarithmische Divergenz des Widerstands bei  $T = 0$ , sodass sich der Widerstand in Erweiterung zu Gl. (2.9) als

$$\rho(T) = \rho_{st} + c \log \frac{T_K}{T} + aT^5 \quad (2.11)$$

schreiben lässt. Kondo betrachtete dazu die Streuung eines Leitungselektrons im Zustand  $|k, \downarrow\rangle$  an einer magnetischen Störstelle im Zustand  $|\uparrow\rangle$  [21]. In einem ersten Streuprozess geht das Leitungselektron in den Zustand  $|k'', \uparrow\rangle$  und die Störstelle in den Zustand  $|\downarrow\rangle$  über, d.h. die Störstelle erfährt einen Spin-Flip. In einem zweiten Prozess werden die finalen Zustände  $|k', \downarrow\rangle$  und  $|\uparrow\rangle$  angenommen.

Die Übergangsamplitude eines solchen Streuprozesses erhält man störungstheoretisch durch Aufsummierung aller Impulse  $k''$  des Zwischenzustands

$$w_{k \rightarrow k'}^{(2)} = \sum_{k''} \frac{\langle k', \downarrow; \uparrow | J | k'', \uparrow; \downarrow \rangle \langle k'', \uparrow; \downarrow | J | k, \downarrow; \uparrow \rangle}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k''}}. \quad (2.12)$$

Unter der Voraussetzung einer konstanten Kopplung  $J$  und beim Übergang der Summe in ein Integral erhält man für eine konstante Zustandsdichte  $\rho(\varepsilon_{k''})$

$$w_{k \rightarrow k'}^{(2)} = J^2 \rho \int_{\varepsilon_F}^D \frac{1}{\varepsilon_k - \varepsilon_{k''}} d\varepsilon_{k''} = J^2 \rho \log \left| \frac{\varepsilon_k - \varepsilon_F}{\varepsilon_k - D} \right|. \quad (2.13)$$

Um die komplette Wahrscheinlichkeit zu berechnen ein Leitungselektron mit initialem  $k$  und finale  $k'$  zu finden muss man zu 2.13 noch das Matrixelement  $w_{k \rightarrow k'}^{(1)} = \langle k', \downarrow; \uparrow | k, \downarrow; \uparrow \rangle = J$ ,

also den zugehörigen Streuprozess erster Ordnung addieren und das Betragsquadrat bilden. Man erhält

$$W_{k \rightarrow k'} = J^2 + 2J^3 \rho \log \left| \frac{\varepsilon_k - \varepsilon_F}{\varepsilon_k - D} \right| + \mathcal{O}(J^4). \quad (2.14)$$

Zum Transport tragen nur Elektronen in einem Bereich  $k_B T$  um  $\varepsilon_F$  bei. Die Korrektur des Widerstands durch einen Beitrag zweiter Ordnung wird damit zu

$$R(T) = R^{(1)} \left( 1 + 2J\rho \log \left| \frac{k_B T}{D - \varepsilon_F} \right| \right) \quad (2.15)$$

Berücksichtigt man Streuprozesse höherer Ordnung, so erhält man Terme der Form

$$\left[ J\rho \log \left| \frac{k_B T}{D - \varepsilon_F} \right| \right]^m, \quad m > 1 \quad (2.16)$$

Wie der zweite Term in Gl. (2.15) divergieren diese Terme und führen zu der unphysikalischen Voraussage eines unendlich hohen Widerstands am Temperaturnullpunkt. Grund dafür ist ein Versagen der Störungstheorie ab der Energieskala

$$T_K \sim (D - \varepsilon_F) e^{\frac{1}{J\rho}}, \quad (2.17)$$

der sogenannten Kondotemperatur.

Die Sättigung des Widerstands für  $T \rightarrow 0$  lässt sich in einem einfachen Bild verstehen: Ein Absenken der Temperatur verringert die thermische Bewegung der Leitungselektronen. Sie lokalisieren sich an der Störstelle mit entgegengesetztem Störstellenspin, schirmen diesen (screening) ab und formen ein Singlet  $|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle$ . Da dieses Singlet einen Zustand bei  $E_F$  besetzt wirkt es für nachfolgende Leitungselektronen als Streukörper. Es bildet sich eine Wolke um die Störstelle, bis bei  $T = 0$  die magnetische Eigenschaft vollständig gescreent ist. Einlaufende Elektronen sehen nun einen ausgedehnten Streukörper, der einen erhöhten Widerstand hervorruft. .

Viele weitere Forschungsarbeiten haben sich in den letzten Jahren mit einer exakteren Beschreibung des Kondoeffekts beschäftigt und viele neue Einsichten gewonnen, z. B. beim sogenannten Multichannel Kondoeffekt [22] [23] [24] [25] [26].

## 2.5 Der Quantendot

Schränkt man ein System in allen drei Raumrichtungen auf einer Längenskala im  $nm$ -Bereich ein, so besitzen die Eigenzustände gequantelte Energieniveaus. Lässt sich die Besetzung des Systems durch Regulierung eines Parameters kontrollieren, so spricht man von einem Quantendot (QD) oder einem künstlichen Atom. Es handelt sich also um ein Modellsystem, dessen

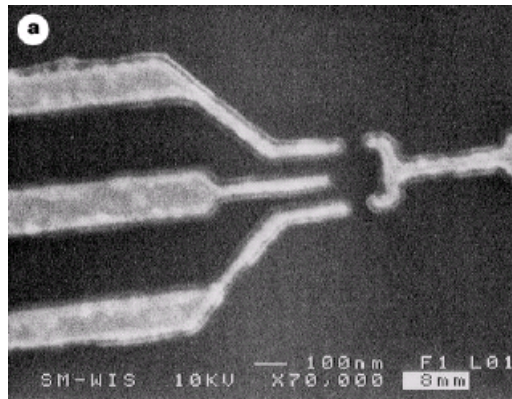


Abbildung 2.7: Typische Gatterstruktur zur Erzeugung eines Quanten Dot [27]

Erforschung die Möglichkeit offenbart grundlegende Phänomene zu verstehen. Die Beeinflussung der Besetzung erfordert eine starke Kopplung des QD's an seine Umwelt.

Einen QD erhält man, indem man die Gatterspannung über einem 2-DEG so justiert, dass im effektiven Potential ein lokales Minimum entsteht. Sind die Flanken um das Minimum nicht zu hoch bzw. breit ist eine Kopplung gewährleistet. Eine typische Gatterstruktur oberhalb eines 2-DEG zur Erzeugung eines QD ist in Abb. 2.7 gezeigt [27]. Das mittlere von links ins Bild kommende Gatter (dessen Spannung wird ab jetzt mit  $V_g$  bezeichnet) regelt die Tiefe des Dots, die beiden parallelen Gatter oben und unter die Höhe der Wände.

### 2.5.1 Der Kondoeffekt im QD

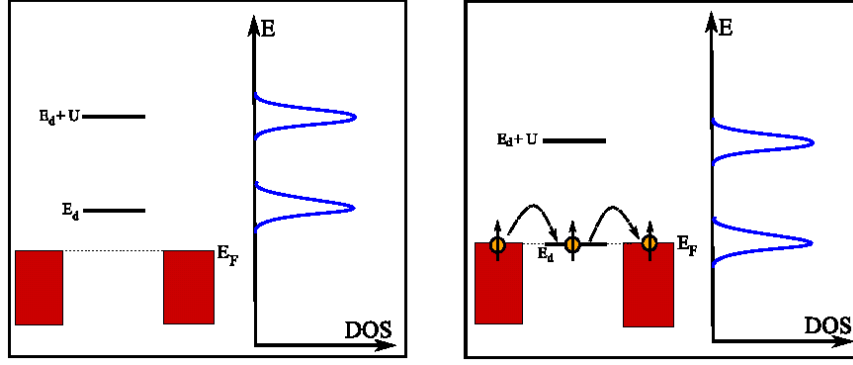
Stellt man  $V_g$  so ein, dass eine ungerade Anzahl Elektronen im Dot gebunden ist, so trägt dieser einen lokalisierten Spin  $\mathbf{S} = \frac{1}{2}$ . Wie in einem ausgedehnten Metall führt dies zur Ausbildung des Kondoeffekts, also einer Kondoresonanz an der Fermienergie. Allerdings zeigt der Leitwert durch einen QD im Kondoregime das entgegengesetzte Verhalten wie der Leitwert im einem ausgedehnten Metall. Er nimmt seinem Maximalwert an. Der Dot wird komplett durchlässig.

### Das Single Impurity Anderson Modell (SIAM)

Das einfachste Modell zur Beschreibung eines Quantendots mit nur einem Level, also einem Zustand, ist das SIAM (Single Impurity Anderson Model), das Phil Anderson in den 60er Jahren aufstellte [28][29]:

$$H_{SIAM} = H_d + H_l + H_{ld} = \underbrace{\sum_{\sigma} \varepsilon_d d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}}_{H_d} + \underbrace{\sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma}}_{H_l} + \underbrace{\sum_{k\sigma} V_{k\sigma} (c_{k\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + h.c.)}_{H_{ld}}. \quad (2.18)$$

Hier erzeugt/vernichtet  $d_{\sigma}^{\dagger}/d_{\sigma}$  ein Elektron auf dem Dotlevel mit Energie  $\varepsilon_d$  und  $c_{k\sigma}^{\dagger}/c_{k\sigma}$  erzeugt/vernichtet ein Elektron in den Leads (= Reservoirs) mit Energie  $\varepsilon_k$ .  $V_{k\sigma}$  beschreibt die Kopplung des Dotlevels an die Zustände im Lead und  $U$  ist die Wechselwirkung zweier Elektronen im Dot, die sogenannte Ladungsenergie.



**Abbildung 2.8:**

**links:** Die Grundzustandsenergie  $\varepsilon_d$  des Dots liegt oberhalb von  $E_F + \Gamma$ . Der Dot ist leer, da die Zustandsdichte im Dot über die gesamte Breite der Leadbänder null ist. **rechts: Mixed valence regime.**  $\varepsilon_d$  ist im Bereich  $\Gamma$  um die Fermienergie. Elektronen können in den Dot hinein- und aus ihm heraustunneln. Die mittlere Besetzung  $\langle n_d \rangle$  liegt zwischen null und eins.

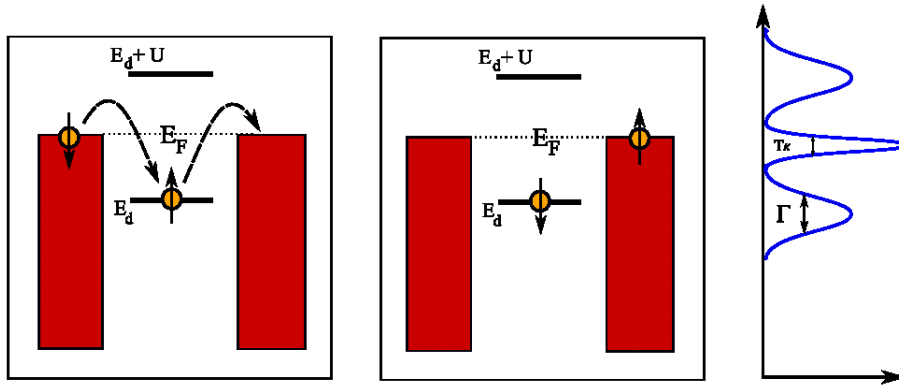
Das SIAM stellt einen Quantendot dar, der beidseitig durch  $V_{k\sigma}$  an Leads gekoppelt ist. Im Dot existieren die einfach besetzten entarteten Zustände  $|\uparrow\rangle$  und  $|\downarrow\rangle$  mit Energie  $\varepsilon_d$ , sowie der doppelt besetzte Zustand  $|\uparrow\downarrow\rangle$  mit der Energie  $E_d + U$ .  $U$  beschreibt hierbei die Coulomb-Abstoßung der beiden Elektronen im Dot, die sogenannte Ladungsenergie. Die Kopplung an die Leads verbreitert die Zustände im Dot, vgl. Abb. 2.8. Benutzt man Fermis goldene Regel, so erhält man für die Levelbreite  $\Gamma$ :

$$\Gamma = \frac{2\pi}{h} \nu |V_k|^2, \quad (2.19)$$

wobei  $\nu$  die Zustandsdichte der Lead-Elektronen ist.

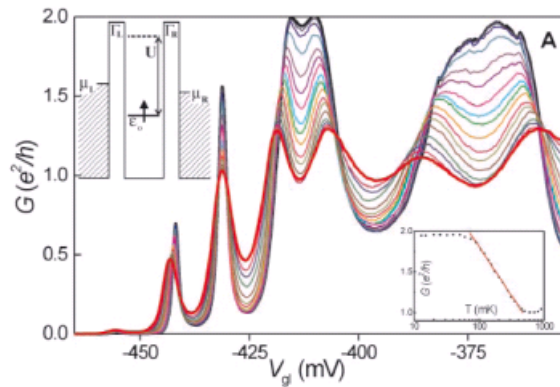
Liegt  $\varepsilon_d$  weit oberhalb von  $E_F$ , so ist der Dot leer. Kein Elektron im Fermisee besitzt die Energie ihn zu besetzen. Senkt man  $\varepsilon_d$  in den Energiebereich  $E_F + \Gamma$  kann der Dot von einem Elektron besetzt werden. Die Levelbreite  $\Gamma$  im Dot führt in diesem Regime dazu, dass die Zustandsdichte  $D_d(E)$  im Dot an der Fermikante ungleich null ist. Elektronen können deshalb in den Dot hinein- und aus ihm heraustunneln. Da  $\varepsilon_d + U$  aber weit oberhalb von  $E_F$  liegt ist die Besetzung maximal eins. Die mittlere Besetzung  $\langle n_d \rangle$  wächst mit sinkendem  $\varepsilon_d$ , bis sie bei  $\varepsilon_d \approx E_F - \Gamma$  den Wert eins erreicht. Man spricht vom ‘mixed valence regime’, da die Ladung des Dots mit unterschiedlichen Wahrscheinlichkeiten null oder eins ist.

Senkt man  $\varepsilon_d$  unter  $E_F - \Gamma$  ist die Zustandsdichte an der Fermienergie im Dot nahezu null. Ein Elektron kann zwar in den Dot hineintunneln, ist dort aber gefangen. Alle erreichbaren Zustände außerhalb des Dots sind besetzt. Im Dot befindet sich somit exakt ein Elektron, wir befinden uns im Kondoregime.

**Abbildung 2.9:**

**Der Dot im Kondoregime:** Das Dot-Elektron kann in das Lead tunneln, wenn ein Elektron aus dem Fermisee seinen Platz im Dot einnimmt. Es bildet sich ein Resonanz an der Fermienergie mit der Breite  $T_K$  im Dot, die zu maximalem Transport führt. Der Dot wird maximal transparent.

Die Heisenbergsche Unschärferelation  $\Delta E \Delta t \approx \hbar$  erlaubt es dem Dot-Elektron für einen kurzen Zeitraum einen Zwischenzustand im linken Lead mit einer Energie bei  $E_F$  einzunehmen. In diesem Zeitraum besetzt ein Elektron entgegengesetzten Spins (Ausbildung eines Singlets) aus dem Fermisee des rechten Leads den nun freigewordenen Dotzustand  $\varepsilon_d$ . Da der Dot bei diesem Prozess seine Spinorientierung ändern kann spricht man von Spin-Flip-Ereignissen. In höherer Ordnung ist ein zweiter Prozess, dem ersten folgend, möglich, bei dem beide Elektronen ihre Plätze tauschen. Diese Prozesse führen zu einer zusätzlichen starken Resonanz im Dot direkt an der Fermikante mit der Breite  $T_K$ . Die Spektralfunktion besitzt bei  $E_F$  den Wert eins, sodass der Leitwert seinen maximalen Wert annimmt. Der Dot zeigt an der Fermikante maximale Transmission.



**Abbildung 2.10: Der Leitwert als Funktion von  $V_g$  für verschiedene Werte der Temperatur.** Das Inlay unten rechts zeigt die Änderung des Leitwerts mit der Temperatur bei einer festen Gatterspannung  $V_g$ . Für kleine Temperaturen besitzt  $G(T)$  die Form einer Parabel.

Setzen wir per Konvention  $E_F = 0$ , so ist die Breite der Kondoresonanz und damit  $T_K$  durch

$$T_K = \frac{1}{2} \sqrt{\Gamma U} e^{\pi \frac{\varepsilon_d(\varepsilon_d + U)}{\Gamma U}} \quad (2.20)$$

gegeben, d.h.  $\log T_K$  besitzt die Form einer Parabel. In ihrem Minimum gilt  $\varepsilon_d = -\frac{U}{2}$ ,  $\varepsilon_d + U = \frac{U}{2}$ .

Abb. 2.10 zeigt den Leitwert in einem QD als Funktion der Gatterspannung  $V_g$ [27]. Es werden mehrere Kondoplateaus durchfahren, bei denen der Leitwert beinahe seinen Maximalwert annimmt. In den 'even valley's' dazwischen ist der Leitwert unterdrückt, da sich in diesem Regime eine gerade Anzahl von Elektronen im Dot befindet. Die Leitwertkurven unterschiedlicher Farbe gehören zu unterschiedlichen Temperaturen. Das Temperaturverhalten wird durch 2.20 beschrieben.

### 2.5.2 Die Phase

Wie oben beschrieben bewirkt die Kopplung zwischen dem Dotelektron und den Leadelektronen die Ausbildung eines Singlets im Dot

$$\Psi_{Kondo} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (2.21)$$

Streut ein Lead-Elektron mit  $\varepsilon_F$  an diesem Singlet, so erfährt es eine Phasenverschiebung.

Nach der Friedel Sum Rule lässt sich die Phase über die Besetzung ausdrücken[30][31]:

$$\begin{aligned} \delta_\uparrow &= \pi \langle n_\uparrow \rangle \\ \delta_\downarrow &= \pi \langle n_\downarrow \rangle. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Über diese Beziehung wird der Leitwert zu:

$$G = \frac{e^2}{h} (\sin^2 \delta_\uparrow + \sin^2 \delta_\downarrow). \quad (2.23)$$

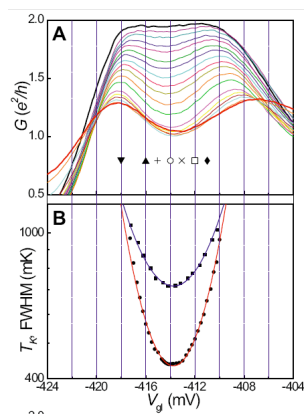
Folglich sammelt im Kondoregime ein Elektron beim Durchgang durch den Dot eine Phase von  $\frac{\pi}{2}$  auf.

### Magnetfeldabhängigkeit des Leitwerts im Kondoregime

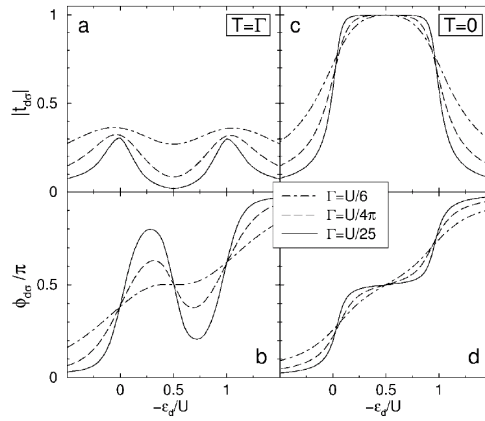
Der Leitwert nimmt im Kondoregime seinem Maximalwert  $G = 2\frac{e^2}{h}$  an. Die Wahrscheinlichkeit einer Rückwärtsstreuung für ein einlaufendes Elektron ist null.

Schaltet man ein Magnetfeld  $\mathbf{B} \parallel \mathbf{I}$  im Bereich des Dots ein, so wird der Leitwert unterdrückt, da die Entartung des Dotgrundzustands  $\varepsilon_d$  aufgehoben wird. Als Folge davon beträgt die Besetzung im Dot nicht mehr  $\langle N_\uparrow \rangle = \langle N_\downarrow \rangle = \frac{1}{2}$ . Es findet eine bevorzugte Besetzung mit spin-up Elektronen statt. Der Leitwert wird nach Gl. (2.23)





(a) **oben:** Der Leitwert als Funktion von  $V_g$  im Bereich eines Kondoplateau für verschiedene Werte der Temperatur [32]. Mit steigender Temperatur wird der Kondoeffekt zerstört. **unten:** Nach 2.20 besitzt der Logarithmus der Kondo-temperatur die Form einer Parabel.



(b) Die Phase im Kondoregime nach [30]

**Abbildung 2.11:** Magnetfeldabhängigkeit des Leitwerts im Kondoregime

$$G = \frac{e^2}{h} (\sin^2 \pi n_{\uparrow} + \sin^2 \pi n_{\downarrow}) < 2 \frac{e^2}{h}. \quad (2.24)$$

Das Verhalten des Leitwerts bei steigendem Magnetfeld entspricht dem des Leitwerts bei steigender Temperatur.



# 3 Das Modell

## 3.1 Vorbemerkung

Der folgende Abschnitt beschäftigt sich mit der Aufstellung eines theoretischen Modells zur Untersuchung der Physik in einem eindimensionalen System, einem sogenannten Quantenkanal. Eine geeignete Beschreibung des elektronischen Transports durch ein mesoskopisches System (beispielsweise in Molekülen oder Festkörpern auf kleiner Längenskala) findet sich in der sogenannten Tight-Binding Kette. Zur Modellierung des Quantendrahtes, sowie der angrenzenden Elektronenreservoirs des 2-DEG erweist sich eine unendlich lange Kette als das Mittel der Wahl. Dies hat einen unendlichen Hilbertraum zur Folge, der numerisch nicht handhabbar ist. Es wird gezeigt, wie durch die Projektion auf die Region des Potentials, den sogenannten Kontaktbereich, die Dimension des Hilbertraums auf einen wählbaren endlichen Wert gesenkt wird.

Obwohl der Hamiltonian, des in diesem Kapitel aufgestellten Modells, Wechselwirkung der Elektronen untereinander beinhaltet, wird deren genauer Einfluss erst in Kapitel 3 thematisiert. Der Wechselwirkungsanteil des Hamiltonian lässt sich nicht mehr (wie alle anderen Teile) durch eine Matrix darstellen. Vielmehr bildet er einen Tensor vierter Stufe. Während der Einfluss der unendlichen nicht wechselwirkenden Reservoirs noch exakt berechenbar ist, lässt sich die Folge aus der Interaktion der Elektronen nur mittel der funktionalen Renormierungsgruppe bestimmen.

## 3.2 Motivation

Unser Ziel ist es das Leitwertverhalten in einem Quantenkanal zu untersuchen. Die beiden Regime QD und QPC unterscheiden sich in der Form des Potentials entlang des Kanals. Ein Minimalmodell zur Beschreibung eines QD's ist das SIAM (Single Impurity Anderson Model), vgl. Kapitel 2,

$$H_{SIAM} = H_d + H_l + H_{ld} = \overbrace{\sum_{\sigma} \varepsilon_d d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}}^{H_d} + \overbrace{\sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma}}^{H_l} + \overbrace{\sum_{k\sigma} \Gamma_{k\sigma} (c_{k\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + h.c.)}^{H_{ld}}. \quad (3.1)$$

Entscheidend ist die Kopplung  $\Gamma_{k\sigma}$  des lokalisierten Levels an die Leads. Sie beschreibt die Tatsache, dass eine Überlagerung (bedingt durch die endliche Dicke und Höhe der Dotwände) zwischen einem lokalisierten Dotelektron und den unlokalisierten Zuständen der Leitungselektronen vorliegt. Mit anderen Worten: Elektronen können in den Dot hinein und aus ihm heraustunneln. Es zeigt sich, dass dieses einfache Modell alle grundlegenden Eigenschaften

eines QD's wiedergibt. Insbesondere ist eine sehr detaillierte Beschreibung der Eigenschaften des Kondoeffekts möglich.

Das SIAM liefert keine orts aufgelösten Informationen. Es beschreibt einen QD mit exakt einem Level. Dieses kann unbesetzt, einfach oder doppelt besetzt werden. Die einzige Information über die Struktur des Dots ist die Kopplung an das Leitungsband. Über den Potentialverlauf wird keine Aussage gemacht. Das SIAM ist damit ein echtes Minimalmodell. Es liefert die einfachste Beschreibung eines QD's.

