

# Anwendung der Diagrammatischen Monte Carlo Methode auf den Josephson-Strom durch einen Kondo-Quantenpunkt

David Luitz

Universität Würzburg  
Institut für Theoretische Physik und Astrophysik

13. Mai 2008

- 1 Der DDQMC Algorithmus
  - Störungsentwicklung der Zustandssumme
  - Von der Zustandssumme zur Monte Carlo Simulation
- 2 Josephson-Strom durch einen Kondo-Dot
  - BCS-Anderson-Modell
  - Effektive Modelle
  - Ergebnisse

- Vorgeschlagen 2005 von A. Rubtsov et al. in Phys. Rev. B 72, 035122.
- Störstellenmethode
- Einfache und elegante Methode
- Effizient, bei bestimmten Problemen kann das Vorzeichenproblem eliminiert werden
- Flexibel, direkte Messung in Matsubarafrequenzen möglich
- *Continuous time*: Kein systematischer Fehler
- Zwei Formulierungen:
  - Entwicklung in der Wechselwirkung: Phys. Rev. B 72, 035122 (2005)
  - Entwicklung in der Hybridisierung: Phys. Rev. Lett. 97, 076405 (2006)  
Philipp Werner et al.

# Allgemeines Störstellenproblem

$$H = - \sum_{i,j,\sigma,\sigma'} t_{i,j}^{\sigma,\sigma'} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma'} + \sum_i U_i \left( \hat{n}_{i,\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left( \hat{n}_{i,\downarrow} - \frac{1}{2} \right) = H_0 + H_U. \quad (1)$$

Mit den fermionischen Erzeugungsoperatoren  $c_{i,\sigma}^\dagger$  auf einem verallgemeinerten Gitterplatz  $i$ .

Zur Minimierung des Vorzeichenproblems schreiben wir den wechselwirkenden Anteil des Hamiltonians als:

$$H_U = \sum_i \frac{U_i}{2} \sum_{s_j=\pm 1} \left( \hat{n}_{i,\uparrow} - \alpha_\uparrow^j \right) \left( \hat{n}_{i,\downarrow} - \alpha_\downarrow^j \right) + \text{const.} \quad (2)$$

mit

$$\alpha_\sigma^j = \frac{1}{2} + \sigma s_j \delta \quad (3)$$

$$Z = \text{Tr} \left[ T e^{-\int_0^\beta d\tau H_0(\tau) + H_U(\tau)} \right] = Z_0 \langle T e^{-\int_0^\beta d\tau H_U(\tau)} \rangle_0, \quad (4)$$

mit dem thermodynamischen Mittelwert des freien Systems:

$$\langle A(\tau) \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \text{Tr} \left[ T \exp \left( - \int_0^\beta d\tau H_0(\tau) \right) A(\tau) \right]. \quad (5)$$

Damit haben wir folgende Entwicklung der Zustandssumme:

$$\frac{Z}{Z_0} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_0^\beta \dots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_1 \dots d\tau_n \langle T H_U(\tau_1) \dots H_U(\tau_n) \rangle_0. \quad (6)$$

Wir setzen  $H_U(\tau)$  ein

$$\frac{Z}{Z_0} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n \sum_{i_1, s_1} \dots \sum_{i_n, s_n} \frac{U_{i_1} \dots U_{i_n}}{2^n} \langle T (\hat{n}_{i_1, \uparrow}(\tau_1) - \alpha_{\uparrow}^1) \dots (\hat{n}_{i_n, \downarrow}(\tau_n) - \alpha_{\downarrow}^n) \rangle_0. \quad (7)$$

Definiere Vertizes  $v_j = [\tau_j, i_j, s_j]$  und eine Konfiguration von  $n$  Vertizes

$$C_n = \{[\tau_1, i_1, s_1], [\tau_2, i_2, s_2], \dots, [\tau_n, i_n, s_n]\}. \quad (8)$$