Im Gegensatz zum QD besitzt das Potential eines QPC keine lokales Minimum, d.h. es gibt zwar Resonanzen oberhalb der Barriere, jedoch keine gebundenen Zustände wie im QD. Dieser Unterschied im Potentialverlauf bedingt eine grundlegende Veränderung der Physik: Im QD zeigen sich im Leitwert Kondoplateaus maximalen Leitwertes, wann immer eine ungerade Besetzung vorliegt. Bei gerader Besetzung wird der Leitwert komplett unterdrückt. Im QPC ist kein Kondoeffekt zu erwarten. Der Leitwert besitzt für ein Barrierenmaximum unterhalb der Fermienergie  $\varepsilon_F$  Werte um  $G = 2e^2/h$ . Schiebt sich das Potential über die Fermienergie, so wird der Leitwert exponentiell unterdrückt.

Ein Modell zur Beschreibung beider Potentialstrukturen sollte nach Möglichkeit Information über den Potentialverlauf im Kanal besitzen, der Hamilton sollte also eine Ortsdarstellung besitzen. Darüber hinaus muss in einem Bereich um die Barriere das Vorhandensein von Zuständen beliebiger Energie bis zu  $\varepsilon_F$  gewährleistet sein, um die einlaufenden Elektronen aus den Reservoirs zu darzustellen.

### 3.3 Der Modell-Hamiltonian

Ein Modell, dass beide Voraussetzungen erfüllt ist die Tight-Binding Kette, die sich in der Ortsbasis als

$$H_{TB} = -\mu \sum_j |j\rangle\langle j| - \tau \sum_j (|j\rangle\langle j+1| + |j+1\rangle\langle j|). \quad (3.2)$$

schreiben lässt. Die Matrixrepräsentation dieses Hamiltonians ist

$$\begin{pmatrix} -\mu & -\tau & 0 & \dots & 0 \\ -\tau & -\mu & -\tau & \dots & 0 \\ 0 & -\tau & -\mu & -\tau & 0 \\ 0 & 0 & -\tau & -\mu & -\tau \\ 0 & 0 & 0 & -\tau & -\mu \end{pmatrix}$$

Die Energie auf einer Site  $|j\rangle$  ist durch das chemische Potential  $\mu$  gegeben. Zwischen benachbarten Sites existiert eine Kopplung  $\tau$ . Für  $\tau = 0$  sind die Eigenzustände des Hamiltonian Ortseigenzustände, d.h. die Wellenfunktion eines Zustands wird durch eine Deltafunktion an einem Ort  $j$  repräsentiert. Die Energie des Zustands ist  $\mu$ .

Eine endliche Kopplung führt zu einer Delokalisierung der Energieeigenzustände. Mit endlicher Kopplung ist der Hamiltonian nicht mehr diagonal in der Ortsbasis. Durch Diagonalisierung erhält man die Eigenzustände<sup>1</sup> und die Dispersionsrelation der Kette:

$$\begin{aligned} |\omega_k\rangle &= \sum_j e^{ikj} |j\rangle \\ \omega(k) &= -\mu - 2\tau \cos k. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Setzt man o.B.d.A. das chemische Potential auf null, so liegen die Energien also zwischen  $-2\tau$  und  $2\tau$ . Die Kopplung bestimmt die Breite des Energiebands zu  $4\tau$ .

Für die Zustandsdichte der Kette erhält man

$$D(\omega(k)) = \frac{1}{\frac{d\omega(k)}{dk}} = \frac{1}{\sqrt{4\tau^2 - \omega(k)}}. \quad (3.4)$$

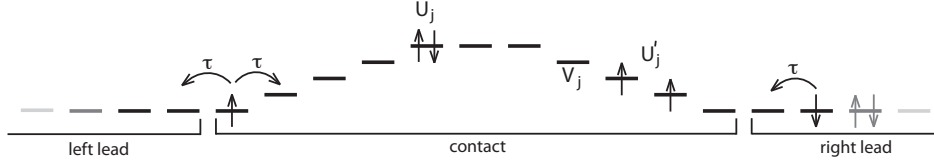
Sie divergiert an den Bandkanten. Um das Zentrum des Energiebands ist die Zustandsdichte besonders gering mit  $D(\omega = 0) = \frac{1}{2\tau}$ .

Die Definition  $\mu = 0$  impliziert halbe Füllung des Energiebands. Von  $-2\tau$  bis null sind Energieniveaus besetzt, darüber frei. Betrachtet man Elektronen mit Spin, so nimmt die lokale Dichte auf einer beliebigen Site  $j$  den Wert eins an.

Zur Simulation der realen Situation in einem Quantenkanal muss nun auf einem beschränkten Bereich der Kette ein lokales Potential  $V_j$  definiert werden. Da sowohl der Kondoeffekt im QD, als auch die 0.7 Anomalie im QPC Wechselwirkungseffekte sind und ein signifikantes Magnetfeldverhalten zeigen erlauben wir dort eine lokale Wechselwirkung  $U_j$  sowie ein lokales Magnetfeld  $h_j$  und führen Spin  $\sigma$  ein.

Im Bereich des Potentials nimmt die Dichte der Elektronen ab. Je höher die Barriere, desto weniger Elektronen besitzen die nötige Energie in diesen Bereich vorzudringen. Das Modell berücksichtigt diesen Sachverhalt, da die lokale Zustandsdichte der Form des Potentials folgt. In Bereichen verschwindenden Potentials liegt das Band symmetrisch um  $\mu = 0$ . Dort existiert, wie oben beschrieben, halbe Füllung  $n_j = 1$ . Auf Sites mit  $V_j \neq 0$  verschiebt sich das Band um  $V_j$ . Übersteigt das lokale Potential den Wert halber Bandbreite, also  $V_j > 2\tau$ , so liegt die untere Bandkante oberhalb der Fermienergie  $\varepsilon_F = \mu = 0$  und die lokale Dichte beträgt Null. Somit ist eine realistische Beschreibung des Systems garantiert. Für eine endliche Kette sind die Energien gequantelt. Erst im Limes  $N \rightarrow \infty$  erhält man ein kontinuierliches Energiespektrum. Für eine realistische Simulation des Kanals ist dies unbedingt notwendig, da in den Elektronenreservoirs rechts und links des Kanals kontinuierliche Zustände vorherrschen. Da es numerisch nicht möglich ist ein unendliches System zu behandeln muss man den unendlichen Hilbertraum der Ortseigenzustände auf einen endlichen Unterraum projizieren. Würde man den Hamiltonian einfach abschneiden, erhielte man ein System mit reflektierenden Randbedingungen. Eine Untersuchung des Leitwert wäre somit nicht mehr möglich, wie später in diesem

<sup>1</sup>Es handelt sich hierbei um Bloch Zustände [33]



**Abbildung 3.1: Das Modell:** Hier eine schematische Darstellung des Modells, das aus zwei Bereichen besteht. In der Mitte ist die Kontaktregion dargestellt, in der das Potential modelliert wird. Sie ist am Rand an zwei unendliche Lead-Ketten gekoppelt, die die Reservoirs darstellen

Kapitel erläutert wird. Deshalb unterteilen wir den Hamiltonian in eine Kontakt- und eine Leadregion, vgl Abb. reffig:model. Der Kontakt beschreibt den Bereich des Kanals bzw. der Potentialbarriere, während der Leadhamiltonian die Reservoirs simuliert. Er besteht aus zwei halb-unendlichen nichtwechselwirkenden Tight-Binding Ketten und gewährleistet so eine kontinuierliche Verteilung der Energien. Wie sich zeigen wird erlaubt die unendliche Ausdehnung der Lead-Ketten eine exakte analytische Berechnung ihres Einflusses auf die Kontaktregion. In zweiter Quantisierung nimmt der entgeltige Hamiltonian unseres Modells die Form

$$H = H_k + H_{lk} + H_l + H_{int} \quad (3.5a)$$

an. Die einzelnen Anteile des Hamiltonian schreiben sich dabei wie folgt:

$$H_k = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left[ \sum_{j=-\frac{N}{2}+1}^{\frac{N}{2}} (V_j - \mu - \frac{\sigma h_j}{2}) d_{j,\sigma}^\dagger d_{j,\sigma} - \sum_{j=-\frac{N}{2}+1}^{\frac{N}{2}-1} \tau (d_{j+1,\sigma}^\dagger d_{j,\sigma} + h.c.) \right]. \quad (3.5b)$$

$N$  ist die Anzahl der Sites in der Kontaktregion;  $d_{j,\sigma}$  ( $d_{j,\sigma}^\dagger$ ) ist der Vernichtungsoperator (Erzeugungsoperator) eines Zustands mit Spin  $\sigma$  an Site  $j$ .  $\mu$  ist das chemische Potential und  $V_j$  das ortsabhängige Potential. Bei der Größe  $h_j$  handelt es sich um das ortsabhängige Magnetfeld.

$$H_l = - \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{s=L,R} \sum_{j=1}^{\infty} \left[ \mu c_{j,s,\sigma}^\dagger c_{j,s,\sigma} + \tau (c_{j+1,s,\sigma}^\dagger c_{j,s,\sigma} + h.c.) \right] \quad (3.5c)$$

$c_{j,s,\sigma}$  ( $c_{j,s,\sigma}^\dagger$ ) vernichten (erzeugen) ein Elektron mit Spin  $\sigma$  am linken ( $s = L$ ) bzw. rechten ( $s = R$ ) Lead auf Site  $j$ . Die beiden Lead-Ketten schließen an den Potentialbereich bei Site 1 an und erstrecken sich von dort ins Unendliche. Die Breite der Energiebänder der Leads ist  $4\tau$ . Deshalb legen wir über  $\tau$  die Energieskala, in der das System betrachtet werden soll fest. Alle anderen Energien werden in Einheiten von  $\tau$  gemessen.

$$H_{lc} = -\tau_{lc} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left( c_{1,L,\sigma}^\dagger d_{-\frac{N}{2}+1,\sigma} + d_{\frac{N}{2},\sigma}^\dagger c_{1,R,\sigma} + h.c. \right), \quad (3.5d)$$

koppelt die Leads mit der Kontaktregion.

$$H_{int} = \sum_{j=-\frac{N}{2}+1}^{\frac{N}{2}} U_j n_{j,\uparrow} n_{j,\downarrow} + \sum_{\sigma,\sigma'=\uparrow,\downarrow} \sum_{j=-\frac{N}{2}+1}^{\frac{N}{2}-1} U'_j n_{j,\sigma} n_{j+1,\sigma'} \quad (3.5e)$$

$n_{j,\sigma}$  zählt die ersetzten Zustände auf Site  $j$  mit Spin  $\sigma$ .  $U_j$  definiert eine lokale Wechselwirkung zwischen zwei Zuständen auf der Site  $j$  und  $U'_j$  beschreibt eine Wechselwirkung von Elektronen auf benachbarten Sites.

### 3.4 Die Projektion auf den Kontaktbereich - Die Selbstenergie

Die Eigenfunktionen des Hamiltonoperators erhält man über die Greensche Funktion

$$\mathcal{G} = [\omega - H]^{-1} \quad (3.6)$$

Doch die Matrix  $\omega - H$  ist unendlich dimensional und lässt sich weder numerisch noch analytisch invertieren.

Für die Beschreibung der Elektronenreservoirs brauchen wir ein unendlich ausgedehntes System. Allerdings interessiert uns tatsächlich nicht die Physik in den Reservoirs, sondern allein die in der Kontaktregion. Wir wollen beispielsweise wissen mit welcher Wahrscheinlichkeit ein Elektron, das von links in die Kontaktregion eintritt, das Potential überwindet und in das rechte Reservoir verschwindet. Wir fragen nach der Transmission durch das Potential oder nach der Dichte im Bereich des Potentials. Wir suchen Größen, die den Transport durch den Kanal beschreiben, sind aber nicht an Größen interessiert, die physikalische Eigenschaften außerhalb des Kontakts charakterisieren.

Um die Greensche Funktion des Systems zu berechnen müssen wir den Hilbertraum des Hamiltonian auf einen endlichen Wert beschränken. Solange wir es mit einer unendlichen Basis im Ortsraum zu tun haben ist eine Invertierung schlicht nicht möglich. Ein rigoroser Ansatz wäre, die Matrix  $H$  auf den Bereich des Kontakts zu beschränken. Diesem Bereich können wir eine beliebige Dimension geben. So können wir beispielsweise das Potential und die Wechselwirkung lokal auf eine Länge von 100 Sites beschränken. Die Invertierung einer (200x200)-Matrix (der Faktor zwei kommt durch unterschiedliche Spin-Ausrichtungen zustande) stellt für den Computer kein Problem dar. Allerdings würden wir damit den Einfluss des Leadhamiltonian völlig vernachlässigen. Von der Beschreibung eines offenen, unendlich ausgedehnten Systems wären wir zu einem Hamiltonian für ein geschlossenes, endliches System gelangt. Die Ränder des Kontakts wären reflektierend, ein Elektron könnte weder in den Kontaktbereich gelangen, noch ihn verlassen. Transporteigenschaften lassen sich in einem derartigen System natürlich nicht mehr untersuchen.

Die Lösung findet sich in der Methode der Projektion. Statt  $H$  brachial auf die Größe des Kontakts zuzuschneiden untersucht diese den Einfluß der Leads auf die Sites am Rand des Kontakts, also die Schnittstellen zwischen Kanal und Reservoir. Es zeigt sich, dass die Elemente  $H_{1,1}$  und  $H_{N,N}$  des Kontakthamiltonian durch das Verhandensein der Reservoirs verändert werden. Sie erhalten einen endlichen Imaginärteil, der sich mit der endlichen Aufenthaltsdauer ('Lebenszeit') eines Elektrons am Kontaktrand assoziieren lässt.

Wir definieren die Projektionsoperatoren  $P$  und  $Q$ .  $P$  projiziert das System auf den Hilbertraum des Kontaktbereichs,  $Q$  ist orthogonal dazu und projiziert folglich in die Leads. Ein

Abschneiden des Hamiltonian würde der Projektion  $H_{PP} = PHP$  entsprechen. Alle Information über die Leads wäre damit verloren. Das System wäre abgeschlossen. Anders verhält sich die Projektion der Greenschen Funktion, namentlich

$$\mathcal{G}_{PP} = PGP = P \left[ \omega - \begin{pmatrix} H_{PP} & H_{PQ} \\ H_{QP} & H_{QQ} \end{pmatrix} \right]^{-1} P = \frac{1}{\omega P - H_{PP} - H_{PQ} \frac{1}{\omega Q - H_{QQ}} H_{QP}} \quad (3.7)$$

Die Information über die Leads bleibt hier erhalten. Der Grund dafür ist, dass der Projektionsoperator  $P$  auf einen inversen Operator angewendet wird. Zwar können wir diesen nicht ausrechnen (siehe oben), man kann sich aber schnell anschaulich klar machen, warum der Einfluss der Leads in Gl. (3.7) weiterhin vorhanden ist: Der Hamiltonian einer Tight-Binding Kette ist im Ortsraum tridiagonal. Auf der Diagonale sitzen die Energien einzelner Sites, auf den beiden Nebendiagonalen die Überlappintegrale oder Kopplungen benachbarter Sites. Die Inverse einer solchen tridiagonalen Matrix besitzt nun nicht mehr diese Struktur. Im Normalfall unterschieden sich alle Elemente der inversen Matrix von Null. Die Information eines Elements der ursprünglichen tridiagonalen Matrix hat sich in der Inversen Matrix auf mehrere Elemente verteilt. Projiziert man also  $\mathcal{G}$  mittels  $P$  auf den Kontaktbereich, so ist die entscheidene Information über die Leads weiterhin vorhanden.

Das letzte Element im Nenner von Gl. (3.7), die sogenannte Selbstenergie, enthält die Greensche Funktion der Leads  $G_{QQ} = \frac{1}{\omega Q - H_{QQ}}$ . Da die Matrizen  $H_{PQ}$  und  $H_{QP}$  jeweils nur ein Element ungleich Null besitzen (Die Kopplungsstärke der Site 1 bzw.  $N$  an die Leads) lässt sich diese als

$$\begin{aligned} \Sigma_{PP}(\omega) &:= -H_{PQ} \frac{1}{\omega Q - H_{QQ}} H_{QP} \\ &= -\tau^2 \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left[ |1, \sigma\rangle \langle 1, \sigma, L| \frac{1}{\omega - H_{QQ}} |1, \sigma, L\rangle \langle 1, \sigma| \right. \\ &\quad \left. + |N, \sigma\rangle \langle 1, \sigma, R| \frac{1}{\omega - H_{QQ}} |1, \sigma, R\rangle \langle N, \sigma| \right] \\ &= -\tau^2 \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} [|1, \sigma\rangle g_{L,\sigma}(\omega) \langle 1, \sigma| + |N, \sigma\rangle g_{R,\sigma}(\omega) \langle N, \sigma|] \end{aligned} \quad (3.8)$$

schreiben. Hier haben wir die Greensche Funktion des rechten/linken Leads mit  $g_{L,\sigma}(\omega)/g_{R,\sigma}(\omega)$  bezeichnet, um sie deutlich von der Greenschen Funktion des Kontakts  $\mathcal{G}_{PP}$  zu unterscheiden. Auf den ersten Blick scheint es als hätten wir nichts gewonnen. Unser Ziel war die Berechnung der Greenschen Funktion unter Umgehung der Invertierung einer unendlich-dimensionalen Matrix. Da die Leads jedoch unendlich ausgedehnt sind scheint es der Invertierung eines unendlichen Operators zu bedürfen, um  $g(\omega)$  zu erhalten. Glücklicherweise lässt sich  $g(\omega)$  analytisch herleiten:

Die Leads sind nicht-wechselwirkende Tight-Binding Ketten ohne einbeschriebenes Potential oder Magnetfeld. Somit kann es keine Unterscheidung zwischen  $g_{\uparrow}(\omega)$  und  $g_{\downarrow}(\omega)$ , bzw zwischen links und rechts geben. Wir können also kurz  $g_{L/R,\uparrow/\downarrow}(\omega) = g(\omega)$  schreiben.



Für die Berechnung von  $g(\omega)$  betrachten wir nun eine unendlich ausgedehnte Kette mit chemischem Potential  $\mu$ . Die Projektion auf eine beliebige Site ( $\rightarrow H_{PP} = \mu$ ) dieser Kette ergibt dann:

$$\mathcal{G}_{PP,\uparrow} = \frac{1}{\omega + \mu - 2\tau^2 g(\omega)} \quad (3.9)$$

Der Imaginär der Greenschen Funktion entspricht der Zustandsdichte (vgl. Gl. (3.16)). Daraus folgt mittels der Kramers-Kronig Relation.

$$\frac{1}{\omega + \mu - 2\tau^2 g(\omega)} = -i \frac{dk}{d\omega} \quad (3.10)$$

woraus wir nach Umformung für die Greensche Funktion eines Leads

$$g(\omega) = \frac{1}{2\tau^2} \left[ \omega + \mu - i \frac{dk}{d\omega} \right] \quad (3.11)$$

erhalten. Nach Einsetzen der Dispersionsrelation (Gl.??) ergibt sich schließlich

$$\Rightarrow g(\omega) = \begin{cases} \frac{1}{2\tau^2} \left( \omega + \mu - i\sqrt{4\tau^2 - (\omega + \mu)^2} \right) & \Im(\omega) \geq 0 \\ \frac{1}{2\tau^2} \left( \omega + \mu + i\sqrt{4\tau^2 - (\omega + \mu)^2} \right) & \Im(\omega) < 0 \end{cases} \quad (3.12)$$

Die Selbstenergie  $\Sigma$  besitzt die Eigenschaft eines effektiven Hamiltonian. In ihr steckt der komplette Einfluss der Leads auf den Kontakt. Die hier vorgestellte Methode ist exakt. In keinem Schritt der Herleitung wurde eine Näherung benutzt.

## 3.5 Die Berechnung physikalischer Größen

### 3.5.1 Die Lebensdauer

Im Gegensatz zum Kontakt-Hamiltonian  $H_k$  ist die Selbstenergie  $\Sigma$  im Allgemeinen nicht hermitesch, ihre Eigenwerte sind somit komplex. Durch den Einfluss der Leads erhält man einen effektiven Hamiltonian

$$H_{k,eff} = H_k + \Sigma \quad (3.13)$$

Die Eigenzustände dieses Operators lassen sich als

$$\varepsilon_{n,eff} = \varepsilon_{n,k} + \Delta_n - i\gamma_n/2 \quad (3.14)$$

schreiben [14], wobei  $\varepsilon_{n,eff}$  für die Eigenenergien des abgeschlossenen Kontakts steht.  $\Delta_n$  steht somit für die Energieverschiebung durch den Einfluss der Leads, während der imaginäre Term  $i\Gamma_n/2$  die endliche Aufenthaltsdauer eines Elektrons im Kontaktbereich beschreibt. Dies wird aus der Zeitentwicklung von  $\varepsilon_{n,eff}$  deutlich:

$$\psi_n(t) = e^{-iH_{k,eff}t}\psi_n = e^{-i\varepsilon_{n,eff}t}\psi_n = e^{-\gamma_n t} e^{-i(\varepsilon_n^k + \Delta_n)t}. \quad (3.15)$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Elektrons im Kontaktbereich nimmt also mit der Zeit mit  $e^{-\gamma_n t}$  ab.

### 3.5.2 Spektralfunktion und Dichte

Nach [14] lässt sich der Diagonaleil der Spektralfunktion als

$$\mathcal{A}_{j,j}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[\mathcal{G}_{j,j}(\omega)] \quad (3.16)$$

schreiben. Dies ist nichts anderes als die Zustandsdichte zur Energie  $\omega$  auf einer Site  $j$ . Aus dieser erhält man die Dichte über die Aussummierung aller Energien. Mit der Konvention  $\mu = \varepsilon_F = 0$  gilt also

$$n_j = \int_{-\infty}^0 \mathcal{A}_{j,j}(\omega) d\omega. \quad (3.17)$$

Die Wechselwirkung verändert die Kopplung  $\tau$ . Als Folge davon ergibt sich eine andere, effektive Bandbreite. Somit muss man eventuell auch Zustände unterhalb von  $2\tau$  berücksichtigen. Die untere Integrationsgrenze beginnt deshalb bei  $-\infty$ . Da die Wechselwirkung keine Verschiebung der Fermienergie  $\mu$  der Reservoirs bewirkt, ist die obere Grenze wie im wechselwirkungsfreien Fall bei Null.

### 3.5.3 Die Wechselwirkung

In diesem Kapitel wurde der Einfluss der Wechselwirkung ausgespart. Die oben beschriebene Methode der Projektion ist dennoch exakt, da die Reservoirs nicht wechselwirkend modelliert werden müssen. Allerdings wird sich durch die Wechselwirkung im Bereich des Kontakts die Physik bezüglich eines Einteilchen-Modells drastisch ändern. Grund dafür ist die geringe Dichte um das Potentialmaximum. Dort werden Wechselwirkungseffekte eine entscheidende Rolle spielen und den Transport beeinflussen. Eine genauere Analyse dieses Verhaltens wird im Ergebnisteil dieser Arbeit statt finden.

### 3.5.4 Die Berechnung des Leitwerts

Im Temperaturnullpunkt ist der lineare Leitwert proportional zur Transmissionswahrscheinlichkeit eines Elektrons mit Energie  $\varepsilon_F$  durch die Barriere. Transport findet wegen der Stufe in der Fermifunktion einzig durch Zustände an der Fermienergie statt. Auf eine Berechnung aus der im nächsten Kapitel beschriebenen Funktionalen Renormierungsgruppe sei hier verzichtet. Eine detaillierte Herleitung findet sich beispielsweise in [34]. Für den Leitwert pro Spinorientierung erhält man

$$G_\sigma = \frac{e^2}{h} \mathcal{T}_\sigma = \frac{e^2}{h} \|2\pi\rho_l(0)\tau^2 \mathcal{G}_{N,1}^\sigma(\mu)\|^2. \quad (3.18)$$

Die meisten Daten im Ergebnisteil stützen sich auf diese Gleichung



# 4 Die Methode fRG

## 4.1 Der Einfluss der Wechselwirkung

In der Kontaktregion der Kette interagieren Zustände auf gleichen oder benachbarten Sites. Im Bereich des Potentials wird das System also durch Vielteilchenphysik beschrieben. Die Berechnung physikalischer Größen erweist sich als schwierig, da der Einfluss der Wechselwirkung eine analytische Lösung in den meisten Fällen verwehrt. Um für die unterschiedlichsten Vielteilchen-Systeme verlässliche Resultate zu erzielen wurde in den vergangenen Dekaden eine Vielzahl von Methoden entwickelt.

## 4.2 Störungstheorie

Der intuitivste Ansatz ist die Störungstheorie, namentlich die Entwicklung einer physikalischen Größe in eine unendliche Reihe bezüglich eines Systemparameters. Solange eine Konvergenz der Reihe gewährleistet ist kann die Aufsummierung ein paar führender Terme der Entwicklung schon zu befriedigenden Ergebnissen führen. Allerdings ist das nicht a priori gewährleistet. Im vorangegangenen Kapitel folgten wir dem Weg Kondos, der die Erhöhung des Widerstands in einem Metall mit magnetischer Verunreinigung störungstheoretisch ableitete. Wie beschrieben divergieren Terme höherer Ordnung bei der Kondotemperatur  $T_K$ . Die Störungstheorie versagt gerade also gerade in dem Energiebereich von Interesse. Das Vorhandensein von Divergenzen in Entwicklungsthermen ist in Systemen mit starker Korrelation alltäglich. Ein solches System in einem größeren Energiebereich störungstheoretisch zu untersuchen scheidet folglich meist aus.

## 4.3 Renormierungsgruppen

Einen vielversprechenden Lösungsansatz bieten die sogenannten Renormierungsgruppen, deren erste Gehversuche vor ca. 50 Jahren stattfanden. Ende der 60er und 70er Jahre wurden von Wilson [35] und Kadanoff [36] die ersten Renormierungsmethoden aufgestellt, die noch heute breite Anwendung in der statistischen Physik oder der Festkörperphysik haben.

Die Idee hinter der Renormierungsgruppe(RG) ist folgende:

Hat man es mit einem System mit unendlich vielen Parametern zu tun, so wird eine Beschreibung unmöglich. Um dennoch Aussagen über Größen des Systems treffen zu können muss man die Anzahl der Freiheitsgrade verringern (Elimination der Freiheitsgrade). In der

klassischen Form einer Renormierungsgruppe wird der ursprüngliche Hamiltonian  $H$  durch eine Renormierungsgruppentransformation auf den effektiven Hamiltonian  $H'$  abgebildet. Eine Eigenschaft, die die Transformation erfüllen muss, ist, dass sich die Zustandssumme  $Z[H]$  des Hamiltonian nicht ändert. Gleichzeitig findet eine Reduktion der Freiheitsgrade, eine sogenannte Vergrößerung statt. Die Reskalierung des Systems findet bezüglich eines Parameters  $b$  statt, so dass sich analytisch schreiben lässt

$$\frac{dS}{db} = R[S]. \quad (4.1)$$

Diese Gleichung definiert den sogenannten Renormierungsfluss der RG. Diese Prozedur der Transformation wird sooft wiederholt, bis die Abstände (diese müssen nicht zwingen Ortsabstände sein) der Substituenten eines Systems die Korrelationslänge des ursprünglichen Systems erreichen. Durch Untersuchung der Physik des so entstandenen Systems kann viel Information über das ursprüngliche System gezogen werden. Diese Tatsache begründet sich in der Eigenschaft der RG-Transformation.

## 4.4 fRG

In dieser Arbeit wird der Einfluss der Wechselwirkung mittels der sogenannten Funktional Renormierungsgruppe (fRG) untersucht. Da in der Literatur eine Vielzahl von Herleitungen der entscheidenden Gleichungen, der sogenannten Flussgleichungen, vorliegt, beschränken wir uns hier auf eine kurze Beschreibung der Methode und verweisen für eine tiefere Einarbeitung in fRG auf ([15] [34]).

Ausgehend von der kontinuierlichen Version des Funktionalintegrals für die großkanonische Zustandssumme werden über Funktionalableitungen sogenannte  $N$ -teilchen Greensfunktionen definiert. Über eine Legendre-Transformation erhält man ein erzeugendes Funktional für die sogenannten Vertexfunktionen  $\gamma_N$ . Für diese Vertexfunktionen wird ein unendliches Differentialgleichungssystem aufgestellt, das bei einer exakten Lösung die komplette Physik des wechselwirkenden Systems wiedergeben würde. Leider ist dies nicht möglich. Man muss die Differentialgleichungen beschränken. Anders als in der Störungstheorie ist aber gesichert, dass bei der Reduktion auf eine kleine Anzahl von Differentialgleichungen keine 'wichtigen' Terme außer Acht gelassen werden. Denn durch eine Beziehung der Vertexfunktionen untereinander ist dafür gesorgt, dass die Differentialgleichungen der höheren Vertexfunktionen keinen großen Einfluss auf  $\gamma_0$  und  $\gamma_1 = -\Sigma$  haben. Diese sind die entscheidenden Größen. In Kapitel 2 haben wir die sogenannte Selbstenergie definiert. Diese enthält die Information über die halbunendlichen Ketten der Leads bei einer Projektion der Greenschen Funktion des Hamiltonian auf den Kontaktbereich. Ebenso wie dort trägt  $\Sigma$  hier einen Einfluss, der 'wegprojiziert' wurde: Den der Wechselwirkung.

fRG bildet also ein wechselwirkendes System auf ein effektiv nicht-wechselwirkendes ab. Die Greensche Funktion dieses effektiven Systems lautet:

$$\mathcal{G} = \frac{1}{[\mathcal{G}^0]^{-1} - \Sigma}. \quad (4.2)$$

Dabei ist  $G^0$  die Greensche Funktion des Hamiltonian in Gl. (3.5a) ohne den Wechselwirkungsanteil. Durch die Greensche Funktion werden wie in Kapitel 2 gezeigt die physikalischen Größen des Systems berechnet.

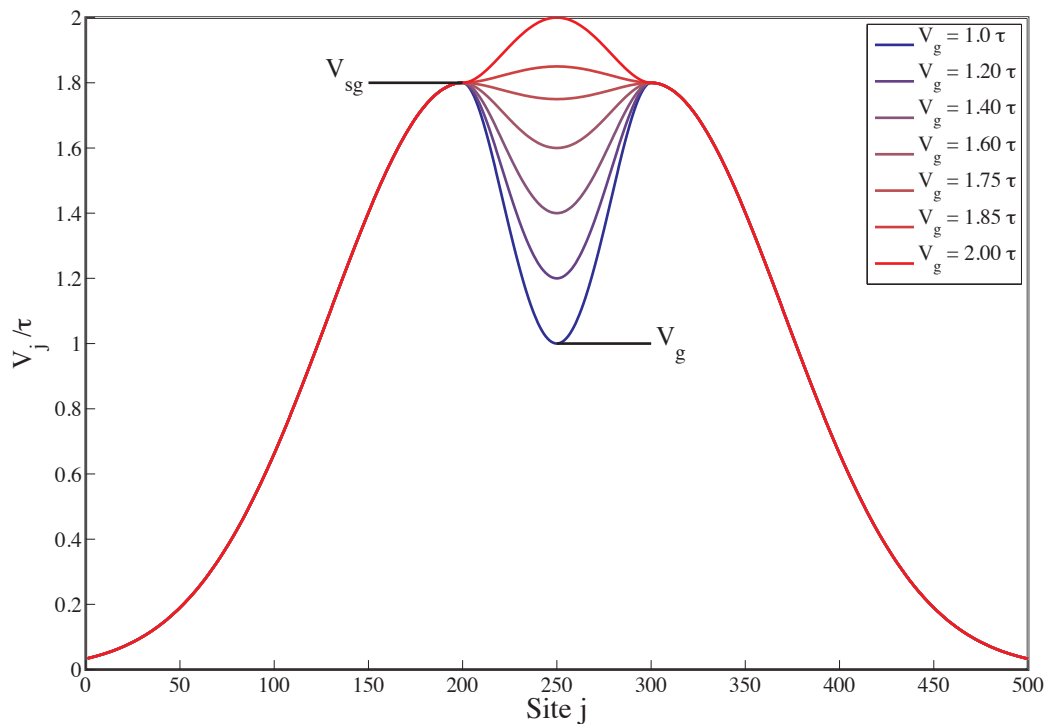
Um eine Vorstellung der Struktur der Differentialgleichungen zu bekommen: Die Flussgleichungen sind Differentialgleichungen bezüglich eines Parameters  $\Lambda$ , dem sogenannten Cutoff-Parameter. Die Greensche Funktion sowie die Vertexfunktionen sind von diesem abhängig. Für  $\Lambda = \infty$  entspricht die Greensche Funktion der nicht wechsewirkenden  $G^0$ .  $\Lambda$  wird nun quasi-kontinuierlich gegen 0 geschickt. Bei diesem Fluss ändert sich der Wert von  $G$ , bis schließlich bei  $\Lambda = 0$  die Information über die Wechselwirkung in  $G$  enthalten ist.





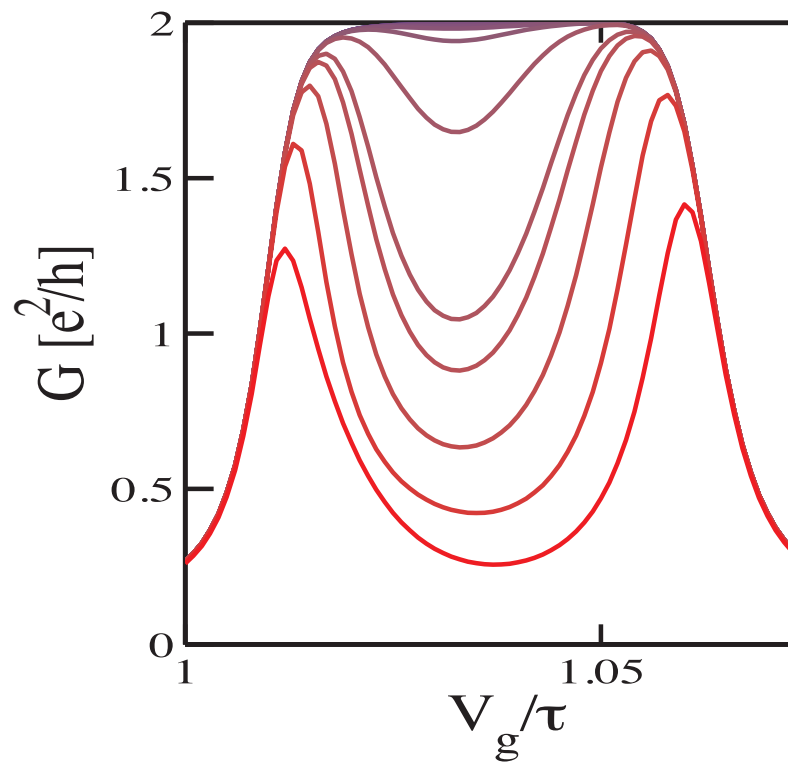
## 5 Ergebnisse

Um den Übergang eines Quantendots(QD) zu einem Quantenpunktkontakt(QPC) zu simulieren, benutzen wir entlang der Tight-Binding-Kette ein Potential der Form ( 5.1). Dieses wird durch folgende Parameter beschrieben:  $V_g$  gibt den Wert des Potentials im Mittelpunkt der Kette an.  $V_{sg}$  definiert die Höhe des Potentials an den Punkten  $V_g - W_D/2$  und  $V_g + W_D/2$ , wobei  $W_D$  die Breite des Potentials beschreibt. Schliesslich bestimmt  $W_{edge}$  die Breite des Anstiegs im Bereich  $j < V_g - W_D/2$  bzw.  $j > V_g + W_D/2$ . Für eine Kette der Länge  $N$  wird das Potential in den Bereichen  $[0, j < V_g - W_D/2]$  und  $[j > V_g + W_D/2, N]$  durch Gaußfunktionen beschrieben, deren Maximum in  $V_g - W_D/2$  respektive in  $V_g + W_D/2$  liegt. Im Mittelbereich der Barriere wird ein Polynom vierter Ordnung verwendet.



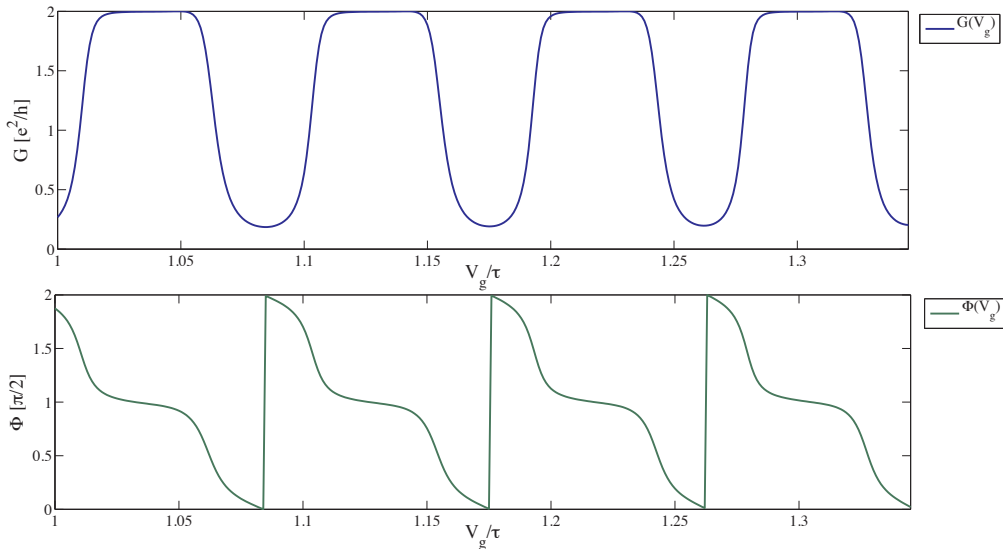
**Abbildung 5.1: Das Potential zur Simulation eines QD's.** Der Parameter  $V_g$  definiert die Tiefe des Dots, während  $V_{sg}$  die Höhe der Flanken bestimmt. Der Verlauf der Potentialmulde wird durch ein Polynom vierter Ordnung beschrieben, um für jedes Parameterset ein glattes Potential und damit adiabatischen Transport zu gewährleisten. Ein exponentieller Abfall drückt das Potential an den Kettenrändern schnell auf null, um Randeffekte zu vermeiden.

## Der Quantendot



## 5.1 Der Quantendot

Für  $V_g < V_{sg}$  beschreibt das Potential einen QD. Liegt  $V_{sg}$  oberhalb von  $\varepsilon_F$ , so findet Transport nur statt, wenn ein Level im QD die Energie  $\varepsilon_F$  besitzt. In Abb. 5.2 ist der Leitwert durch das Potential als Funktion von  $V_g$  für einem Wert  $V_{sg} = 2.003$  dargestellt. Man erkennt deutlich die Kondoplateaus in Bereichen, in denen der QD eine ungerade Anzahl von Elektronen trägt. Der lokale Spin im Bereich der Barriere nimmt den Wert  $S = \frac{1}{2}$  an. Die Wechselwirkung mit ungebundenen Elektronen im Band führt zur Ausbildung eines Singlets und zu einer Kondoresonanz bei  $\varepsilon_F$ . Der Leitwert ist auf seinen Maximalwert  $G = 2\frac{e^2}{h}$  gepinnt. Die Phase wurde an einem beliebigen  $V_g$ -Wert, bei dem die Elektronenanzahl im Dot gerade ist, auf null gesetzt. Beim Erreichen des Kondoregimes ist, wie theoretisch vorausgesagt [30], ein Phasensprung um  $\frac{\pi}{2}$  zu beobachten. Beim Verlassen des Regimes findet ein weiterer Phasensprung statt.



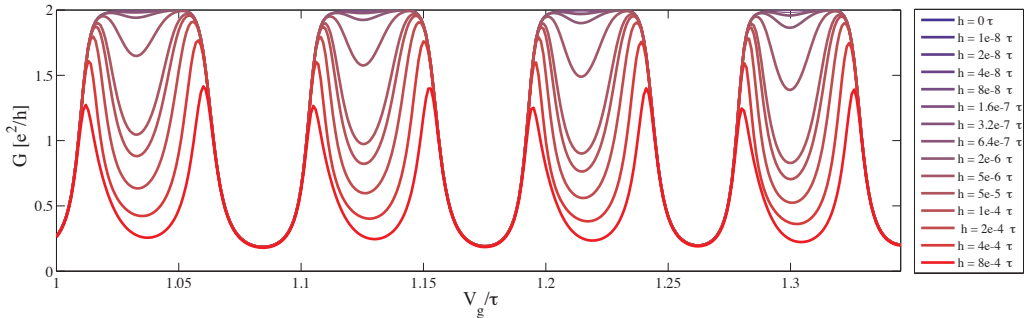
**Abbildung 5.2: Leitwert und Phase als Funktion des Dotminimums  $V_g$ .** **oben:** Befindet sich eine ungerade Anzahl Elektronen im Dot, so nimmt der Leitwert aufgrund des Kondoeffekts seinen Maximalwert  $G = 2\frac{e^2}{h}$  an. Für eine gerade Besetzung ist der Leitwert unterdrückt, da kein freier Zustand im Dot den Transport tragen kann. **unten:** Die Phase ist über  $\Phi = \pi n_{dot}$  mit der Besetzung im Dot gekoppelt. Als Folge liegt sie über die Breite eines Kondoplateaus bei  $\frac{\pi}{2}$ .

Für eine geradzahlige Anzahl von Dotelektronen ist in einem perfekten QD kein Leitwert zu erwarten. Alle Zustände im Dot, die den Transport tragen könnten, sind permanent besetzt. Um in den Muldenbereich des Potentials zu gelangen müsste ein Leitungselektron eine nicht vorhandene Energie  $E > \varepsilon_F$  aufwenden. Das der Leitwert dennoch zwischen zwei Kondoplateaus nicht auf null absinkt ist eine Folge der Geometrie des Potentials. Für Werte nahe  $V_{sg}$  nimmt die Steigung der Dotflanken ab und besitzt am Maximum den Wert null. Dieser Umstand erhöht die Zustandsdichte im Dot mit Annäherung an  $V_{sg}$ . Da die Fermienergie  $\varepsilon_F$  nur knapp unterhalb von  $V_{sg}$  liegt findet sich in ihrer Umgebung eine große Dichte an Dotzuständen. Zusätzlich sind die Dotflanken dort relativ schmal. Das bedingt eine große

Kopplung der Energieniveaus an die Leads. Die Level im Dot werden folglich mit zunehmender Energie nicht nur dichter, sondern auch breiter, und es findet eine Überlappung mit der Fermienergie statt. Das ermöglicht Elektronen das Eindringen in den Dotbereich der Barriere und führt zu einem endlichen Transport.

### 5.1.1 Magnetfeldverhalten des Leitwerts

Das Anlegen eines Magnetfelds hebt die Spin-Entartung der Zustände im Dot auf. Als Folge sind die Besetzungen  $n_\uparrow$  und  $n_\downarrow$  des einfach besetzten Dotzustands voneinander verschieden und die Kondoresonanz wird zerstört. Das Leitwertverhalten im Magnetfeld ändert sich mit der Levelposition  $\varepsilon_d$  im Dot. In unserem Modell wird diese durch  $V_g$  gesteuert. Abb. 5.3 zeigt das Magnetfeldverhalten des Leitwerts. Wie zu erwarten, ist die Unterdrückung des Leitwerts im Zentrum eines Kondoplateaus besonders ausgeprägt und nimmt zu den Rändern hin ab.



**Abbildung 5.3:** Leitwertkurven bei verschiedenen Werten eines angelegten Magnetfelds: Durch das äußere Feld wird die Spinentartung im Dot aufgehoben. Die unterschiedlichen Besetzungen  $n_\uparrow$  und  $n_\downarrow$  im Dot führen zu einer spezifischen Leitwertunterdrückung im Kondoregime.

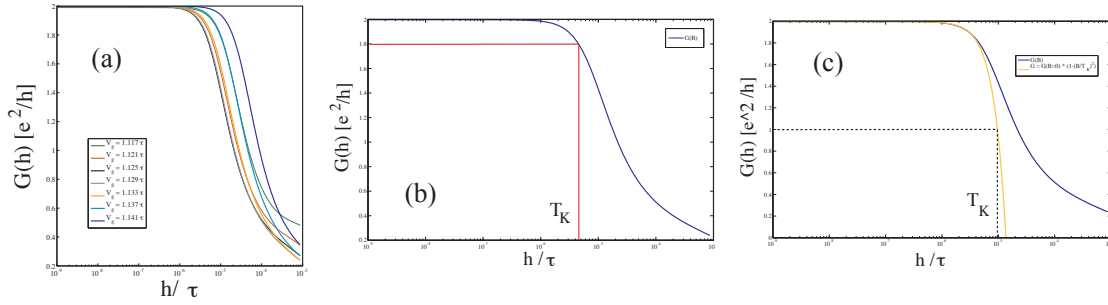
### 5.1.2 Definition einer Energieskala - die Kondotemperatur

Der Leitwert zeigt als Funktion des Magnetfelds für kleine Felder eine quadratische Abhängigkeit. Es lässt sich folglich eine Tiefenergieskala  $T_K$  definieren, die mit der Krümmung des Leitwerts bei  $h = 0$  assoziiert wird [37]:

$$G(h) = G(h = 0) \cdot \left[ 1 - \frac{\pi^2}{16} \frac{h^2}{T_K^2} \right]. \quad (5.1)$$

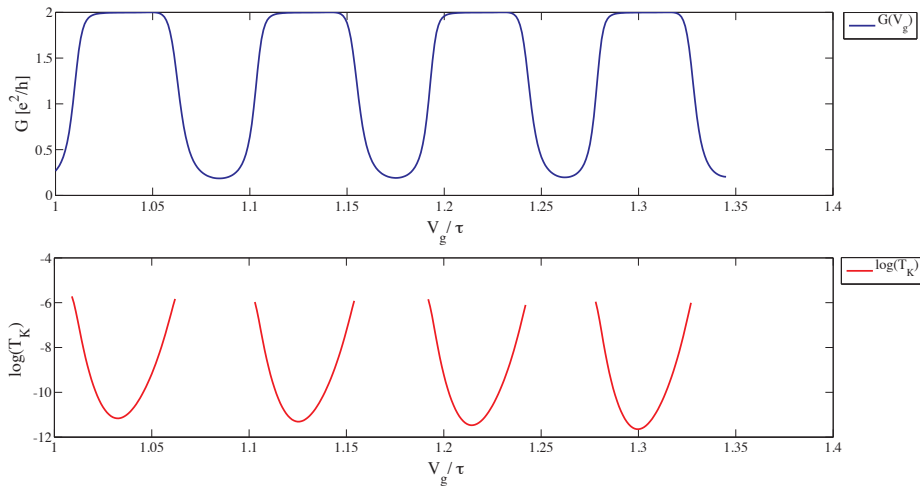
Diese Skala ist abhängig von  $V_g$ . Das Leitwertverhalten für verschiedene  $V_g$  im Bereich eines Kondoplateaus ist in Abb. 5.4(a) zu sehen. Das Magnetfeld muss einen gewissen Grenzwert überschreiten, um die Kondoresonanz zu zerstören. Dieser Schwellwert ist  $\sim T_K$ .

In dieser Arbeit werden zwei unterschiedliche Definitionen von  $T_K$  verwendet: Vom theoretischen Standpunkt aus ist es sinnvoll, eine Tiefenergieskala aus dem Verhalten des Leitwert bei



**Abbildung 5.4: Unterdrückung des Leitwerts als Funktion des Magnetfelds für ausgewählte Werte von  $V_g$  im Kondoregime:** Für kleine Felder besitzt die Funktion  $G(h)$  eine parabolische Form. Das erlaubt die Definition einer Energieskala  $T_K$ . Diese ist von der Levelposition im Dot und damit von  $V_g$  abhängig.

möglichst kleinen Magnetfeldwerten zu extrahieren. Solange man Felder verwendet, die eine quadratische Abhängigkeit des Leitwerts garantieren wird, man einen verlässlichen Verlauf von  $T_K(V_g)$  erhalten. Abb. 5.4(c) veranschaulicht diese Definition. Das quadratische Verhalten des Leitwerts gilt für Magnetfelder, die den Leitwert kaum verändern. In einem Experiment sind solch kleine Veränderung im Leitwert nicht zu messen, geschweige denn daraus eine quadratische Abhängigkeit bestimmbar. Als Alternative bestimmen wir  $T_K$  durch das Verhalten des Leitwerts bei größeren Magnetfeldern, so dass sich sein Wert deutlich von dem feldfreien Fall unterscheidet (Abb. 5.4(b)).  $T_K$  wird mit dem Magnetfeldwert gleichgesetzt, der den Leitwert um einen beliebig wählbaren Faktor  $c_T$  verringert. Wie zu erwarten, nimmt die Abweichung von  $T_K$  bezüglich der ersten Methode mit steigendem Faktor zu. In dieser Arbeit wurde überwiegend ein Wert  $c_T = 0.9$  gewählt. In der Folge werden  $T_K$ -Kurven rot (theoretisch) bzw. ocker (experimentell) dargestellt.