# Formulierung als Determinante

$\langle T \left( \hat{n}_{i_1, \uparrow}(\tau_1) - \alpha_{\uparrow}^1 \right) \dots \left( \hat{n}_{i_n, \downarrow}(\tau_n) - \alpha_{\downarrow}^n \right) \rangle_0$  ist eine  $n$ -Teilchen Green-Funktion des nichtwechselwirkenden Systems. Das Wick-Theorem ist gültig und liefert:

$$\langle T \left( \hat{n}_{i_1, \uparrow}(\tau_1) - \alpha_{\uparrow}^1 \right) \dots \left( \hat{n}_{i_n, \downarrow}(\tau_n) - \alpha_{\downarrow}^n \right) \rangle_0 = \det \mathbf{A}_{C_n}. \quad (9)$$

$$\mathbf{A}_{C_n} = \begin{pmatrix} G_{i_1, i_1}^{0, \uparrow \uparrow}(\tau_1, \tau_1) - \alpha_{\uparrow}^1 & G_{i_1, i_1}^{0, \downarrow \uparrow}(\tau_1, \tau_1) & \dots & G_{i_n, i_1}^{0, \downarrow \uparrow}(\tau_n, \tau_1) \\ G_{i_1, i_1}^{0, \uparrow \downarrow}(\tau_1, \tau_1) & G_{i_1, i_1}^{0, \downarrow \downarrow}(\tau_1, \tau_1) - \alpha_{\downarrow}^1 & \dots & G_{i_n, i_1}^{0, \downarrow \downarrow}(\tau_n, \tau_1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{i_1, i_n}^{0, \uparrow \downarrow}(\tau_1, \tau_n) & G_{i_1, i_n}^{0, \downarrow \downarrow}(\tau_1, \tau_n) & \dots & G_{i_n, i_n}^{0, \downarrow \downarrow}(\tau_n, \tau_n) - \alpha_{\downarrow}^n \end{pmatrix} \quad (10)$$

mit  $G_{i,j}^{0, \sigma, \sigma'}(\tau_1, \tau_2) = \langle T c_{i, \sigma}^{\dagger}(\tau_1) c_{j, \sigma'}(\tau_2) \rangle_0$

Damit können wir nun die Summen und Integrale in Gleichung (7) als Summation über alle Konfigurationen  $C_n$  von Vertizes auffassen:

$$\frac{Z}{Z_0} = \sum_{C_n} \left(-\frac{1}{2}\right)^n (U_{i_1} \dots U_{i_n}) \det \mathbf{A}_{C_n}. \quad (11)$$



# Von der Zustandssumme zur Monte Carlo Simulation

Eine analoge Überlegung für thermodynamische Erwartungswerte liefert:

$$\langle O(\tau) \rangle = \frac{\sum_{C_n} \left(-\frac{1}{2}\right)^n (U_{i_1} \dots U_{i_n}) \det \mathbf{A}_{C_n} \langle\langle O(\tau) \rangle\rangle_{C_n}}{\sum_{C_n} \left(-\frac{1}{2}\right)^n (U_{i_1} \dots U_{i_n}) \det \mathbf{A}_{C_n}} \quad (12)$$

mit

$$\langle\langle O(\tau) \rangle\rangle_{C_n} = \frac{\langle T(\hat{n}_{i_1, \uparrow}(\tau_1) - \alpha_{\uparrow}^1) \dots (\hat{n}_{i_n, \uparrow}(\tau_n) - \alpha_{\uparrow}^n) O(\tau) \rangle_0}{\langle T(\hat{n}_{i_1, \uparrow}(\tau_1) - \alpha_{\uparrow}^1) \dots (\hat{n}_{i_n, \uparrow}(\tau_n) - \alpha_{\uparrow}^n) \rangle_0} \quad (13)$$

Wir haben also folgenden statistischen Mittelwert:

$$\langle O(\tau) \rangle = \frac{\sum_{C_n} W(C_n) \langle\langle O(\tau) \rangle\rangle_{C_n}}{\sum_{C_n} W(C_n)} \quad (14)$$

Unser Ziel ist es daher, eine Markov-Kette von Konfigurationen  $C_n$  so zu erzeugen, dass jede Konfiguration mit dem statistischen Gewicht  $W(C_n)$  auftritt. Dazu verwenden wir den Metropolis-Algorithmus:

- Hinzufügen des Vertex  $[\tau_{\text{neu}}, i_{\text{neu}}, s_{\text{neu}}]$ :

$$P_{C_n \rightarrow C_{n+1}} = \min \left( -\frac{U_{i_{\text{neu}}} \beta N \det \mathbf{A}_{C_{n+1}}}{(n+1) \det \mathbf{A}_{C_n}}, 1 \right). \quad (15)$$

- Entfernen des Vertex  $[\tau_k, i_k, s_k]$ :

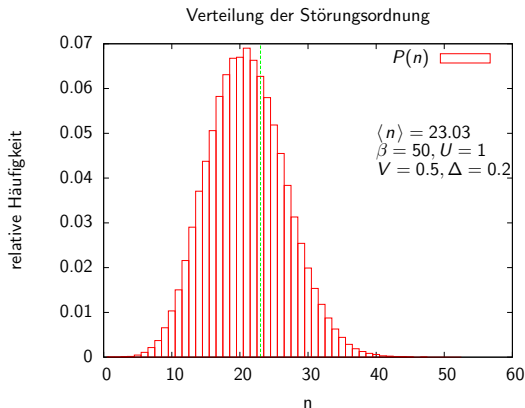
$$P_{C_n \rightarrow C_{n-1}} = \min \left( -\frac{n \det \mathbf{A}_{C_{n-1}}}{U_{i_k} \beta N \det \mathbf{A}_{C_n}}, 1 \right) \quad (16)$$

Für jede so erzeugte Konfiguration muss jetzt lediglich  $\langle\langle O(\tau) \rangle\rangle_{C_n}$  berechnet und aufsummiert werden.

- Mittlere Ordnung kann berechnet werden:

$$\langle n \rangle = - \int_0^{\infty} d\tau \langle H_U(\tau) \rangle_0$$

- Konsistenztest mit Doppeltbesetzung möglich



Bisher wurde angenommen, dass die statistischen Gewichte  $W(C_n)$  positiv sind. Das ist aber im Allgemeinen nicht der Fall!

- Einführung eines Vorzeichens  $s = \text{sgn } W(C_n)$  (oder: komplexe Phase)
- $|W(C_n)|$  wird als statistisches Gewicht interpretiert
- $\langle O(\tau) \rangle = \frac{\langle sO(t) \rangle}{\langle s \rangle}$
- Durch geschickte Wahl der  $\alpha_i^\sigma$  im wechselwirkenden Hamiltonian  $H_U$  kann das Vorzeichenproblem für das 1D-Hubbard Modell und das Anderson-Modell vermieden werden.
- Wir wollen das Vorzeichenproblem deshalb hier vernachlässigen.

# Messung von Green-Funktionen

Wir berechnen für jede Konfiguration  $C_n$  den Beitrag zu

$$G_{j,j'}^{\sigma,\sigma'}(\tau, \tau') = \langle T c_{j,\sigma}^\dagger(\tau) c_{j',\sigma'}(\tau') \rangle \text{ (Wick-Theorem):}$$

$$\langle\langle T c_{j,\sigma}^\dagger(\tau) c_{j',\sigma'}(\tau') \rangle\rangle_{C_n} = \frac{\det \mathbf{M}_{C_n, j, j'}^{\sigma, \sigma'}(\tau, \tau')}{\det \mathbf{A}_{C_n}} \quad (17)$$

Mit Sherman-Morrison kann die Berechnung der Determinante vermieden werden:

$$\begin{aligned} \langle\langle T c_{j,\sigma}^\dagger(\tau) c_{j',\sigma'}(\tau') \rangle\rangle_{C_n} &= G_{j,j'}^{0,\sigma\sigma'}(\tau, \tau') \\ &\quad - \sum_{r,s=1}^{2n} G_{i_r, j'}^{0,\sigma_r\sigma'}(\tau_r, \tau') (\mathbf{A}_{C_n}^{-1})_{r,s} G_{j, i_s}^{0,\sigma\sigma_s}(\tau, \tau_s). \end{aligned} \quad (18)$$