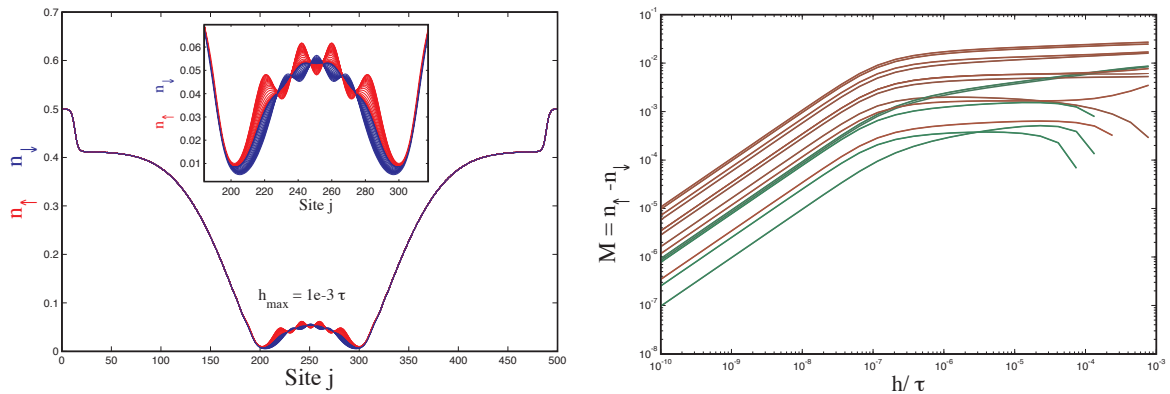


**Abbildung 5.5: Die Kondotemperatur als Funktion von  $V_g$ .** oben: Leitwert als Funktion von  $V_g$ ; unten: Spezifischer Funktionsverlauf der Kondotemperatur entlang mehrerer Kondoplateaus. Für  $V_g$ -Werte, bei denen  $\varepsilon_d$  und  $\varepsilon_d + U$  symmetrisch um  $\varepsilon_F$  liegen nimmt  $T_K$  ein Minimum an.

Über den Bereich eines Kondoplateaus wird nach Gl. (2.20)  $\log(T_K)$  die Form einer Parabel besitzen. Abb. 5.5 zeigt den Verlauf von  $T_K$  über vier Kondoregime. Die Parabelform ist klar erkennbar. Abweichungen sind wiederum durch die Wahl des Potentials gegeben: Mit der Änderung von  $V_g$  ändert sich nicht nur die Tiefe des Dots, sondern auch die Krümmung des Potentials im Dot. Die einzelnen Energieniveaus schieben sich dadurch mit wachsendem  $V_g$  näher zusammen.  $V_g$  reguliert zwar die Dotenergie  $\varepsilon_d$  des einfach besetzten Zustands, der mit den Leitungselektronen ein Singlet eingeht, beeinflusst aber zusätzlich noch die geometrischen Eigenschaften des Dots. Eine Proportionalität  $V_g \propto \varepsilon_d$  ist somit nur näherungsweise gegeben. Trotz dieser Abweichungen erweist sich das Modell als erstaunlich genaues effektives SIAM. Zusätzlich ermöglicht uns die Simulation des Potentials durch eine Tight-Binding Kette die Berechnung orts aufgelöster Größen wie die lokale Dichte  $n_j$  oder die Suszeptibilität  $\chi_j$ .

### 5.1.3 Magnetisierung und Suszeptibilität

Nach Gl. (3.17) können wir eine lokale Dichte in der Kette berechnen. Allerdings ist a priori nicht klar ob man den Ergebnissen der Dichte vertrauen kann. Der Dichteoperator ist ein sogenannter composite operator (zusammengesetzter Operator). Im Sinne der fRG sollte ein solcher Operator mittels einer Flussgleichung renormiert werden [38]. Die Dichte hängt mit dem Nullteilchen-Vertex zusammen. Jedoch stellt sich die Kontrolle über dessen Fluss als schwierig heraus. Eine Lösung des Problems erwies sich als sehr schwierig. Von einem Fluss des Nullteilchenvertex wurde abgesehen und die Dichte für nachfolgende Ergebnisse nach Gl. (3.17) berechnet.



**Abbildung 5.6: Die lokale Dichte in einem Quantendot-Potential:**

**links:** Die lokale spinaufgelöste Dichte  $n_\uparrow$  und  $n_\downarrow$  über die gesamte Kette für das Potential im Quantendot-Regime bei verschiedenen Magnetfeldern  $h$ . Die Dichte erreicht am Rand der Kette im Bereich mit  $U = V = 0$  den Wert  $n = n_\uparrow + n_\downarrow = 1$  halber Füllung. Sobald die Wechselwirkung spürbar ist sinkt die Dichte. Im Bereich des QD (Detailvergrößerung) gibt die Oszillation die Form der Wellenfunktion wieder. Bei endlichem Feld wechseln sich Bereiche mit dominierendem  $n_\uparrow$  und  $n_\downarrow$  ab. **rechts:** Die Magnetisierung  $M = n_\uparrow - n_\downarrow$  als Funktion des angelegten Feldes  $h$  für verschiedene Sites  $j$  im Dot. Für kleine Felder bis  $h \approx 10^{-7}\tau$  ist  $M$  linear in  $h$ . Dunkelrote Funktionsverläufe charakterisieren Sites  $j$  mit positiver, grüne Funktionsverläufe Sites mit negativer Magnetisierung.

Abb. 5.6 (links) zeigt die lokale Dichte in einem Quantendot im Kondoregime ( $V_g = 1.93\tau$ )

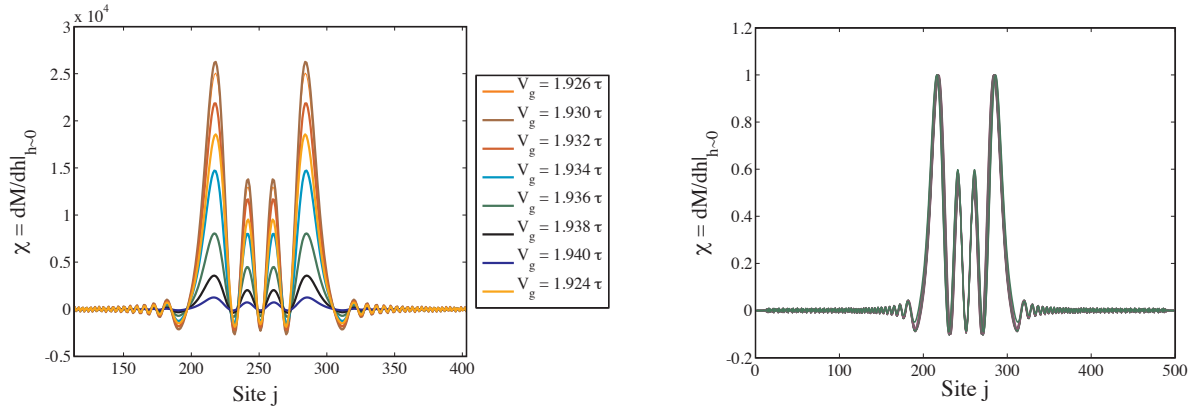
für verschiedene Magnetfelder. Da sich das Energieband der Kette von  $-2\tau$  bis  $2\tau$  erstreckt und die Fermienergie auf null gesetzt wurde, erwarten wir für ein verschwindendes Potential und verschwindende Wechselwirkung  $U$  halbe Füllung  $n(j) = 1$ . Die Form von Potential und Wechselwirkung wurde so gewählt, dass beide an den Rändern der Kette verschwinden. So werden Randeffekte verhindert. In diesem Bereich ist die Besetzung pro Spinorientierung  $n_{\uparrow} = n_{\downarrow} = 0.5$ . Die Dichte liefert dort das korrekte Ergebnis.

Durch die Coulombabstoßung der Teilchen nimmt die Dichte pro Site für  $U \neq 0$  ab. In Bereichen, in denen  $V(j) = 0$  und  $U(j) \neq 0$  sinkt die Dichte folglich auf einen Wert unter 0.5. Im Mittelteil der Kette gibt sie schematisch die Form des effektiven Potentials wieder: Sie sinkt, bis das Potentialmaximum erreicht ist und ist im Quantendot erhöht.

Die Detailvergrößerung zeigt den Dichteverlauf im Quantendot. Für  $h = 0$  sieht man leichte Oszillationen in der Dichte. Diese spiegeln den Verlauf der Wellenfunktion im Dot wieder. Besetzt ein Elektron das Energieniveau  $\varepsilon_d$  so befindet es sich in einem Überlagerungszustand aus  $|\uparrow\rangle$  und  $|\downarrow\rangle$ . In einem endlichen Feld  $h$  wird die Entartung des Energieniveaus aufgehoben. Die Besetzung des Zustands ist nun vermehrt durch  $\uparrow$ -Elektronen gegeben. Die Brechung der Spinsymmetrie führt zur Ausbildung zweier Energieniveaus  $\varepsilon_{d,\uparrow}$  und  $\varepsilon_{d,\downarrow}$ . Da sich ihre Energien für kleine Magnetfelder nicht sonderlich voneinander unterscheiden findet eine starke Wechselwirkung statt. Die beiden Wellenfunktionen richten sich zur Minimierung der lokalen Energie bevorzugt orthogonal zueinander aus. Es bilden sich abwechselnd Bereiche mit erhöhter Besetzung  $n_{\uparrow}$  und  $n_{\downarrow}$  aus.

Die Dichte als Funktion des angelegtem Magnetfelds  $h$  ist im rechten Teilbild von Abb. 5.6 für ein ausgewähltes Set von Sites im Dot gezeigt. Die Magnetisierung

$$M = n_{\uparrow} - n_{\downarrow} \quad (5.2)$$



**Abbildung 5.7: Die Suszeptibilität  $\chi(j)$  in einem QD-Potential:**

**links:** Die Suszeptibilität  $\chi$  für verschiedene Werte von  $V_g$  im Bereich eines Kondoplateaus. Die Anzahl der Oszillationen im Dot gibt Aufschluss über die Anzahl gebundener Elektronen.  $\chi$  nimmt zu den Flanken des Plateaus hin ab. **rechts:** Die gleichen Suszeptibilitätskurven skaliert auf ihren Maximumwert. Über den gesamten Bereich eines Plateaus lassen sich die Kurven aufeinanderlegen. Für jede Site  $j$  lässt sich ein  $c(j)$  mit  $T_K \propto c(j) \frac{1}{\chi_j}$  finden.

folgt für Felder bis zur Größenordnung  $h \approx 10^{-7}\tau$  (zum Vergleich:  $T_K \approx 10^{-5}\tau$ ) einem Potenzgesetz mit Potenz eins respektive minus eins. Eine dunkelrote Magnetisierungslinie entspricht einer Site mit bevorzugter Besetzung  $n_\uparrow$ , eine grüne bevorzugter Besetzung  $n_\downarrow$ . Für die Magnetisierung bei kleinen Feldern lässt sich also

$$M_j = \chi(j) \cdot h \quad (5.3)$$

schreiben, wobei  $\chi = \left. \frac{dM}{dh} \right|_{h \rightarrow 0}$  die lokale Suszeptibilität, also die lineare Antwort der Magnetisierung auf das Feld ist. Diese entspricht dem Ordinatenabschnitt der Geraden in Abb. 5.6. Abb. 5.7 zeigt die lokale Suszeptibilität als Funktion des Ortes für ausgewählte  $V_g$ -Werte entlang eines Kondoplateaus. Maximale Suszeptibilität findet sich im Zentrum des Plateaus ( $V_g = 1.93\tau$ ), also im particle-hole symmetric point. Zu den Rändern der Resonanz nimmt die Suszeptibilität ab.

Die Suszeptibilität lässt sich skalieren. Solange sich der Dot im Kondoregime, befindet ist die Teilchenzahl in seinem Inneren konstant. Die Stärke der Antwort auf ein magnetisches Feld wird von den Levelpositionen im Dot abhängen, aber die prinzipielle Form der Suszeptibilität sollte über das ganze Regime erhalten bleiben, da die Anzahl der Knoten der Wellenfunktionen konstant ist. Das rechte Teilbild von Abb. 5.7 zeigt diese Skalierung für die ausgewählten  $V_g$ -Werte. Dabei wurde das Maximum der lokalen Suszeptibilität entlang der Kette auf eins normiert. Das die Kurven nicht exakt aufeinander liegen ist wiederum eine Folge der Geometrie des Potentials.

Für das SIAM ist eine Proportionalität zwischen der Kondoskala  $T_K$  und der Suszeptibilität  $\chi$  bekannt. Wie die Magnetisierung zeigt, ist die Besetzung einer Site für kleine Felder  $h$

$$M_j(h) = n_{\uparrow,j}(h) - n_{\downarrow,j}(h) = \overbrace{(\chi_{\uparrow,j} + \chi_{\downarrow,j})}^{\chi_j} h. \quad (5.4)$$

Aus Symmetriegründen gilt im Limes  $h \rightarrow 0$

$$\frac{\partial n_\uparrow}{\partial h} = \frac{\partial n_\downarrow}{\partial(-h)} \quad \rightarrow \quad \chi_{\uparrow,j} = \chi_{\downarrow,j} = \frac{\chi_j}{2} \quad (5.5)$$

so dass die Magnetisierung im Dot zu

$$M_{dot}(h) = \sum_{j \in dot} \overbrace{(\chi_{\uparrow,j} + \chi_{\downarrow,j})}^{\chi_j} h = \chi_{dot} h \quad (5.6)$$

wird. Der Leitwert im SIAM lässt sich nach Gl. (2.24) über die Besetzung ausdrücken. Da die Funktion  $\sin^2$   $\pi$ -periodisch ist können wir bei  $h = 0$  von  $n_\uparrow = n_\downarrow = \frac{1}{2}$  im Dot ausgehen. Eine zusätzliche Besetzung des Dots mit einer geraden Anzahl Elektronen ändert die Gleichung nicht.



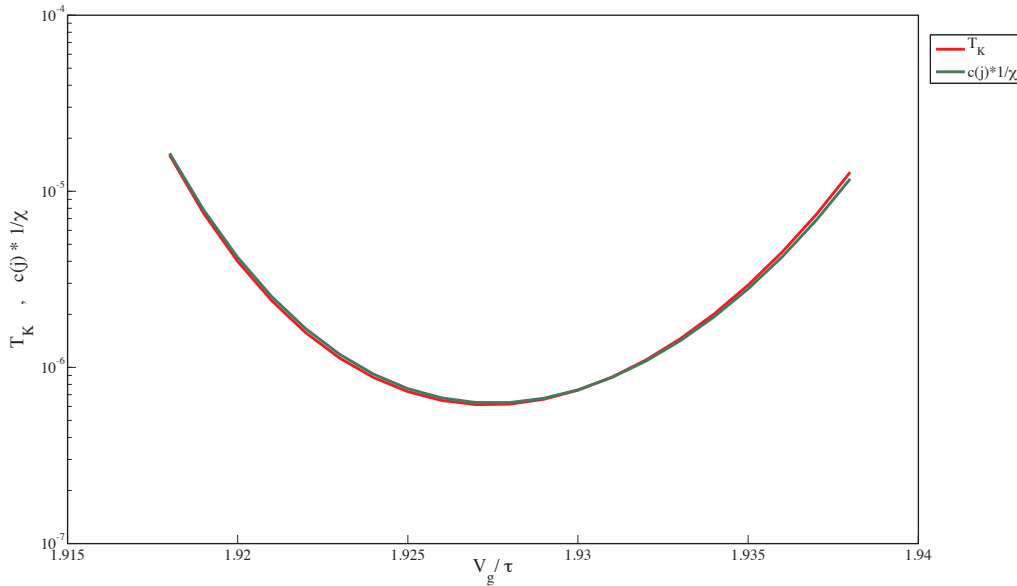
$$\begin{aligned}
G(h) &= g_0 [\sin^2(\pi n_\uparrow(h)) + \sin^2(\pi n_\downarrow(h))] \\
&= g_0 \left[ \sin^2\left(\frac{\pi}{2}(1 + \chi_{dot} h)\right) + \sin^2\left(\frac{\pi}{2}(1 - \chi_{dot} h)\right) \right] \\
&\approx g_0 \left[ 1 - \pi^2 \underbrace{(\chi_{\uparrow, dot}^2 + \chi_{\downarrow, dot}^2)}_{\sim \chi_{dot}^2} h^2 \right].
\end{aligned} \tag{5.7}$$

Damit folgt für den Zusammenhang zwischen  $T_K$  und  $\chi$ :

$$T_K \sim \frac{1}{\chi}. \tag{5.8}$$

Mehr noch: Die Skalierung der lokalen Suszeptibilität  $\chi_j$  entlang der Tight-Binding Kette zeigt, dass dieses Verhalten für jede Site  $j$  gelten muss:  $T_K = c(j) \frac{1}{\chi_j}$ .

In Abb. 5.8 sind  $T_K$  und  $c(250) \frac{1}{\chi_{250}}$  logarithmisch geplottet. Die beiden Kurven liegen nahezu deckungsgleich übereinander. Die Übereinstimmung mit dem SIAM ist ein starkes Indiz für eine qualitative Korrektheit der Dichteberechnung.



**Abbildung 5.8: Kondotemperatur und inverse Suszeptibilität:** An jedem Ort  $j$  existiert ein  $c(j)$ , sodass  $T_K = c(j) \frac{1}{\chi_j}$ . Die magnetfeldabhängige Dichte beinhaltet lokal Information über das magnetfeldverhalten des Leitwerts, obwohl dieser eine Folge der kompletten Potentiallandschaft ist.

Der Leitwert (und damit die Energieskala  $T_K$ ) wird über die Transmission durch die Barriere bestimmt (3.18). Der Wert des Elements  $G_{1,N}$  der greenschen Funktion enthält kollektive, aber keine lokale Information, da die Transmission eine Folge des Verlauf der gesamten Barriere ist. Die Dichte (und damit die Suszeptibilität) ist eine lokale Grösse. Für jede Site  $j$  wird das

Integral in Gl. (3.17) ausgewertet. Es ist bemerkenswert, dass nicht nur die globale Dichte  $\sum_j n_j$  die Information über das Magnetfeldverhalten des Leitwerts trägt, sondern auch die lokale Dichte  $n_j$ .

Unser Modell zeigt alle Signaturen des Kondoeffekt bei  $T = 0$ :

- Der Leitwert nimmt seinen maximalen Wert  $G = 2 \frac{e^2}{h}$  an
- Die Phase ist auf  $\frac{\pi}{2}$  gepinnt
- Ein angelegtes Magnetfeld zerstört den Kondoeffekt gemäß einer Tieftemperaturskala  $T_K \sim e^{-\pi \frac{V_g(V_g+U)}{\Gamma U}}$  mit geeignetem  $U$  und  $\Gamma$
- Die Suszeptibilität lässt sich mit  $T_K$  skalieren

Wir sind also in der Lage, für beliebige Parameter  $V_g$  und  $V_{sg}$  des Potentials, Voraussagen über Kondophysik zu treffen. Der Kondoeffekt wird durch einen lokalisierten Spin in einem ansonsten unlokalisierten Fermisee erzeugt. Es ist im Allgemeinen nicht zu erwarten, dass sich in einem Quantenpunktkontakt (QPC), also einem Potential ohne lokales Minimum, eine solch starke Spinlokalisierung, bei kleinem oder verschwindendem Magnetfeld, einstellt. Dennoch gab es seit Entdeckung der 0.7 Anomalie sowohl zahlreiche theoretische Versuche die Leitwert-Anomalie mit der Kondophysik in Verbindung zu bringen, als auch vielfältige experimentelle Untersuchungen zu diesem Thema. Die Bildung eines lokalisierten Spins, beim Übergang eines geschlossenen in einen offenen Kanal, wird bis heute kontrovers diskutiert.

## 5.2 Der Übergang vom Quantendot zum Quantenpunktkontakt

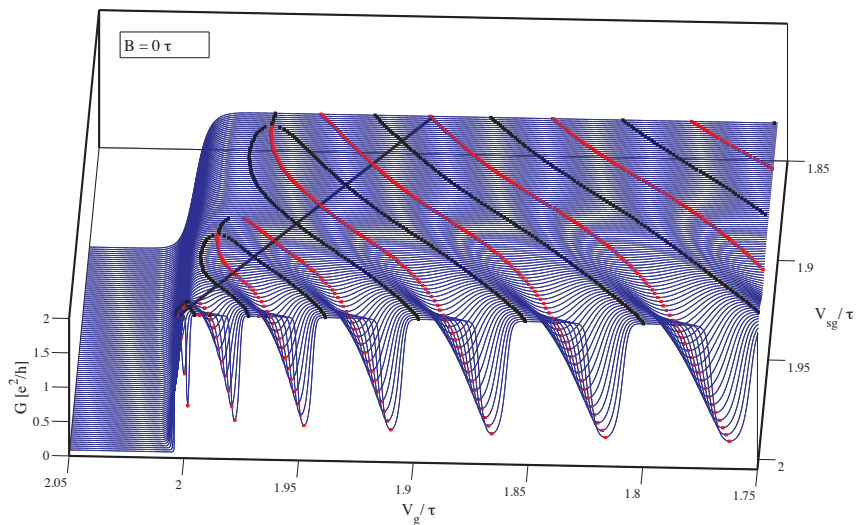
Die 0.7 Anomalie tritt im Bereich des Pinchoffs auf. Beim Übergang vom leeren Kanal zu einer stromtragenden Mode, bildet sie sich bei endlichem Magnetfeld oder endlicher Temperatur. Die Art und Weise wie das geschieht erinnert entfernt an den Kondoeffekt im QD: Der Leitwert wird durch Erhöhung von  $B$  und  $T$  unterdrückt, im QD allerdings auf einer deutlich kleineren Energieskala. Doch während die Zwischenstufe am Pinchoff bei Erhöhung der Temperatur immer deutlicher hervortritt, ist ein solches Verhalten beim Kondoeffekt im Dot nicht zu beobachten. Kondoeffekt und 0.7 Anomalie zeigen also Gemeinsamkeiten, aber auch Unterschiede.

In den letzten Jahren gab es zahlreiche theoretische Versuche die 0.7 Anomalie durch den Kondoeffekt zu erklären. Der bekannteste ist wohl eine Nature-Veröffentlichung von Meir et al. [12]. Meir benutzt DFT (Dichte-Funktional-Theorie) und füttert sein Modell mit einer Potentialform, die er aus selbstkonsistenten Rechnungen gewonnen hat. Nach diesem Modell bilden sich links und rechts des Potentialmaximums zwei Gebiete mit lokalisiertem Spin. Die Dichterechnungen zeigen in diesem Bereich ein lokalisiertes Elektron. Da Meir in seinem Modell die Spinsymmetrie bricht, ist dazu kein Magnetfeld nötig. Es stellt sich allerdings die Frage, ob man Information über den Ursprung der 0.7 Anomalie gewinnen kann, wenn man a priori die Annahme eines Ungleichgewichts unterschiedlicher Spinorientierungen in ein Modell einfließen lässt.

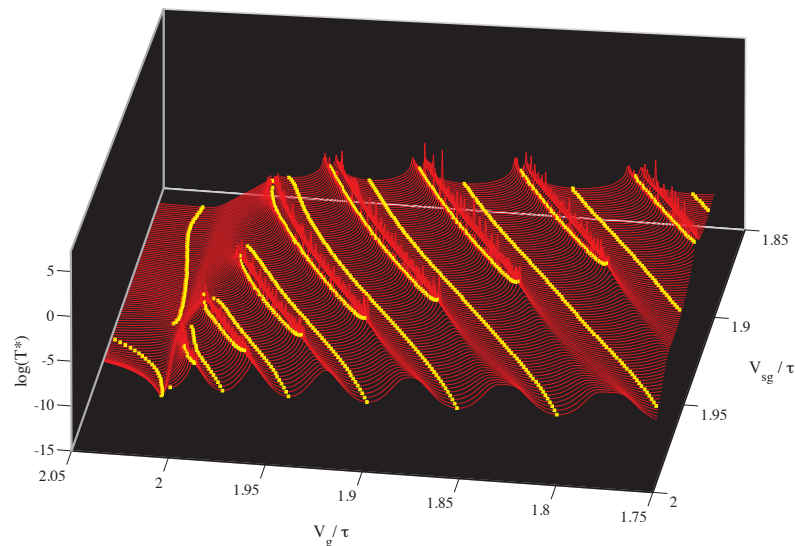
### 5.2.1 Leitwert und Energieskala

Die Parametrisierung des Potentials ermöglicht eine genaue Analyse des Übergangs von einem QD in einen QPC. Durch Variation der Parameter kann das Potential fließend von der Dotstruktur in eine Barrierenstruktur ohne lokales Minimum (QPC) übergehen. Abb. 5.9(a) zeigt den Leitwert als Funktion von  $V_g$  und  $V_{sg}$ , wobei Maxima im Leitwert schwarz und Minima rot markiert wurden. Für Werte von  $V_{sg} \approx 2$  und  $V_g < V_{sg}$  zeigen die Leitwertlinien ( $V_{sg} = \text{const}$ ) ausgeprägte Kondoplateaus. Erniedrigt man  $V_{sg}$ , so wird diese Struktur schnell schwächer. Die Fermienergie ist nun größer als das Potentialmaximum und eine Reflexion der Ladungsträger findet nur noch durch schwache Resonanzen, oberhalb der Barriere statt. Erreicht  $V_g$  die Fermienergie wird der Leitwert exponentiell abgeschnürt. Man nennt diesen Bereich den Pinchoff. Erst fließt noch ein Tunnelstrom, der, bei weiterer Erhöhung der Barriere, schnell komplett unterdrückt wird.

Abb. 5.9(b) zeigt das Verhalten der Energieskala als Funktion von  $V_g$  und  $V_{sg}$ . Minima sind in gelb dargestellt. Wie für das Kondoregime zu erwarten, fallen Minima in  $T_K$  und Maxima im Leitwert aufeinander. Interessanterweise setzt sich das typische QD-Verhalten weit in den offenen Kanal des QPC's fort, d.h. selbst in einem Potentialregime ohne lokales Minimum der Barriere scheinen signifikante Eigenschaften des Kondoeffekts erhalten zu sein. Erst bei Annäherung an den Pinchoff ändert sich das Verhalten: Kurven maximalen Leitwerts nähern sich an und vereinigen sich, bevor sich das so entstandene neue Maximum vom Pinchoff wegbiegt (Abb. 5.9(a)). Das Minimum der Energieskala läuft geradlinig bis in ein Regime nahe dem Pinchoff, in dem sich das Verhalten schlagartig ändert. Der Exponent, der im Kondoregime quadratisch in  $V_g$  war, vgl. Gl. 2.20, ist nun linear in  $V_g$ . Es ist instruktiv,



(a) **Der Leitwert als Funktion von  $V_g$  und  $V_{sg}$ :** Lokale Leitwertmaxima sind in schwarz, lokale Minima in rot dargestellt. Für große Werte von  $V_{sg}$  zeigen sich ausgeprägte Kondoplateaus mit  $G = 2e^2/h$ . Den Maxima im Leitwert folgend, gelangt man in den offenen Kanal ( $V_g > V_{sg}$ ) und bis nahe an den Pinchoff (Abschnürung des Leitwerts), an dem sich Kurven vereinigen und von ihm wegbiegen. Die schwarze diagonale Linie entspricht  $V_g = V_{sg}$ , also dem Übergang QD→QPC. Erstaunlich ist, dass sich Leitwertmaxima im QPC aus Kondoresonanzen zu entwickeln scheinen.



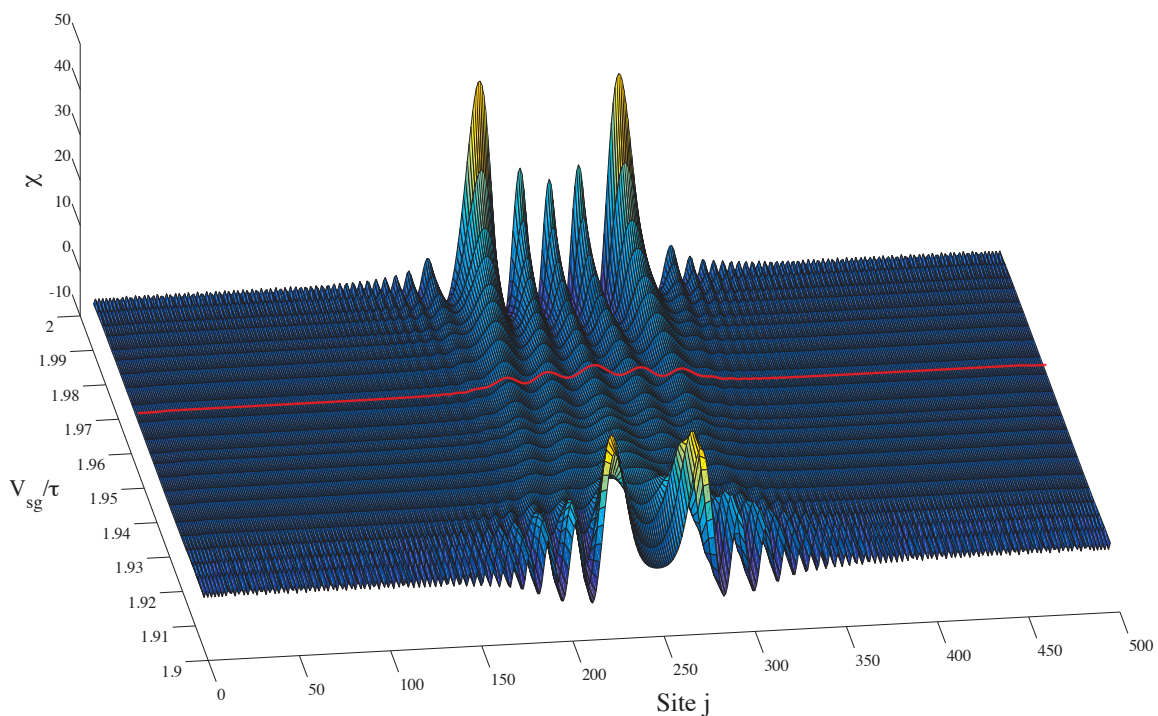
(b) **Die Energieskala als Funktion von  $V_g$  und  $V_{sg}$ :** Minima sind in gelb dargestellt. Für große Werte von  $V_{sg}$  mit dem Kondoeffekt assoziiert, laufen die Kurven minimaler Kondotemperatur geradlinig in den offenen Kanal und enden am Pinchoff. Dort verändert sich das Verhalten schlagartig. Beim Übergang von einem geschlossenen ( $V_g > \varepsilon_F$ ) in einen offenen Kanal ( $V_g < \varepsilon_F$ ) findet sich über einen weiten Bereich ein exponentieller Anstieg der Energieskala  $\propto e^{-V_g}$ .

**Abbildung 5.9:** Dreidimensionale Darstellungen von Leitwert und Energieskala

entlang dieser Kurven das System auf typische Kondoeigenschaften hin zu untersuchen. Neben einem maximalen Leitwert  $G = 2\frac{e^2}{h}$  und dem signifikanten Verlauf der Energieskala sind dies Eigenschaften der Suszeptibilität, sowie eine ungerade Anzahl Elektronen im Dot.

### 5.2.2 Entwicklung der Suszeptibilität

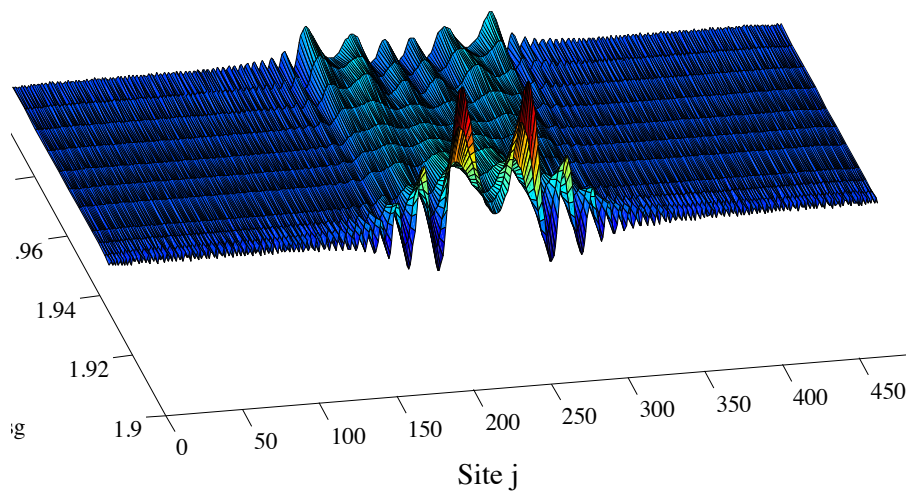
Die Suszeptibilität  $\chi(j)$  ist in Abb. 5.12 entlang zweier Kurven minimalen  $T_K$ 's gezeigt. Für grosse Werte von  $V_{sg}$  zeigt sich klar die Dotstruktur von  $\chi$ . Je weiter man in das QPC-Regime gelangt, desto geringer wird die Suszeptibilität. Während schon kleine Werte von  $h$  die Entartung von  $\varepsilon_d$  im Kondoregime aufheben und so zu einer starken Magnetisierung führen, ist im QPC für Werte  $V_g < \varepsilon_F$  die Antwort auf ein Magnetfeld gering, da die Zustände nicht lokalisiert sind. Die Wellenfunktionen der Teilchen beeinflussen einander kaum und die Antwort auf ein äusseres Feld ist folglich von der Größenordnung eins.



**Abbildung 5.10:** Die Suszeptibilität entlang einer Kurve minimalen  $T_K$ 's: Für kleine Werte von  $V_{sg}$  zeigt sich deutlich die Dotstruktur von  $\chi$  (vgl. Kapitel 2). Beim Übergang zum QPC nimmt die Suszeptibilität ab. Im Bereich des Pinchoff schließlich zeigt sie sich stark erhöht. In diesem Bereich scheint sich in einem Magnetfeld schnell ein lokalisierter Spin auszubilden.

Am Pinchoff nimmt die Suszeptibilität wieder zu. Für  $G \ll \frac{e^2}{h}$  erreicht der Betrag von  $\chi$  Werte ähnlich wie im QD. Schon für kleine Magnetfelder scheint sich in diesem Regime Spinlokalisierung einzustellen. Die Erhöhung der Suszeptibilität lässt sich als Wechselwirkungseffekt verstehen. Die geringe Dichte im Kettenzentrum erhöht die Wechselwirkung, was für eine starke Abgrenzung von  $\uparrow$ - und  $\downarrow$ -Domänen bei endlichem Magnetfeld sorgt. Anders ausgedrückt: Ein Barrierenmaximum nahe der Fermienergie führt zu einer grossen Wellenlänge

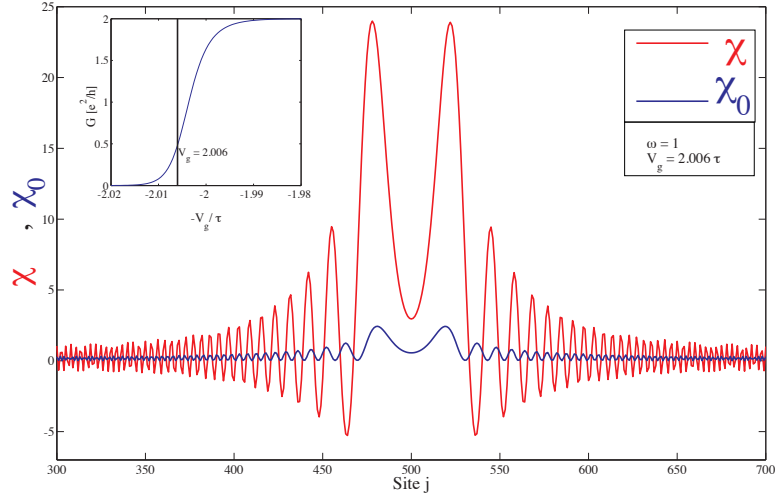
eines Leitungselektrons, die Propagationsgeschwindigkeit  $v = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$  nimmt ab und erhöht die Aufenthaltsdauer im Kanal. Das verstärkt die Wechselwirkung der Teilchen untereinander und führt zu erhöhter Suszeptibilität. Allerdings ist der Betrag der Suszeptibilität unerwartet hoch. Das  $\chi_{dot}$  und  $\chi_{QPC}$  am Pinchoff von der gleichen Größenordnung sind, lässt auf vergleichbare Spinlokalisierung schließen. Abb. 5.12 vergleicht  $\chi$  im wechselwirkenden Fall



**Abbildung 5.11: Die Suszeptibilität entlang eines even valley (minimaler Leitwert):** Wie zu erwarten ist im Dot bei gerader Besetzung die Suszeptibilität klein. Man sieht, dass sich am Pinchoff dennoch die Struktur in  $\chi$  einstellt, die zu einem lokalisierten Spin führen kann.

( $U = \tau$ ) mit  $\chi_0$  im wechselwirkungsfreien Fall für  $V_g = 2.006\tau$ , also im Regime exponentiell ansteigenden Leitwerts am Pinchoff. Die Suszeptibilität nimmt mit Wechselwirkung um einen Faktor zehn zu. Zusätzlich entstehen Bereiche negativer Antwort auf das Magnetfeld. Bei kleinem Magnetfeld bildet sich schnell ein lokalisierter Spin. Die Kopplung an unlokalierte

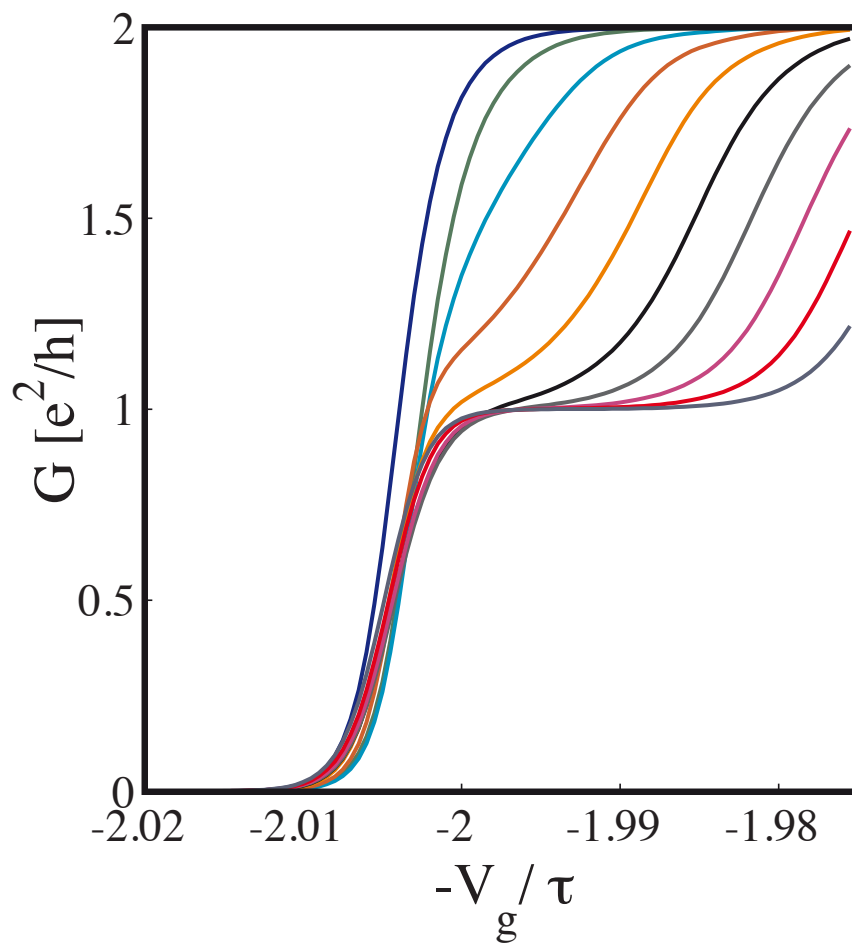
Leitungselektronen könnte zur Ausbildung einer Kondoresonanz führen. Die stark erhöhte Suszeptibilität am Pinchoff ist ein zentrales Ergebnis dieser Arbeit.



**Abbildung 5.12: Die Suszeptibilität am Pinchoff.** Ein endliches  $U$  führt zu einer starken Erhöhung von  $\chi$ . Die geringe Dichte im Barrierenmaximum bedingt eine erhöhte Wechselwirkung und verstärkt die Antwort auf das Magnetfeld. Es bildet sich ein lokaler Spin aus.

Die Dichte (und damit die Suszeptibilität) enthält keine energieaufgelöste Information.  $n_{dot} = n_{\uparrow,dot} + n_{\downarrow,dot}$  gibt zwar die Dichte über die Breite des Dots wieder, macht aber keine Aussage, welche Energie die besetzten Zustände besitzen. Es ist deshalb schwierig, das Verhalten der Dichte entlang einer Kurve minimalen  $T_K$ 's zu interpretieren. Für hohe Flanken ( $V_{sg} \approx \varepsilon_F$ ) ist die Dichte die Aufsummierung aller gebundenen Zustände im Dot. Sobald  $V_{sg}$  erniedrigt wird findet Transport nicht nur durch Energieniveaus im Dot, sondern auch oberhalb der Barriere statt. Die Spektraldarstellung der Dichte (bei  $T=0$  die Zustandsdichte) würde entscheidende Information über die jeweiligen Anteile liefern. Um das Problem einer genauen Auswertung deutlich zu machen betrachten wir zwei Dotpotentiale, die sich in der Höhe, nicht aber in der Geometrie des Dots unterscheiden ( $V_{sg} - V_g = const$ ). Beide Potentiale sind mit einer gleichen Anzahl Elektronen im Dot besetzt. Dennoch wird das niedrigere Potential eine höhere Dichte aufweisen, da eine grössere Anzahl Elektronen die nötige Energie besitzt die Barriere ungehindert zu überwinden. Solange sich das Potential im Dotregime befindet, lassen sich die verschiedenen Anteile noch separieren. Durch den Referenzwert der Dichte eines Potentials mit reinem Transport durch den Dot, kann für eine analoge niedrigere Potentialgeometrie der Beitrag von Elektronen oberhalb der Barriere ermittelt werden. Dies ist im QPC nicht mehr der Fall. Es ist nicht möglich zu erkennen, ob ein Teil der Dichte durch lokalisierte Zustände zustandekommt. Auf eine detaillierte Beschreibung der Dichte entlang ausgewählter Kurven wurde deshalb in dieser Arbeit verzichtet.

## Der Quantenpunktkontakt





## 5.3 Der Quantenpunktkontakt

### 5.3.1 Die Wahl des Potentials und der Krümmungsparameter $\omega$

Die Physik am Pinchoff wird hauptsächlich durch die Wechselwirkung und die Potentialform nahe der Fermienergie bestimmt.

Einlaufende Elektronen spüren aufgrund der Wechselwirkung nicht nur das nackte Potential, sondern zusätzlich elektronische Zustände im Bereich der Barriere. fRG modelliert das wechselwirkende System auf einen wechselwirkungsfreien effektiven Hamiltonian mit Potential  $V_{eff}$ . Die Potentialstruktur von  $V_{eff}$  unterscheidet sich mitunter stark von der ursprünglich gewählten Form. Insbesondere ist eine Verbreiterung im Maximum zu betrachten, sobald sich  $V_g$  der Fermienergie annähert. Die Lokalisierung eines Elektrons (und damit eines Spins) hat in einem wechselwirkungsfreien Modell keinen Einfluss. Erst die Wechselwirkung macht diesen für andere Teilchen sichtbar, was mitunter eine extreme Veränderung der Physik des Systems bewirken kann.

Die Krümmung des Potentials im Maximum beeinflusst die Form des Pinchoffs. Leitwertkurven für verschiedene Potentialkrümmungen lassen sich entlang  $V_g$  skalieren: Hohe Krümmungen führen zu einem breiten Pinchoff, da das schmale Potential eine hohe Transmission zulässt. Dagegen wird der Leitwert im Fall einer breiten Barriere auf einer kleineren Skala von  $V_g$  unterdrückt.

Wir verwenden deshalb zur Simulation des QPC's als natürliche Wahl ein Potential, dessen Form nur von einem Parameter  $\omega$  abhängt, der die Krümmung im Potentialmaximum bestimmt. Die Höhe des Potentials wird weiterhin mit dem Parameter  $V_g$  reguliert.

$$V_j = V_g - \frac{1}{2}\omega^2 j^2 \quad (5.9)$$

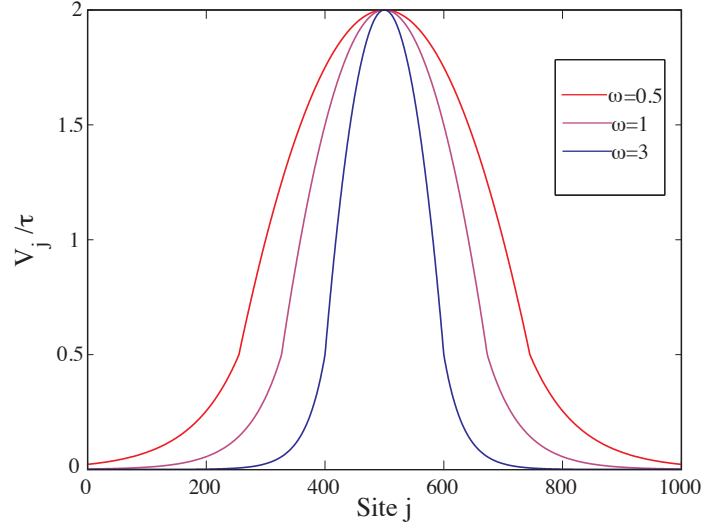
Ein exponentieller Abfall an den Kettenenden verhindert Randeffekte und gewährleistet die Simulation adiabatischen Transports durch den Kanal.

### 5.3.2 Der Pinchoff

Der Verlauf des Leitwerts ist durch die Transmission gegeben. Diesbezüglich lässt sich der Pinchoff in zwei Bereiche unterteilen:

- $V_g < \varepsilon_F$ : Die Transmission wird durch Rückstreuung oberhalb der Barriere erniedrigt
- $V_g > \varepsilon_F$ : Die Transmission wird durch den Tunneleffekt ermöglicht

Die Form des Leitwerts zeigt für diese zwei Bereiche ein nahezu symmetrisches Verhalten (vgl. z.B. Abb. 5.14). Die Leitwertkurve lässt sich bei verschwindendem Magnetfeld und  $U = 0$  nach [39] durch die Funktion



**Abbildung 5.13: Das Potential des QPC:** Das Skalenverhalten bzgl.  $V_g$  wird durch  $\omega$  bestimmt.

$$G(V_G) \sim 2 \frac{e^2}{h} \cdot \frac{1}{1 + e^{\frac{1}{W}(V_g - \tilde{\varepsilon}_F)}} \quad (5.10)$$

nähern. Dabei ist  $W$  mit der Breite des Pinchoffs assoziiert.  $\tilde{\varepsilon}_F$  wird durch  $G(\tilde{\varepsilon}_F) = \frac{e^2}{h}$  definiert. Der Leitwert besitzt dort die Hälfte seines Maximalwerts.

Für  $V_g > \tilde{\varepsilon}_F$  wird Gl. (5.10) zu

$$G(V_g > \tilde{\varepsilon}_F) \sim 2 \frac{e^2}{h} e^{-\frac{1}{W}(V_g - \tilde{\varepsilon}_F)}, \quad (5.11)$$

zeigt also das typische exponentielle Abklingen von  $G$  als Funktion der Barrierenhöhe  $V_g$ .