Direkt in Matsubara-Frequenzen:

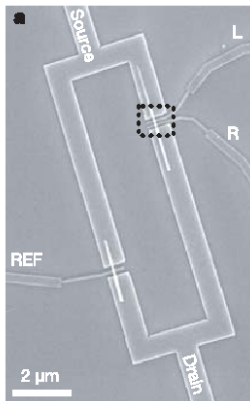
$$\langle\langle G_{j,j'}^{\sigma\sigma'}(i\omega_n) \rangle\rangle_{C_n} = G_{j,j'}^{0,\sigma\sigma'}(i\omega_n) - \sum_{r,s=1}^{2n} G_{i_r, j'}^{0,\sigma_r\sigma}(\tau_r, \tau') (\mathbf{A}_{C_n}^{-1})_{r,s} e^{i\omega_n \tau_s} G_{j, i_s}^{0,\sigma\sigma_s}(i\omega_n)$$

# Messung höherer Green-Funktionen

- Die Messung höherer Green-Funktionen kann auf die Messung von Einteilchen-Green-Funktionen zurückgeführt werden
- Wick-Theorem in jeder Konfiguration gültig (Beweis: Diplomarbeit):

$$\begin{aligned} & \langle\langle T c_{j_1, \sigma_1}^\dagger(\tau_1) c_{j'_1, \sigma'_1}(\tau'_1) \dots c_{j_m, \sigma_m}^\dagger(\tau_m) c_{j'_m, \sigma'_m}(\tau'_m) \rangle\rangle_{C_n} = \\ & = \det \begin{pmatrix} \langle\langle T c_{j_1, \sigma_1}^\dagger(\tau_1) c_{j'_1, \sigma'_1}(\tau'_1) \rangle\rangle_{C_n} & \dots & \langle\langle T c_{j_1, \sigma_1}^\dagger(\tau_1) c_{j'_m, \sigma'_m}(\tau'_m) \rangle\rangle_{C_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle\langle T c_{j_m, \sigma_m}^\dagger(\tau_m) c_{j'_1, \sigma'_1}(\tau'_1) \rangle\rangle_{C_n} & \dots & \langle\langle T c_{j_m, \sigma_m}^\dagger(\tau_m) c_{j'_m, \sigma'_m}(\tau'_m) \rangle\rangle_{C_n} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (20)$$

# Experimentelles Setup



- SQUID
- nature 442(667) van Dam et al.
- Cleuziou, Wernsdorfer et al:  
Nanotube QD

# Das BCS-Anderson-Modell

Quantenpunkt in supraleitender Umgebung:

$$\tilde{H} = \sum_{\alpha=L}^R \tilde{H}_{0,\alpha} + \tilde{H}_d + \tilde{H}_V \quad (21)$$

mit

$$\tilde{H}_{0,\alpha} = \sum_{k,\sigma} (\epsilon(k) - \mu) \tilde{c}_{k,\sigma,\alpha}^\dagger \tilde{c}_{k,\sigma,\alpha} - \sum_k \left( |\Delta| e^{i\phi_\alpha} \tilde{c}_{k,\uparrow,\alpha}^\dagger \tilde{c}_{-k,\downarrow,\alpha}^\dagger + \text{h.c.} \right) \quad (22)$$

$$\tilde{H}_d = \sum_{\sigma} (\epsilon_d - \mu) \tilde{d}_{\sigma}^\dagger \tilde{d}_{\sigma} + U \left( \tilde{d}_{\uparrow}^\dagger \tilde{d}_{\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left( \tilde{d}_{\downarrow}^\dagger \tilde{d}_{\downarrow} - \frac{1}{2} \right) \quad (23)$$

$$\tilde{H}_V = -\frac{V}{\sqrt{N}} \sum_{\alpha=L}^R \sum_{\sigma,k} \left( \tilde{c}_{k,\sigma,\alpha}^\dagger \tilde{d}_{\sigma} + \tilde{d}_{\sigma}^\dagger \tilde{c}_{k,\sigma,\alpha} \right). \quad (24)$$