Die Transmission durch das Potential in Gl. (5.9) lässt sich für  $V_g > \tilde{\varepsilon}_F$  durch eine einfache WKB-Rechnung approximieren. Entscheidend ist die Fläche des Potentials oberhalb  $\tilde{\varepsilon}_F$ :

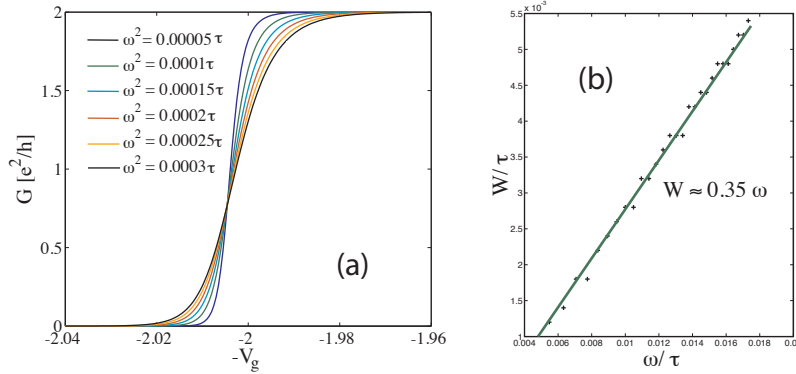
$$\begin{aligned} T &\sim e^{-2 \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{(V_g - \tilde{\varepsilon}_F - \frac{\omega^2 x^2}{2})} dx} \\ &= e^{-\frac{\pi}{\sqrt{2}\omega}(V_g - \tilde{\varepsilon}_F)}. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Wegen  $G \propto T$  folgt nach Vergleich mit Gl. (5.11) für die Pinchoffbreite

$$W \propto \omega. \quad (5.13)$$

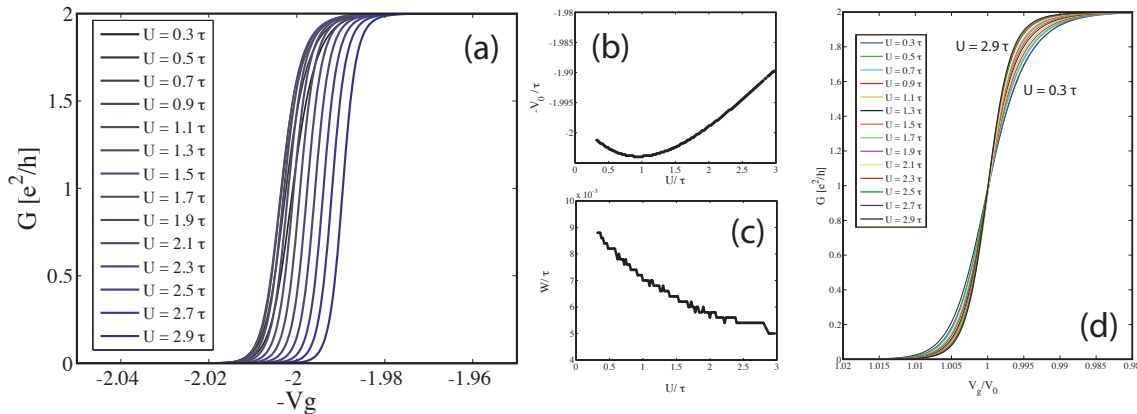
Obwohl diese Näherung nur im Fall  $U = 0$  Anspruch auf Gültigkeit besitzt findet sich ein analoges Verhalten auch für wechselwirkende Elektronen. Abb. 5.14(a) zeigt den Leitwertverlauf für  $U = 1$  bei unterschiedlichen Werten des Parameters  $\omega$ . In Abb. 5.14(b) wird der

lineare Zusammenhang zwischen  $W$  und  $\omega$  deutlich. Die Abweichung des Vorfaktors beträgt gegenüber dem nicht wechselwirkenden Fall rund 10%.



**Abbildung 5.14: Abhängigkeit des Pinchoffs von  $\omega$ :** (a) Die Krümmung des Potentials beeinflusst die Breite und Steigung der Abschneuerung. Die Transmission ist mit der Potentialfläche oberhalb der Fermienergie korreliert und bedingt einen breiteren Pinchoff für eine schmale Barriere.

Im Gegensatz zur Potentialkrümmung verschiebt eine Variation von  $U$  den Pinchoff. Abb. 5.15(a) zeigt den Leitwert für Werte von  $0.3\tau$  bis  $3\tau$  bei konstantem  $\omega = 0.01$ . Die Position  $V_0$  des Pinchoffs verschiebt sich von  $U = 0.3\tau$  bis  $U = 1\tau$  zu grösseren  $V_g$ -Werten. Für stärkere Wechselwirkung wird der Pinchoff wieder zu kleineren  $V_g$ -Werten gedrängt (Abb. 5.15(b)). Während die Position des Pinchoff im Bereich  $0.3 < U < 1.7$  parabolisch mit  $V_g$  zu wandern scheint, ist der Zusammenhang bei grossen  $U$  linear. Eine Skalierung der Leitwertkurven Abb. 5.15(c) zeigt, dass die Steigung am Pinchoff für starke Wechselwirkung erhöht ist.



**Abbildung 5.15: Die Breite und Position des Pinchoffs in Abhängigkeit von  $U$ :**

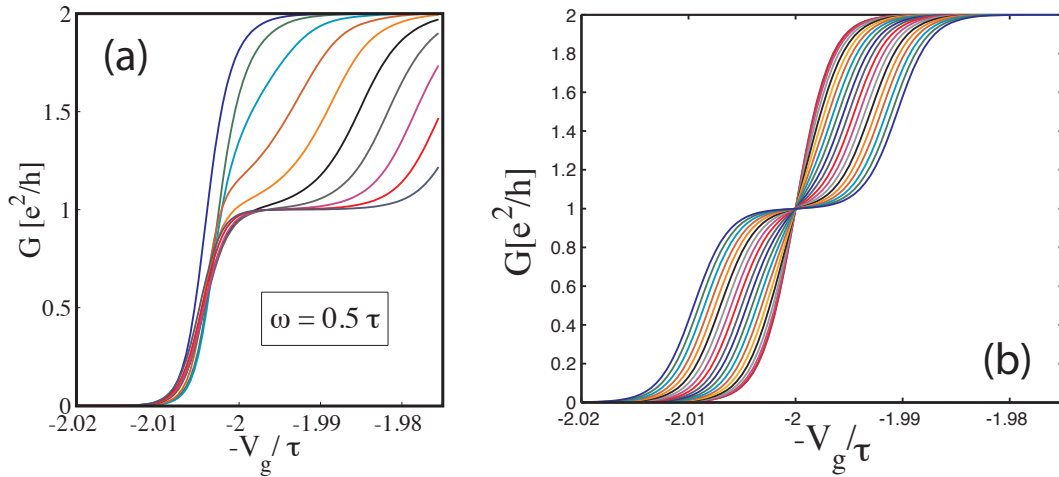
(a) Leitwertkurven bei verschiedenen Wechselwirkungen  $U$  für  $\omega = 0.01$ . (b):  $U$  als Funktion von  $V_0$ . Der Pinchoff verschiebt sich von  $U = 0.3$  bis  $U = 1$  zu höheren  $V_g$ -Werten. Für  $U > 1$  wird er zurückgedrängt. (c) Die Breite des Pinchoffs nimmt mit steigendem  $U$  zu. Der Bereich der Abschneuerung wird steiler. (d) Leitwertkurven auf  $\frac{V_g}{V_0}$  skaliert.

### 5.3.3 Die 0.7 Anomalie

In einem Magnetfeld wird die Symmetrie von  $|\uparrow\rangle$  und  $|\downarrow\rangle$  gebrochen. Elektronen mit einem Spin parallel zum Magnetfeld ( $\sigma = 1/2$ ) sehen ein erniedrigtes Potential, während Elektronen mit antiparallelem Spin zu  $h$  ( $\sigma = -1/2$ ) ein erhöhtes Potential vorfinden. Der Pinchoff spaltet sich in zwei Stufen auf; es entstehen zwei Submoden: Bei sukzessiver Erhöhung von  $V_g$  werden zunächst Elektronen mit Spin  $\downarrow$  die Barriere nicht mehr überwinden können, während  $\uparrow$ -Elektronen noch ungehindert durch den Kanal propagieren.

Abb. 5.16(a) zeigt das Leitwertverhalten am Pinchoff für unterschiedliche Magnetfelder bei  $U = 1$  und  $\omega = 1$ . Bei der sukzessiven Trennung der beiden Submoden durch ein steigendes Magnetfeld bildet sich eine Zwischenstufe bei  $G \approx 0.7g_0$ : die 0.7 Anomalie. Dieses schulterartige Plateau entwickelt sich von oben herab in eine spinaufgelöste Stufe bei  $G = 0.5g_0$  für hohe Magnetfelder.

In Abb. 5.16(b) findet sich der zugehörige Datensatz für  $U = 0$ . Dort bildet sich bei endlichem Magnetfeld direkt ein Plateau bei  $G = 0.5g_0$ . Der Abstand der Abschnürungen beider Submoden besträgt  $h$ , ist also die Zeemann-Energie.

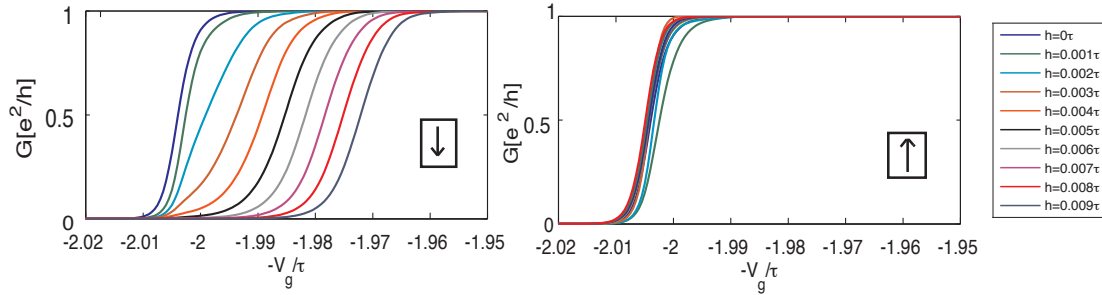


**Abbildung 5.16: Die Magnetfeldabhängigkeit des Leitwerts im QPC.**(a) Mit steigendem Magnetfeld trennen sich die Submoden  $\uparrow$  und  $\downarrow$ . Dabei bildet sich bei  $U \neq 0$  für mittlere Magnetfelder eine Zwischenstufe bei  $\sim 0.7g_0$  aus - Die 0.7 Anomalie. Der Vergleich mit dem Leitwert für  $U = 0$  in (b) identifiziert die schulterartige Zwischenstufe als reinen Wechselwirkungseffekt.

Es ist instruktiv, den Leitwert der beiden Submoden getrennt voneinander zu betrachten (Abb. 5.17). Man erhält dadurch ein genaueres Bild, wie aus der Überlagerung beider Leitwertkurven ein Zwischenplateau entsteht. Für das Zustandekommen sind 2 Voraussetzungen nötig:

- Die Abschnürungen beider Moden finden bei unterschiedlichen Werten von  $V_g$  statt.
- Die Steigungen der beiden Abschnürungen unterscheiden sich voneinander.

Punkt eins ist durch die Symmetriebrechung im Magnetfeld trivial gegeben, während Punkt zwei kontraintuitiv ist. Unterschiedliche Steigungen des Pinchoffs scheinen mit unterschiedlichen Krümmungen im Potentialmaximum einherzugehen. Das Zusammenspiel dieser beiden



**Abbildung 5.17: Leitwert der beiden Kanäle  $\uparrow$  und  $\downarrow$ .** (a) Mit Erhöhung des Feldes verschiebt sich der Pinchoff der  $\downarrow$ -Mode schnell zu kleineren  $V_g$ -Werten. Die Verschiebung  $\Delta E \gg h/2$  impliziert eine verstärkte Zeemanaufspaltung der Kanäle. Die Steigung des Pinchoff wird für mittlere Felder  $h$  kleiner. (b) Der Pinchoff der  $\downarrow$ -Mode zeigt keine Verschiebung bzgl. dem äußeren Feld für mittlere Magnetfelder. Allerdings erhöht sich die Steigung. Das Zusammenspiel der Leitwertkurven beider Kanäle bewirkt die 0.7 Anomalie.

Punkte ergibt das signifikante Erscheinen der 0.7-Anomalie. Der Effekt ist ein reiner Wechselwirkungseffekt. An ihm beißen sich Physiker seit Mitte der 90er die Zähne aus.

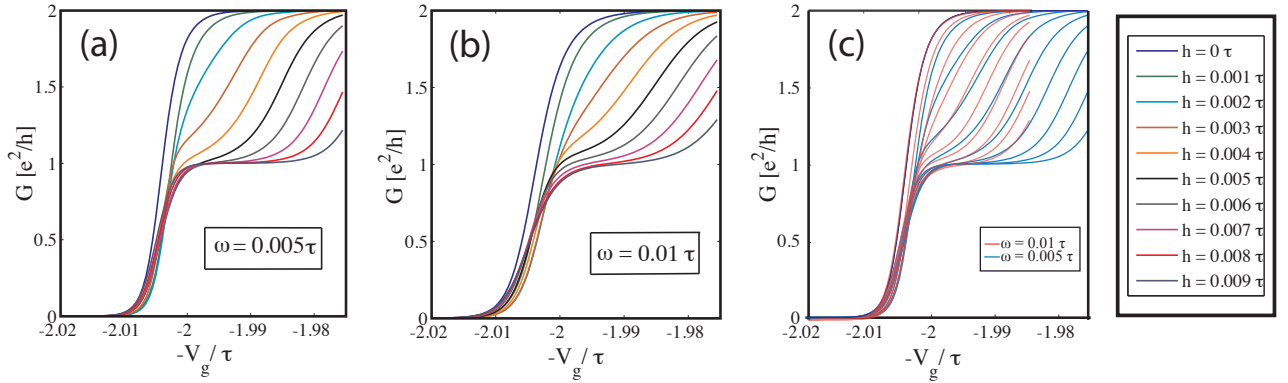
Bemerkenswert ist, dass sich der Pinchoff der  $\uparrow$ -Mode bei Anlegen eines Magnetfelds kaum verschiebt. Das effektive Potential scheint durch das Magnetfeld nicht erniedrigt, dafür aber verbreitert. Der Pinchoff wird steiler. Die Reaktion der  $\downarrow$ -Mode ist dagegen deutlich extremer als im Fall  $U = 0$ . Der Pinchoff verschiebt sich um ein vielfaches schneller zu niedrigeren  $V_g$ -Werten. Zusätzlich wird die Steigung bei Magnetfeldern im 0.7-Regime kleiner. Die Krümmung des effektiven Potentials scheint zuzunehmen.

### Das Leitwertverhalten für $U$ und $\omega$ im QPC

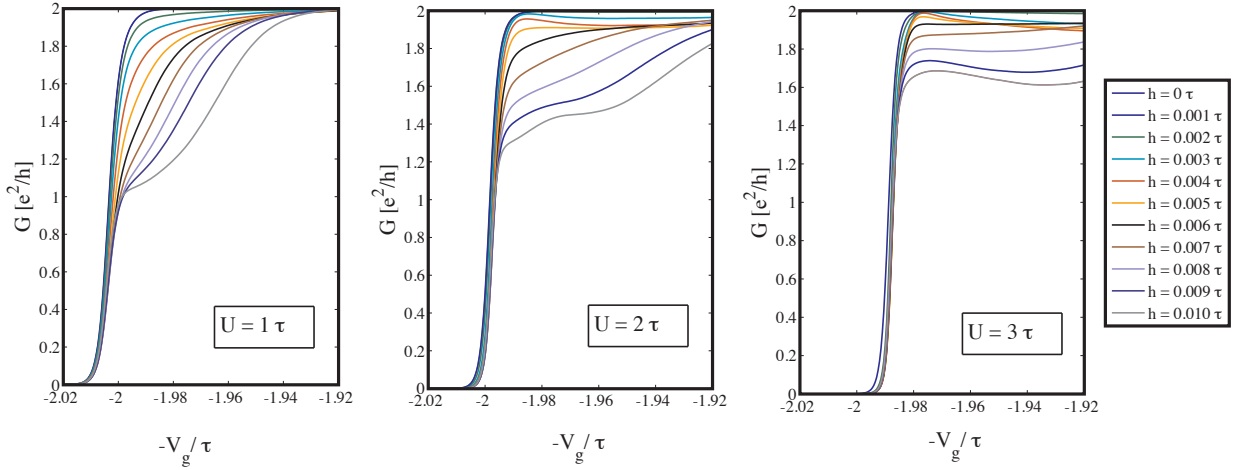
Abb. 5.18(a)-(b) zeigt die Magnetfeldabhängigkeit der Leitwertkurven im QPC bei  $\omega = 0.005\tau$  und  $\omega = 0.01\tau$ . Der Pinchoff mit zunehmender Krümmung des Potentials flacher. Die Leitwertkurven lassen sich bei  $h = 0$  durch  $V_g/\omega$  aufeinander abbilden. Diese Skalierung ist bei  $h \neq 0$  nicht mehr möglich, wie Abb. 5.18(c) zeigt. Während bei verschwindendem Magnetfeld die Leitwertkurven exakt aufeinanderliegen, weichen die Funktionsverläufe mit steigendem Magnetfeld mehr und mehr voneinander ab.

Um das Maximum des Potentials ist die Dichte gering, die Wechselwirkung der Elektronen untereinander also erhöht. Es ist wahrscheinlich, dass die Längenskala dieses Bereichs entscheidenden Einfluß auf die Magnetfeldabhängigkeit des Leitwert ausübt, da die Wechselwirkung um das Potentialmaximum verantwortlich für die Ausbildung der 0.7 Anomalie ist.

Bei der Variation von  $U$  zeigen sich noch extremere Unterschiede in den Leitwertkurven (Abb.5.19). Während für  $U = \tau$  die 0.7 Anomalie als schwache Zwischenstufe zu sehen ist dominiert sie im Fall  $U = 2\tau$  den Pinchoffbereich. Mit zunehmendem Magnetfeld wird sie immer markanter, bis sie schließlich ein völlig flaches Plateau bildet. Zusätzlich wird der Leitwert im offenen Kanal auf Werte unter  $G < 2e^2/h$  gedrückt. Erhöht man  $U$  weiter auf  $3\tau$ , so verschiebt sich die Stufe zu höheren Werten von  $G$ . Zusätzlich zeigen sich Oszillationen



**Abbildung 5.18:** Magnetfeldabhängigkeit des Leitwerts am Pinchoff für verschiedene Werte von  $\omega$ . Für  $h \neq 0$  lassen sich die Leitwertkurven nicht mehr durch  $V_g/\omega$  skalieren.



**Abbildung 5.19:** Die 0.7 Anomalie bei  $U = 1$ ,  $U = 2$  und  $U = 3$  mit der Potentialform  $\omega = 1$ : Während sich im Fall  $U = \tau$  die 0.7 Anomalie als schwache Zwischenstufe präsentiert, ist sie für  $U = 2$  die dominante Struktur. Für  $U = 3$  verschiebt sich die Stufe weiter nach oben und Oszillationen des Leitwerts werden im offenen Kanal sichtbar.

im Leitwert. Es ist nicht klar, ob fRG für solche Wechselwirkungsstärken noch verlässliche Leitwertdaten produziert.

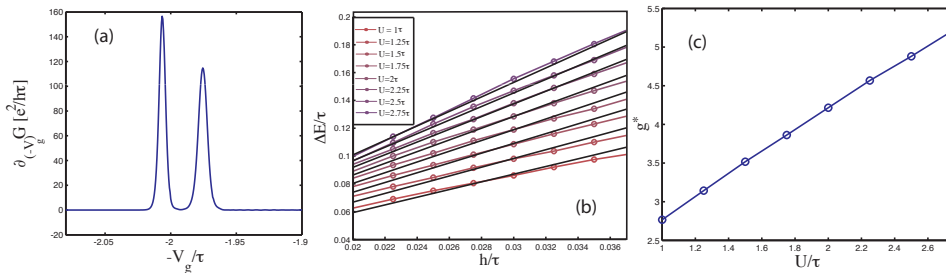
### 5.3.4 Der effektive g-Faktor

Berechnet man den energetischen Abstand der beiden Submoden anhand der Differenz  $\Delta V_g$  der Abschnürungen, so zeigt sich bei  $U \neq 0$  eine deutlich erhöhte Aufspaltung beider Kanäle. Abb. 5.20(a) zeigt die Änderung des Leitwerts entlang  $V_g$  für verschiedene Magnetfelder. Der Abstand beider Maxima gibt die energetische Aufspaltung  $\Delta E$  beider Spin-Moden, also den Abstand beider Stufen an. Es zeigt sich ein erwartetes lineares Verhalten für grosse Magnetfelder (Abb. 5.20(b)). Die Stärke der Aufspaltung und damit die Steigung von  $\Delta E$

als Funktion des Magnetfelds hängt von der Wechselwirkung  $U$  ab. Mit steigendem  $U$  laufen die beiden Moden schneller und schneller auseinander. Man erhält einen erhöhten effektiven  $g$ -Faktor  $g^*$ :

$$\Delta V_g = (1 + g(U)) \cdot h = g^*(U) \cdot h. \tag{5.14}$$

Abb. 5.20(c) zeigt  $g^*$  als Funktion von  $U$ . Der  $g$ -Faktor ist durch die Wechselwirkung stark erhöht. In Übereinstimmung mit Messungen von Koop et al. [19] ergibt sich bei  $U = \tau$  ein Wert  $g^* \approx 3$ .



**Abbildung 5.20: Die Berechnung des effektiven  $g^*$  im QPC**

(a) Die Steigung des Leitwertes  $-\frac{dG}{dV_g}$ . Die beiden Maxima geben die Position der Leitwertabschnürung von  $\uparrow$  und  $\downarrow$  an. (b) Die Energieaufspaltung  $\Delta E$  der Submoden für verschiedene  $U$ . Mit zunehmender Wechselwirkung erhöht sich die Steigung von  $\Delta E$ . (c) Der effektive  $g$ -Faktor  $g^*$  als Funktion von  $U$ . Die Wechselwirkung verstärkt die Energieaufspaltung der Submoden drastisch.

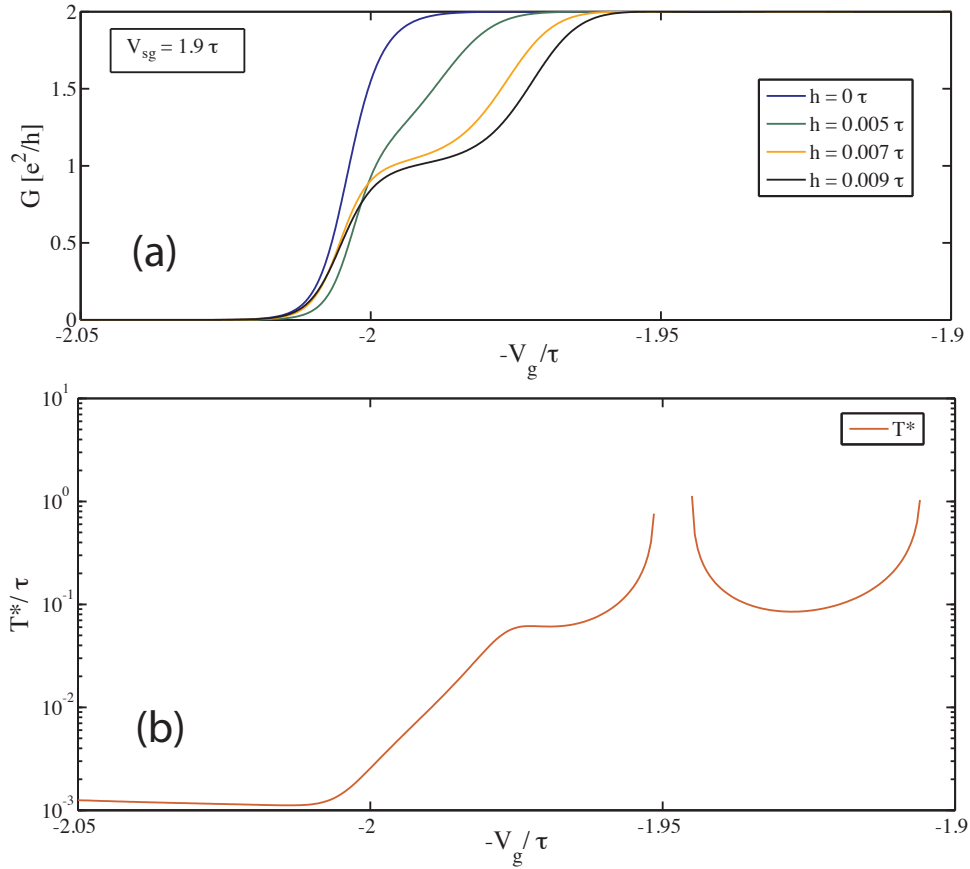
### 5.3.5 Die Energieskala $T^*$ im Quantenpunktkontakt

Die Auswertung des Magnetfeldverhaltens des Leitwert im QD zeigt, dass unser Modell alle Eigenschaften des Kondoeffekt bei  $T = 0$  wiedergibt. Die Tieftemperaturskala  $T_K$  und die Suszeptibilität  $\chi$  entsprechen den theoretischen Voraussagen des SIAM.

Der Leitwert zeigt auch im QPC für kleine Magnetfelder eine quadratische Abhängigkeit  $G = G_0(1 - \frac{\pi^2}{16}(\frac{h}{T^*})^2)$ . Wir nennen den Parameter, der die Krümmung von  $G$  bestimmt,  $T^*$ , da eine Spinlokalisierung und damit der Kondoeffekt in einem QPC seit Jahren kontrovers diskutiert werden.

Abb. 5.21 zeigt das Verhalten von  $T^*$ . Die Energieskala steigt am Pinchoff mit Erniedrigung der Potentialbarriere exponentiell an, d.h. je offener der Kanal wird, desto langsamer reagiert der Leitwert auf das äussere Feld. Anders als im Kondoregime eines QD's gilt für die Energieskala  $T^* \sim e^{-V_g}$ .

Das Verhalten der  $T^*$ -Kurve am Pinchoff findet sich generisch über den gesamten von uns verwendeten Parameterbereich. Dieser umfasst eine Veränderung vom  $\omega$  um mehr als eine Grössenordnung ( $0.04 < \omega < 0.0009$ ) sowie Wechselwirkungsstärken bis zu  $U = 5\tau$ . Die Kurve ist auch gegen eine grundsätzliche Veränderung der Potentialform robust. Genau wie die 0.7

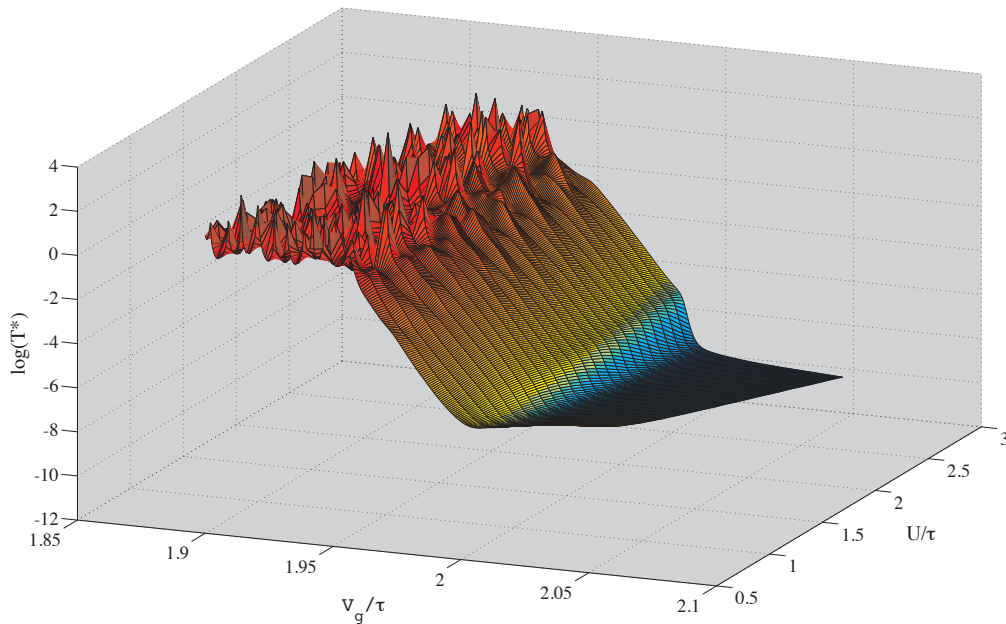


**Abbildung 5.21: Die Energieskala  $T^*$  im QPC:** (a) Der obere Teilplot zeigt den Leitwert im QPC für mehrere Magnetfelder. Für hohe Werte von  $V_g$  ist der Transport unterbunden. Mit sinkender Barrierenhöhe folgt der Pinchoff und schließlich der offene Kanal mit Leitwert  $G = 2 \frac{e^2}{h}$ . Mit steigendem Magnetfeld bildet sich die 0.7 Anomalie heraus. (b) Der Verlauf von  $T^*$  im QPC. Bei kleinen Werten des Leitwerts am Pinchoff beginnt ein exponentieller Anstieg der Energieskala, der sich über einen weiten Parameterbereich (von  $U$  und  $\omega$ ) reproduzieren lässt. Der Anstieg setzt sich in den offenen Kanal fort, bevor sich bei kleineren  $V_g$ -Werten kondoartige Strukturen ausbilden.

Anomalie scheint sie ein fester Bestandteil der Physik im Übergang von einem geschlossenen zu einem offenen Kanal zu sein.

Es ist erstaunlich, dass der exponentielle Anstieg von  $T^*(V_g)$  abbricht, sobald der Leitwert seinen Maximalwert erreicht. Solange sich der Leitwert bei verschwindendem Magnetfeld oberhalb von  $\frac{e^2}{h}$  befindet, ist die Unterdrückung zu Werten  $G < 2 \frac{e^2}{h}$  eine Folge von Reflexionen oberhalb der Barriere, bzw. von geradzahigen Besetzungen im Dotregime. Die Physik verändert sich schlagartig, sobald die Barriere eine gewisse Höhe erreicht, die jedoch weit unterhalb von  $\varepsilon_F$  liegt (in Abb. 5.21 bei  $V_g \sim 1.975\tau$ ). Obwohl ein offener Kanal vorherrscht, scheint das System die nahende Abschnürung am Pinchoff zu ‘spüren’. Betrachtet man in Abb. 5.21 das  $T^*$ -Minimum bei  $V_g = 1.93$ , so zeigt sich kein grosser Unterschied zu der  $T_K$ -Kurve im QD. Diese Parabelform ist unbedingt zu erwarten. Ein Vorhandensein des Kondoeffekts im QPC ist wissenschaftlich nicht belegt. Doch ist die Form von  $T^*$  unbestreitbar





**Abbildung 5.22:**  $T^*$  als Funktion von  $V_g$  und  $U$  bei  $\omega = \tau$ .

Der exponentielle Anstieg ( $S_1$ ) von  $T^*$  ist generisch über einen weiten Parameterbereich von  $U$  zu beobachten. Der Exponent zeigt keine charakteristische  $U$ -Abhängigkeit  $\rightarrow f(U, \omega) = \omega^\alpha$ . Ab Werten von  $U \sim 1.5\tau$  bildet sich eine zweite Stufe ( $S_2$ ) am Pinchoff aus, die mit zunehmender Wechselwirkung prägnanter wird.

anders als bei  $V_g = 1.975$  und Werten darüber. Das Verhalten ist mit einer einfachen Resonanz über der Barriere nicht zu erklären.

### Der Verhalten der $T^*$ -Skala als Funktion von $U$

Wie gezeigt hängen Position und Breite des Pinchoffs von  $U$  und  $\omega$  ab. Der exponentielle Anstieg von  $T^*$  beginnt am Pinchoff und setzt sich in den offenen Kanal fort. Es ist instruktiv zu untersuchen, ob und wie sich die Veränderung der Pinchoffgeometrie auf die Steigung der Energieskala auswirkt. Wir suchen also die  $U$ - und  $\omega$ -Abhängigkeit des Exponenten. In Abb. 5.24 ist der Verlauf von  $T^*(V_g)$  für unterschiedliche Werte von  $U$  bei  $\omega = 0.01\tau$  in einem dreidimensionalen Plot gezeigt. Auffallend ist die Ausbildung eines weiteren exponentiellen Bereichs ab  $U \sim 1.5\tau$ , der sich über die Breite des Pinchoffs erstreckt (Abb. 5.24)

Wir bezeichnen im Folgenden die beiden Exponenten mit  $\alpha_{1,2} = -f_{1,2}(U, \omega)V_g$ , so dass sich der Verlauf der Energieskala als

$$T^* \sim e^{\alpha_{1,2}} = e^{-f_{1,2}(U, \omega) \cdot V_g} \quad (5.15)$$

schreiben lässt.

Für die Auswertung wählen wir zwei unterschiedliche Wechselwirkungsprofile  $U_j$  entlang der Kette:

- Die Stärke der lokalen Wechselwirkung ist im gesamten Kanal konstant.
- $U_j$  folgt dem Potentialverlauf.

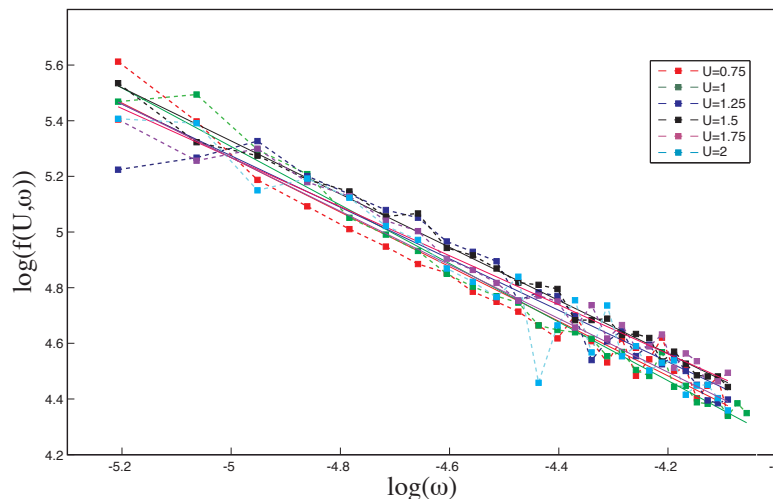
Befinden sich zwei Elektronen am gleichen Ort  $x_0$ , so hängt die Stärke der Wechselwirkung von der Breite der Kanals in  $y$ -Richtung ab. Je enger dieser ist, desto kleiner ist der mittlere Abstand der beiden Teilchen und desto grösser wird der Einfluss der Wechselwirkung. Die Wahl eines konstanten  $U_j$  impliziert also, dass sich die Kanalbreite entlang der Kette nicht ändert. Anders gesagt: An zwei Orten  $x_1$  und  $x_2$  im Kanal gilt:  $V(y, x_1) = \Delta E_0(x_1, x_2) + V(y, x_2)$ .

Folgt  $U_j$  dem Potential, so wird der Kanal mit zunehmender Barrierehöhe enger. Das ist der Fall, wenn bei  $y = 0$  entlang des ganzen Quantendrahts kein oder ein konstantes Potential anliegt. Die Levelposition hängt dann nur von der Breite des Kanals ab.

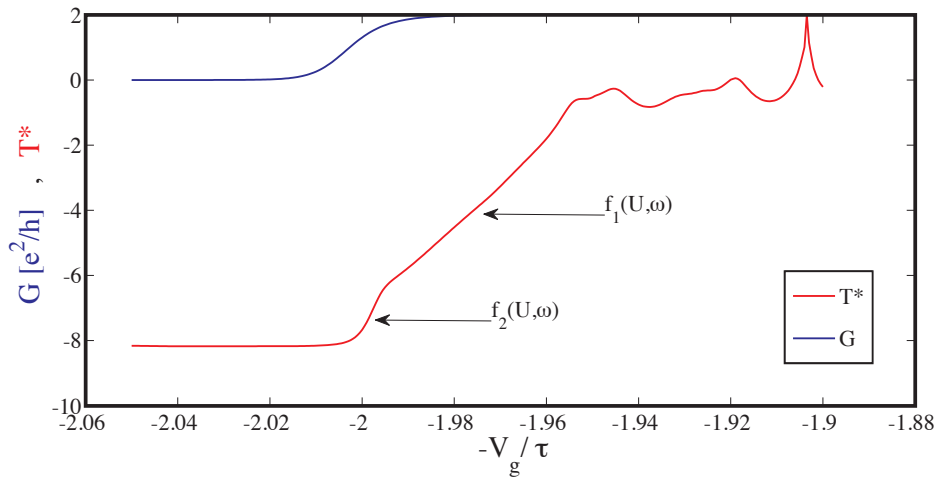
### Bestimmung von $f_1(\mathbf{U}, \omega)$

Abb. 5.23 zeigt einen doppellogarithmischen Plot von  $f_1(U_0, \omega)$  für sechs verschiedene Werte von  $U_0$ . Die Kurvenverläufe zeigen lineares Verhalten, die  $\omega$ -Abhängigkeit entspricht also einem Potenzgesetz:

$$f_1(U, \omega) = \omega^\gamma g(U). \quad (5.16)$$



**Abbildung 5.23:** Bestimmung der Funktion  $f_1(U, \omega)$  für ein konstantes  $U$  entlang der Kette. Im doppellogarithmischen Plot entspricht die Steigung (durchgezogene Fit-Linien) dem Exponenten  $\alpha$ . Der Ordinatenabschnitt ist durch  $g(U)$  gegeben.



**Abbildung 5.24:** Bestimmung der Funktion  $f(U, \omega)$  für ein konstantes  $U$  entlang der Kette. Im doppellogarithmischen Plot entspricht die Steigung (durchgezogene Fit-Linien) dem Exponenten  $\alpha$ . Der Ordinatenabschnitt ist durch  $g(U)$  gegeben.

Man erhält folglich  $\log[g(U)]$  als den Ordinatenabschnitt der Kurven. Die Werte für  $\gamma$  und  $g(U)$  sind in Tab. 5.1 zusammengestellt. Der Exponent  $\gamma$  zeigt keine spezifische  $U$ -Abhängigkeit. Man erhält

$$\gamma = -0.96 \pm 0.08 \approx -1 \quad (5.17)$$

Der Fehler in  $\gamma$  ist zu gross, um durch Extrapolation der Geraden  $g(U)$  zu erhalten.  $f_1$  scheint als Funktion von  $U$  schwach um einen konstanten Wert  $g_u \sim 1.3$  zu oszillieren. Es zeigt sich, dass man die  $U$ -Abhängigkeit des Exponenten vernachlässigen kann, um qualitativ richtige Ergebnisse für  $f_1(U, \omega) \sim \frac{g_u}{\omega}$  zu erhalten.

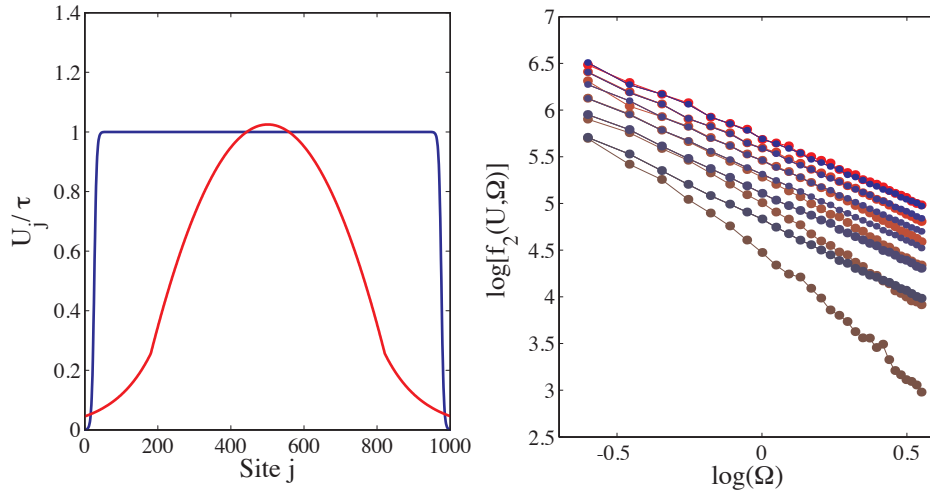
$U$	0.75	1	1.25	1.5	1.75	2
$\gamma$	-0.9807	-1.0518	-0.9256	-0.9556	-0.8817	-0.9639
$\log g(U)$	1.3956	1.4347	1.1384	1.3278	1.1764	1.2619

**Tabelle 5.1:** Tabelle zur Bestimmung von  $\gamma$  und  $g(U)$ .

Zusammenfassend ergibt sich die Näherung

$$T^* \sim e^{-1.3 \frac{V_g}{\omega}}. \quad (5.18)$$

Eine analoge Auswertung mit  $U_j \propto V_j$  liefert im Rahmen der Fehler die gleichen Ergebnisse.

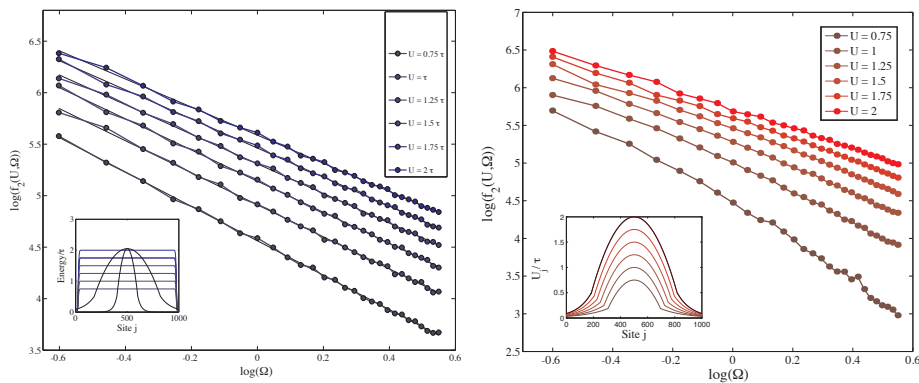


**Abbildung 5.25:** Bestimmung der Funktion  $f_2(U, \omega)$  für ein konstantes  $U$  entlang der Kette. Im doppellogarithmischen Plot entspricht die Steigung (durchgezogene Fit-Linien) dem Exponenten  $\alpha$ . Der Ordinatenabschnitt ist durch  $g(U)$  gegeben.

### Bestimmung von $f_2(U, \omega)$

Wir führen die gleichen Rechnungen nun auch für den exponentiellen Anstieg, der sich ab Werten von  $U = 1.5$  direkt am Pinchoff ausbildet, aus. Abb. 5.25 zeigt wieder den doppel-logarithmischen Plot von  $\omega$  gegen  $f_2(U, \omega)$ <sup>1</sup>. Unterschiedliche Werte der Wechselwirkung bedingen unterschiedliche Steigung und damit unterschiedliche Potenzen von  $\omega$ .  $g(U)$  ist streng monoton fallend, zeigt aber keinen einfachen analytischen Verlauf. Für  $U < 1$  zeigt sich eine Abhängigkeit von der Form der Wechselwirkung: Im

<sup>1</sup>Anmerkung: In 5.26 ist die x-Achse mit  $\log(\Omega)$  bezeichnet. Es gilt  $\omega=0.01\Omega$



**Abbildung 5.26:** Bestimmung der Funktion  $f(U, \omega)$  für ein konstantes  $U$  entlang der Kette. Im doppellogarithmischen Plot entspricht die Steigung (durchgezogene Fit-Linien) dem Exponenten  $\alpha$ . Der Ordinatenabschnitt ist durch  $g(U)$  gegeben.

---

Fall  $U_j \propto V_j$  ist eine deutliche Absenkung der Kurven bei großen  $\omega$  zu beobachten, die für  $U_j = \text{const}$  nur angedeutet ist. Eine Erklärung dafür ist wahrscheinlich nicht in der Form von  $U_j$ , sondern im Betrag von  $\bar{U} = \sum_j U_j$  zu suchen.



## 6 Zusammenfassung

Die Quantisierung des Leitwerts in Einheiten von  $g_0 = 2e^2/h$  in einem eindimensionalen System mit geringer Dichte, einem QPC, wurde theoretisch in den 50er Jahren vorhergesagt [10] und Ende der 80er bestätigt [6]. Zusätzlich zu dieser Quantisierung findet sich beim Übergang von einem geschlossenen Kanal in einen Quantendraht eine Zwischenstufe bei  $\sim 0.7g_0$  - die 0.7 Leitwert-Anomalie. Bis heute konnte kein Modell aufgestellt werden, das die Eigenschaften dieser Anomalie vollständig beschreibt.

Diese Arbeit befasst sich mit der Beschreibung der Magnetfeld-Signatur der 0.7 Leitwert-Anomalie am Temperaturnullpunkt. Insbesondere werden Gemeinsamkeiten und Unterschiede zum Kondoeffekt in einem Quantendot erörtert.

**Kapitel 1** (Einleitung) dieser Arbeit gibt einen kurzen Einblick in die mesoskopische Physik - Insbesondere werden die Ansprüche an ein mesoskopisches System erörtert.

**Kapitel 2** befasst sich mit den Grundlagen der Physik in einem Quantendot und einem Quantenpunktkontakt. Besonders ausführlich werden dabei der Kondoeffekt im QD und die 0.7 Anomalie im QCP diskutiert, um für ein gutes Verständnis bei der Interpretation der gewonnenen Daten zu sorgen.

Die Beschreibung des Modells, das den Transport durch einen Quantenkanal mit Kopplung an zweidimensionale Elektronenreservoirs simulieren soll, wird in **Kapitel 3** (Das Modell) vorgenommen. Es wird gezeigt, auf welche Weise physikalische Größen in das Modell einbezogen werden müssen, um eine möglichst genaue Beschreibung der Realität zu gewährleisten.

**Kapitel 4** stellt kurz die Methode fRG vor. Wegen mehrfachem Vorkommens in der Literatur wird auf eine genaue Herleitung der fRG-Flussgleichungen verzichtet. Auf die Ausarbeitung dieser Gleichungen für unser Modell wird ebenfalls nur referenziert.

In **Kapitel 5** werden die Ergebnisse der Rechnungen präsentiert.

**Kapitel 5.1** (Der Quantendot) zeigt, dass unser Model alle Eigenschaften des Kondoeffekts im Quantendot am Temperaturnullpunkt wiedergibt. Dazu gehören:

- ein maximaler Leitwert bei verschwindendem Magnetfeld,
- eine signifikante Unterdrückung des Leitwerts bei endlichem Magnetfeld, abhängig von der Levelposition des einfach besetzten Zustands im Dot, und daraus die Ableitung einer charakteristischen Energieskala  $T_K$ ,
- die Phasenverschiebung eines Zustands um  $\pi/2$  bei der Propagation durch den Dot,

- eine charakteristisch hohe Suszeptibilität im Dotbereich, die sich entlang eines Kondoplateaus skalieren lässt,
- die Proportionalität zwischen der Energieskala  $T_K$  und der inversen Suszeptibilität gemäss der Vorhersage der SIAM.

**Kapitel 5.2** (Der Übergang vom Quantendot zum Quantenpunktkontakt) beschreibt den Übergang vom QD zum QPC durch eine sukzessive Veränderung der Potentialform. Erstaunlich ist, dass Eigenschaften des Kondoeffekts bis weit in den Bereich des QPC erhalten bleiben. Eine minimale Kondotemperatur bedingt einen maximalen Leitwert. Als Funktion der Potentialhöhe zeigt der Logarithmus der Energieskala die charakteristische Parabelform. Wie zu erwarten nimmt die lokale Suszeptibilität im QPC ab, zeigt sich jedoch im Bereich des Pinchoff durch die Wechselwirkung anomal erhöht. Bei Größenordnungen des Magnetfelds, in denen die 0.7 Anomalie auftritt hat sich um das Potentialmaximum ein lokalisierter Spin formiert. Dieser könnte die Ursache für die Zwischenstufe im Leitwert sein.

In **Kapitel 5.3** (Der Quantenpunktkontakt) werden die Eigenschaften des Leitwerts im Bereich des Pinchoff untersucht. Bemerkenswerterweise lässt sich analog zum QD eine Energieskala  $T^*$  definieren. Am Pinchoff findet sich ein Bereich exponentiellen Anstiegs von  $T^*$ . Dieser zeigt sich generisch in allen Datensätzen. Ein äquivalentes Verhalten der Energieskala fanden Cronenwett et al. [40] aus temperaturabhängigen Daten, der exponentielle Anstieg wird auch von Lunde et al. [41] diskutiert.  $T^*$  nimmt in diesem Bereich um ungefähr zwei Größenordnungen zu. Eine Untersuchung des exponentiellen Verlaufs durch die Variation geeigneter Systemgrößen zeigt einen einfachen Zusammenhang  $T^* \propto e^{V_g/\omega}$ , wobei  $V_g$  die Höhe des Potentialmaximums angibt. In Übereinstimmung mit [19] findet sich ein erhöhter g-Faktor, der linear mit der Stärke der Wechselwirkung anwächst.

Die gewonnenen Ergebnisse liefern entscheidende Informationen für die Aufstellung eines Minimalystems zur Beschreibung der 0.7 Leitwert-Anomalie. In der nahen Zukunft soll der Einfluss des lokalisierten Spins auf das Transportverhalten durch den QPC anhand eines solchen Modells untersucht werden. Außerdem wird die Arbeit, an einer Erweiterung des fRG-Formalismus zur Beschreibung des Systems bei endlicher Temperatur und endlicher Spannung zwischen den Elektronenreservoirs, fortgesetzt. Bei einer Bestätigung der Temperaturabhängigkeit der 0.7 Anomalie sowie des Leitwertverhaltens im Nichtgleichgewicht besäßen wir ein hochvariables Modell, dass alle Eigenschaften der 0.7 Anomalie wiedergeben kann. Eine systematische Auswertung könnte entscheidende Hinweise auf den Mechanismus hinter der Anomalie liefern.



# Literaturverzeichnis

- [1] S. Kehrein. Mesoskopische Physik, 2008.
- [2] Zu-Po Yang, Lijie Ci, James A. Bur, Shawn-Yu Lin, and Pulickel M. Ajayan. Experimental observation of an extremely dark material made by a low-density nanotube array. *NANO LETTERS*, 2008.
- [3] John J. Rehr. Materials sciencenanostructures in a new league. *Nature*, 440(7084):618–619, March 2006.
- [4] Klaus von Klitzing. The quantized hall effect. *Rev. Mod. Phys.*, 58(3):519–531, Jul 1986.
- [5] N. D. Mermin and H. Wagner. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic heisenberg models. *Physical Review Letters*, 17(22):1133–1136, Nov 1966.
- [6] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, and C. T. Foxon. Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. Lett.*, 60(9):848–850, Feb 1988.
- [7] W.J. Beenakker and H. van Houten. Quantum transport in semiconductor nanostructures. *Solid State Physics*, 44, 1991.
- [8] J.M.Luttinger. An exact soluble model of a many-fermion system. *J.Math.Phys*, 1154(4), Sep 1963.
- [9] Jun Kondo. Resistance minimum in dilute magnetic alloys. *Prog. Theor. Phys.*, 32:37–49, 1964.
- [10] R.Landauer. *IBM J.Res.*, Dev.1(233), 1957.
- [11] K. J. Thomas, J. T. Nicholls, M. Y. Simmons, M. Pepper, D. R. Mace, and D. A. Ritchie. Possible spin polarization in a one-dimensional electron gas. *Phys. Rev. Lett.*, 77(1):135–138, Jul 1996.
- [12] Yigal Meir. The theory of the ”0.7 anomaly” in quantum point contacts. 2007.
- [13] Marco Frasca. Fully polarized states and decoherence, 2005.
- [14] Supriyo Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press, 1997.
- [15] F. Bauer. 0.7 anomaly of quantum point contacts treatment of interaction with functional renormalization group, 2008.
- [16] Volker Meden. Funktionale renormierungsgruppe. 2002.

- [17] F. Marquardt. Lecture notes on mesoscopic physics, 2006. [www.theorie.physik.uni-muenchen.de/~florian/meso06.html](http://www.theorie.physik.uni-muenchen.de/~florian/meso06.html).
- [18] Yigal Meir. The theory of the "0.7 anomaly" in quantum point contacts, Oct 2007.
- [19] E. J. Koop, A. I. Lerescu, J. Liu, B. J. van Wees, D. Reuter, A. D. Wieck, and C. H. van der Wal. The influence of device geometry on many-body effects in quantum point contacts: Signatures of the 0.7 anomaly, exchange and kondo. *Journal of Superconductivity Incorporating Novel Magnetism*, 20:433, 2007.
- [20] W. J. de Haas, J. H. de Boer, and G. J. van den Berg. The electrical resistance of gold, copper, and lead at low temperatures. *Physica (Utrecht)*, 1:1115, 1934.
- [21] A.C. Hewson. *The Kondo Problem to heavy Fermions*. Cambridge University Press Cambridge, 1993.
- [22] I. Affleck and A.W.W. Ludwig. Exact conformal-field-theory results on the multichannel kondo effect: Single-fermion green's function, self-energy, and resistivity. *Phys. Rev. B*, 48(10):7297–7321, Sep 1993.
- [23] Ian Affleck, Andreas W. W. Ludwig, H.-B. Pang, and D. L. Cox. Relevance of anisotropy in the multichannel kondo effect: Comparison of conformal field theory and numerical renormalization-group results. *Phys. Rev. B*, 45(14):7918–7935, Apr 1992.
- [24] Frithjof B. Anders, Eran Lebanon, and Avraham Schiller. Coulomb blockade and non-fermi-liquid behavior in quantum dots. *Phys. Rev. B*, 70(20):201306, Nov 2004.
- [25] Frithjof B. Anders and Avraham Schiller. Spin precession and real-time dynamics in the kondo model: Time-dependent numerical renormalization-group study. *Phys. Rev. B*, 74(24):245113, 2006.
- [26] N. Andrei and C. Destri. Solution of the multichannel kondo problem. *Phys. Rev. Lett.*, 52(5):364–367, Jan 1984.
- [27] D. Goldhaber-Gordon, Hadas Shtrikman, D. Mahalu, David Abusch-Magder, U. Meirav, and M. A. Kastner. Kondo effect in a single-electron transistor. *Nature*, 391:156–159, 1998.
- [28] P. W. Anderson. Localized magnetic states in metals. *Phys. Rev.*, 124(1):41–53, Oct 1961.
- [29] P W Anderson. A poor man's derivation of scaling laws for the kondo problem. *J. Phys.C: Solid State Phys.*, 3(12):2436–2441, 1970.
- [30] Ulrich Gerland, Jan von Delft, T. A. Costi, and Yuval Oreg. Transmission phase shift of a quantum dot with kondo correlations. *Phys. Rev. Lett.*, 84(16):3710–3713, Apr 2000.
- [31] P Nozieres. A "fermi-liquid" description of the kondo problem at low temperatures. *J. Low Temp. Phys.*, 17:31–42, 1974.
- [32] W. G. van der Wiel, S. De Franceschi, T. Fujisawa, J. M. Elzerman, S. Tarucha, and L. P. Kouwenhoven. The kondo effect in the unitary limit. *Science*, 289(5487):2105–2108, 2000.

- 
- [33] N.W Ashcroft and N.D. Mermin. *Solid State Physics*. Cengage Learning Services, 1976.
- [34] C. Karrasch, T. Enss, and V. Meden. Functional renormalization group approach to transport through correlated quantum dots. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 73(23):235337, 2006.
- [35] Kenneth G. Wilson. The renormalization group: Critical phenomena and the kondo problem. *Rev. Mod. Phys.*, 47(4):773–840, Oct 1975.
- [36] L.P.Kadanoff. scaling laws for ising models near  $t_c$ . *Physics*, (2):263, 1966.
- [37] L.I Glazman. Even smaller quantum dots. Boulder School for Condensed Matter und Materials Physics, 2005.
- [38] J Zinn-Justin. *Quantum field theorie and critical phenomena*. Oxford University Press, 1993.
- [39] M. Büttiker. Quantized transmission of a saddle-point constriction. *Phys. Rev. B*, 41(11):7906–7909, Apr 1990.
- [40] S. M. Cronenwett, H. J. Lynch, D. Goldhaber-Gordon, L. P. Kouwenhoven, C. M. Marcus, K. Hirose, N. S. Wingreen, and V. Umansky. Low-temperature fate of the 0.7 structure in a point contact: A kondo-like correlated state in an open system. *Phys. Rev. Lett.*, 88(22):226805, May 2002.
- [41] A. M. Lunde et al. Elektron-elektron interaction in quantum point contacts. *New J.Phys*, 11, 2009.



# Abbildungsverzeichnis

2.1	Schematische Darstellungen eines QPC . . . . .	8
2.2	Leitwertquantisierung . . . . .	8
2.3	Magnetfeldabhängigkeit des Leitwerts . . . . .	9
2.4	<b>Die Bestimmung des effektiven g-Faktors nach [19]. links:</b> Die Steigung des Leitwerts als Funktion der Gatterspannung. Die zwei Maxima einer jeden Mode bestimmen $\Delta E$ . <b>rechts:</b> Die Auftragung des Magnetfelds gegen die Submoden-Aufspaltung. Die Steigung bestimmt den effektiven g-Faktor. Der endliche Ordinatenabschnitt $\Delta E_0$ ist eine Folge der 0.7 Anomalie bei verschwindendem Magnetfeld und endlicher Temperatur. . . . .	10
2.5	<b>Temperaturabhängigkeit des Leitwerts</b> . . . . .	12
2.6	<b>Der elektrische Widerstand eines Metalls für tiefe Temperaturen:</b> In schwarz der Widerstand nach der Matthiasschen Formel, in <b>rot</b> der Verlauf für ein Metall mit magnetischen Verunreinigungen (Kondoeffekt), in <b>blau</b> der Verlauf für einen Supraleiter . . . . .	13
2.7	<b>Typische Gatterstruktur zur Erzeugung eines Quanten Dot [27]</b>	15
2.8	<b>links:</b> Die Grundzustandsenergie $\varepsilon_d$ des Dots liegt oberhalb von $E_F + \Gamma$ . Der Dot ist leer, da die Zustandsdichte im Dot über die gesamte Breite der Leadbänder null ist. <b>rechts: Mixed valence regime.</b> $\varepsilon_d$ ist im Bereich $\Gamma$ um die Fermienergie. Elektronen können in den Dot hinein- und aus ihm heraustunneln. Die mittlere Besetzung $\langle n_d \rangle$ liegt zwischen null und eins. . . . .	16
2.9	<b>Der Dot im Kondoregime:</b> Das Dot-Elektron kann in das Lead tunneln, wenn ein Elektron aus dem Fermisee seinen Platz im Dot einnimmt. Es bildet sich ein Resonanz an der Fermienergie mit der Breite $T_K$ im Dot, die zu maximalem Transport führt. Der Dot wird maximal transparent. . . . .	17
2.10	<b>Der Leitwert als Funktion von <math>V_g</math> für verschiedene Werte der Temperatur.</b> Das Inlay unten rechts zeigt die Änderung des Leitwerts mit der Temperatur bei einer festen Gatterspannung $V_g$ . Für kleine Temperaturen besitzt $G(T)$ die Form einer Parabel. . . . .	17
2.11	<b>Magnetfeldabhängigkeit des Leitwerts im Kondoregime</b> . . . . .	19

- 3.1 **Das Modell:** Hier eine schematische Darstellung des Modells, das aus zwei Bereichen besteht. In der Mitte ist die Kontaktregion dargestellt, in der das Potential modelliert wird. Sie ist am Rand an zwei unendliche Lead-Ketten gekoppelt, die die Reservoirs darstellen . . . . . 24
- 5.1 **Das Potential zur Simulation eines QD's.** Der Parameter  $V_g$  definiert die Tiefe des Dots, während  $V_{sg}$  die Höhe der Flanken bestimmt. Der Verlauf der Potentialmulde wird durch ein Polynom vierter Ordnung beschrieben, um für jedes Parameterset ein glattes Potential und damit adiabatischen Transport zu gewährleisten. Ein exponentieller Abfall drückt das Potential an den Kettenrändern schnell auf null, um Randeffekte zu vermeiden. . . . . 35
- 5.2 **Leitwert und Phase als Funktion des Dotminimums  $V_g$ .oben:** Befindet sich eine ungerade Anzahl Elektronen im Dot, so nimmt der Leitwert aufgrund des Kondoeffekts seinen Maximalwert  $G = 2\frac{e^2}{h}$  an. Für eine gerade Besetzung ist der Leitwert unterdrückt, da kein freier Zustand im Dot den Transport tragen kann. **unten:** Die Phase ist über  $\Phi = \pi n_{dot}$  mit der Besetzung im Dot gekoppelt. Als Folge liegt sie über die Breite eines Kondoplateaus bei  $\frac{\pi}{2}$ . . . . . 37
- 5.3 **Leitwertkurven bei verschiedenen Werten eines angelegten Magnetfelds:** Durch das äußere Feld wird die Spinentartung im Dot aufgehoben. Die unterschiedlichen Besetzungen  $n_\uparrow$  und  $n_\downarrow$  im Dot führen zu einer spezifischen Leitwertunterdrückung im Kondoregime. . . . . 38
- 5.4 **Unterdrückung des Leitwerts als Funktion des Magnetfelds für ausgewählte Werte von  $V_g$  im Kondoregime:** Für kleine Felder besitzt die Funktion  $G(h)$  eine parabolische Form. Das erlaubt die Definition einer Energieskala  $T_K$ . Diese ist von der Levelposition im Dot und damit von  $V_g$  abhängig. . . . 39
- 5.5 **Die Kondotemperatur als Funktion von  $V_g$ .oben:** Leitwert als Funktion von  $V_g$ : **unten:**Spezifischer Funktionsverlauf der Kondotemperatur entlang mehrerer Kondoplateaus. Für  $V_g$ -Werte, bei denen  $\varepsilon_d$  und  $\varepsilon_d + U$  symmetrisch um  $\varepsilon_F$  liegen nimmt  $T_K$  ein Minimum an. . . . . 39
- 5.6 **Die lokale Dichte in einem Quantendot-Potential:**  
**links:** Die lokale spinaufgelöste Dichte  $n_\uparrow$  und  $n_\downarrow$  über die gesamte Kette für das Potential im Quantendot-Regime bei verschiedenen Magnetfeldern  $h$ . Die Dichte erreicht am Rand der Kette im Bereich mit  $U = V = 0$  den Wert  $n = n_\uparrow + n_\downarrow = 1$  halber Füllung. Sobald die Wechselwirkung spürbar ist sinkt die Dichte. Im Bereich des QD (Detailvergrößerung) gibt die Oszillation die Form der Wellenfunktion wieder. Bei endlichem Feld wechseln sich Bereiche mit dominierendem  $n_\uparrow$  und  $n_\downarrow$  ab. **rechts:** Die Magnetisierung  $M = n_\uparrow - n_\downarrow$  als Funktion des angelegten Feldes  $h$  für verschiedene Sites  $j$  im Dot. Für kleine Felder bis  $h \approx 10^{-7}\tau$  ist  $M$  linear in  $h$ . Dunkelrote Funktionsverläufe charakterisieren Sites  $j$  mit positiver, grüne Funktionsverläufe Sites mit negativer Magnetisierung. . . . . 40

- 5.7 **Die Suszeptibilität  $\chi(j)$  in einem QD-Potential:**  
**links:** Die Suszeptibilität  $\chi$  für verschiedene Werte von  $V_g$  im Bereich eines Kondoplateaus. Die Anzahl der Oszillationen im Dot gibt Aufschluss über die Anzahl gebundener Elektronen.  $\chi$  nimmt zu den Flanken des Plateaus hin ab. **rechts:** Die gleichen Suszeptibilitätskurven skaliert auf ihren Maximumwert. Über den gesamten Bereich eines Plateaus lassen sich die Kurven aufeinanderlegen. Für jede Site  $j$  lässt sich ein  $c(j)$  mit  $T_K \propto c(j) \frac{1}{\chi_j}$  finden. . . . . 41
- 5.8 **Kondotemperatur und inverse Suszeptibilität:** An jedem Ort  $j$  existiert ein  $c(j)$ , sodass  $T_K = c(j) \frac{1}{\chi_j}$ . Die magnetfeldabhängige Dichte beinhaltet lokal Information über das magnetfeldverhalten des Leitwerts, obwohl dieser eine Folge der kompletten Potentiallandschaft ist. . . . . 43
- 5.9 **Dreidimensionale Darstellungen von Leitwert und Energieskala** 46
- 5.10 **Die Suszeptibilität entlang einer Kurve minimaler  $T_K$ 's:** Für kleine Werte von  $V_{sg}$  zeigt sich deutlich die Dotstruktur von  $\chi$  (vgl. Kapitel 2). Beim Übergang zum QPC nimmt die Suszeptibilität ab. Im Bereich des Pinchoff schließlich zeigt sie sich stark erhöht. In diesem Bereich scheint sich in einem Magnetfeld schnell ein lokalisierter Spin auszubilden. . . . . 47
- 5.11 **Die Suszeptibilität entlang eines even valley (minimaler Leitwert):** Wie zu erwarten ist im Dot bei gerader Besetzung die Suszeptibilität klein. Man sieht, dass sich am Pinchoff dennoch die Struktur in  $\chi$  einstellt, die zu einem lokalisierten Spin führen kann. . . . . 48
- 5.12 **Die Suszeptibilität am Pinchoff.** Ein endliches  $U$  führt zu einer starken Erhöhung von  $\chi$ . Die geringe Dichte im Barrierenmaximum bedingt eine erhöhte Wechselwirkung und verstärkt die Antwort auf das Magnetfeld. Es bildet sich ein lokaler Spin aus. . . . . 49
- 5.13 **Das Potential des QPC:** Das Skalenverhalten bzgl.  $V_g$  wird durch  $\omega$  bestimmt. . . . . 52
- 5.14 **Abhängigkeit des Pinchoffs von  $\omega$ :** (a) Die Krümmung des Potentials beeinflusst die Breite und Steigung der Abschnürung. Die Transmission ist mit der Potentialfläche oberhalb der Fermienergie korreliert und bedingt einen breiteren Pinchoff für eine schmale Barriere. . . . . 53
- 5.15 **Die Breite und Position des Pinchoffs in Abhängigkeit von  $U$ :** (a) Leitwertkurven bei verschiedenen Wechselwirkungen  $U$  für  $\omega = 0.01$ . (b):  $U$  als Funktion von  $V_0$ . Der Pinchoff verschiebt sich von  $U = 0.3$  bis  $U = 1$  zu höheren  $V_g$ -Werten. Für  $U > 1$  wird er zurückgedrängt. (c) Die Breite des Pinchoffs nimmt mit steigendem  $U$  zu. Der Bereich der Abschnürung wird steiler. (d) Leitwertkurven auf  $\frac{V_g}{V_0}$  skaliert. . . . . 53
- 5.16 **Die Magnetfeldabhängigkeit des Leitwerts im QPC.** (a) Mit steigendem Magnetfeld trennen sich die Submoden  $\uparrow$  und  $\downarrow$ . Dabei bildet sich bei  $U \neq 0$  für mittlere Magnetfelder eine Zwischenstufe bei  $\sim 0.7g_0$  aus - Die 0.7 Anomalie. Der Vergleich mit dem Leitwert für  $U = 0$  in (b) identifiziert die schulterartige Zwischenstufe als reinen Wechselwirkungseffekt. . . . . 54

- 5.17 **Leitwert der beiden Kanäle  $\uparrow$  und  $\downarrow$ .** (a) Mit Erhöhung des Feldes verschiebt sich der Pinchoff der  $\downarrow$ -Mode schnell zu kleineren  $V_g$ -Werten. Die Verschiebung  $\Delta E \gg h/2$  impliziert eine verstärkte Zeemanaufspaltung der Kanäle. Die Steigung des Pinchoff wird für mittlere Felder  $h$  kleiner. (b) Der Pinchoff der  $\downarrow$ -Mode zeigt keine Verschiebung bzgl. dem äußeren Feld für mittlere Magnetfelder. Allerdings erhöht sich die Steigung. Das Zusammenspiel der Leitwertkurven beider Kanäle bewirkt die 0.7 Anomalie. . . . . 55
- 5.18 **Magnetfeldabhängigkeit des Leitwerts am Pinchoff für verschiedene Werte von  $\omega$ .** Für  $h \neq 0$  lassen sich die Leitwertkurven nicht mehr durch  $V_g/\omega$  skalieren. . . . . 56
- 5.19 **Die 0.7 Anomalie bei  $U = 1$ ,  $U = 2$  und  $U = 3$  mit der Potentialform  $\omega = 1$ :** Während sich im Fall  $U = \tau$  die 0.7 Anomalie als schwache Zwischenstufe präsentiert, ist sie für  $U = 2$  die dominante Struktur. Für  $U = 3$  verschiebt sich die Stufe weiter nach oben und Oszillationen des Leitwerts werden im offenen Kanal sichtbar. . . . . 56
- 5.20 **Die Berechnung des effektiven  $g^*$  im QPC**  
 (a) Die Steigung des Leitwerts  $-\frac{dG}{dV_g}$ . Die beiden Maxima geben die Position der Leitwertabschnürung von  $\uparrow$  und  $\downarrow$  an. (b) Die Energieaufspaltung  $\Delta E$  der Submoden für verschiedene  $U$ . Mit zunehmender Wechselwirkung erhöht sich die Steigung von  $\Delta E$ . (c) Der effektive  $g$ -Faktor  $g^*$  als Funktion von  $U$ . Die Wechselwirkung verstärkt die Energieaufspaltung der Submoden drastisch. . . . . 57
- 5.21 **Die Energieskala  $T^*$  im QPC:** (a) Der obere Teilplot zeigt den Leitwert im QPC für mehrere Magnetfelder. Für hohe Werte von  $V_g$  ist der Transport unterbunden. Mit sinkender Barrierenhöhe folgt der Pinchoff und schließlich der offene Kanal mit Leitwert  $G = 2 \frac{e^2}{h}$ . Mit steigendem Magnetfeld bildet sich die 0.7 Anomalie heraus. (b) Der Verlauf von  $T^*$  im QPC. Bei kleinen Werten des Leitwerts am Pinchoff beginnt ein exponentieller Anstieg der Energieskala, der sich über einen weiten Parameterbereich (von  $U$  und  $\omega$ ) reproduzieren lässt. Der Anstieg setzt sich in den offenen Kanal fort, bevor sich bei kleineren  $V_g$ -Werten kondoartige Strukturen ausbilden. . . . . 58
- 5.22  **$T^*$  als Funktion von  $V_g$  und  $U$  bei  $\omega = \tau$ .**  
 Der exponentielle Anstieg ( $S_1$ ) von  $T^*$  ist generisch über einen weiten Parameterbereich von  $U$  zu beobachten. Der Exponent zeigt keine charakteristische  $U$ -Abhängigkeit  $\rightarrow f(U, \omega) = \omega^\alpha$ . Ab Werten von  $U \sim 1.5\tau$  bildet sich eine zweite Stufe ( $S_2$ ) am Pinchoff aus, die mit zunehmender Wechselwirkung prägnanter wird. . . . . 59
- 5.23 **Bestimmung der Funktion  $f_1(U, \omega)$  für ein konstantes  $U$  entlang der Kette.**  
 Im doppellogarithmischen Plot entspricht die Steigung (durchgezogene Fit-Linien) dem Exponenten  $\alpha$ . Der Ordinatenabschnitt ist durch  $g(U)$  gegeben. . . . . 60
- 5.24 **Bestimmung der Funktion  $f(U, \omega)$  für ein konstantes  $U$  entlang der Kette.** Im doppellogarithmischen Plot entspricht die Steigung (durchgezogene Fit-Linien) dem Exponenten  $\alpha$ . Der Ordinatenabschnitt ist durch  $g(U)$  gegeben. . . 61



- 
- 5.25 **Bestimmung der Funktion  $f_2(U, \omega)$  für ein konstantes U entlang der Kette.**  
Im doppellogarithmischen Plot entspricht die Steigung (durchgezogene Fit-Linien) dem Exponenten  $\alpha$ . Der Ordinatenabschnitt ist durch  $g(U)$  gegeben. . . . . 62
- 5.26 **Bestimmung der Funktion  $f(U, \omega)$  für ein konstantes U entlang der Kette.**  
Im doppellogarithmischen Plot entspricht die Steigung (durchgezogene Fit-Linien) dem Exponenten  $\alpha$ . Der Ordinatenabschnitt ist durch  $g(U)$  gegeben. . . . . 62



# Danksagung

Zunächst möchte ich Prof. Jan von Delft dafür danken, mir die Möglichkeit zu geben in seiner Gruppe meine Diplomarbeit zu schreiben. Er hat mich mit viel fachlichem Wissen, konstruktiven Vorschlägen und wissenschaftlichen Gesprächen während dieser Diplomarbeit unterstützt. Damit war es mir einerseits möglich ein größeres Verständnis für physikalische Sachverhalte zu entwickeln, andererseits konnte ich auch die Grundstrukturen wissenschaftlicher Forschung erlernen.

Desweiteren geht mein Dank an Florian Bauer. Er ist mir während diesem Jahr mit viel Rat und Tat zur Seite gestanden. Durch viele angeregte Diskussionen, hat sich diese Arbeit inhaltlich stark verbessert.

Außerdem möchte ich mich besonders bei meinen Eltern Regina und Joachim Heyder bedanken. Sie haben mir nicht nur durch ihre finanzielle Unterstützung eine unbesorgte Studienzeit ermöglicht und mir damit ermöglicht mich ganz der Physik zu widmen. Viel wichtiger ist jedoch, dass sie mir auch menschlich zu jedem Zeitpunkt beigestanden und haben mich immer unterstützt.



Ich versichere, die Arbeit selbstständig angefertigt und dazu nur die im  
Literaturverzeichnis angegebenen Quellen benutzt zu haben.

München, den 15. November 2007