Kanonische Transformation  $d_{\downarrow}^\dagger \leftrightarrow d_{\downarrow}$ ,  $c_{k,\downarrow,\alpha}^\dagger \leftrightarrow c_{-k,\downarrow,\alpha}$



# Freie Green-Funktion

Nambu Schreibweise  $\mathbf{d}^\dagger = (d_\uparrow^\dagger, d_\downarrow^\dagger)$  und  $\mathbf{c}_{k,\alpha}^\dagger = (c_{k,\uparrow,\alpha}^\dagger, c_{k,\downarrow,\alpha}^\dagger)$ :

$$H_0 = \sum_{k,\alpha} \mathbf{c}_{k,\alpha}^\dagger \mathbf{E}_\alpha(k) \mathbf{c}_{k,\alpha} + \mathbf{d}^\dagger \epsilon_d \mathbf{d} - \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_{k,\alpha} \left( \mathbf{c}_{k,\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_z \mathbf{d} + \mathbf{d}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_z \mathbf{c}_{k,\alpha} \right). \quad (25)$$

Hierbei wurden die Matrizen  $\mathbf{E}_\alpha(k)$ ,  $\epsilon_d$  und  $\boldsymbol{\sigma}_z$  eingeführt, mit:

$$\mathbf{E}_\alpha(k) = \begin{pmatrix} \xi_k & -|\Delta| e^{i\phi_\alpha} \\ -|\Delta| e^{-i\phi_\alpha} & -\xi_k \end{pmatrix}, \epsilon_d = \begin{pmatrix} \xi_d & 0 \\ 0 & -\xi_d \end{pmatrix}, \boldsymbol{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (26)$$

Resolvente  $-i\omega_n \mathbf{G}^0(i\omega_n) - \mathbf{h}^T \mathbf{G}^0(i\omega_n) = \mathbf{1}$  liefert:

$$\mathbf{G}_{dd}^0(i\omega_n) = \left[ (-i\omega_n \mathbf{1} - \epsilon_d) + \frac{V^2}{N} \sum_{\alpha,k} \boldsymbol{\sigma}_z \left( i\omega_n \mathbf{1} + \mathbf{E}_\alpha^T(k) \right)^{-1} \boldsymbol{\sigma}_z \right]^{-1} \quad (27)$$

# Messung des Josephson-Stromes

Bei endlichen Phasendifferenzen  $\phi_L - \phi_R$  zwischen dem linken und dem rechten Supraleiter fließt ein Josephson-Strom durch den Quantenpunkt.

$$j_\alpha = i \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_{k,\sigma} \left( c_{k,\sigma,\alpha}^\dagger d_\sigma - d_\sigma^\dagger c_{k,\sigma,\alpha} \right). \quad (28)$$

Für den Erwartungswert gilt:

$$\langle j_\alpha \rangle = -2 \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_k \left[ \Im \left( G_{k,d}^{\alpha,\uparrow\uparrow}(\tau=0) \right) + \Im \left( G_{k,d}^{\alpha,\downarrow\downarrow}(\tau=0) \right) \right]. \quad (29)$$

wir müssen also lediglich die über  $k$  summierte Green-Funktion  $\sum_k \mathbf{G}_{k,d}^\alpha(\tau=0)$  messen.

- Wirkung des Störstellenproblems nach Ausintegration des Bades:

$$S_{\text{eff}} = S_c + \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_{\nu, \nu'} \psi_\nu^\dagger(\tau) \left( \mathbf{G}_{0,dd}^{-1}(\tau, \tau') \right)_{\nu, \nu'} \psi_{\nu'}(\tau') \quad (30)$$

- Wir suchen einen effektiven Hamiltonian, der im Limes  $\Delta/W \rightarrow \infty$  diese Wirkung reproduziert.
- Studium des Verhaltens von  $\mathbf{G}_{0,dd}^{-1}(\tau, \tau')$  im Limes  $\Delta/W \rightarrow \infty$

# Effektive Modelle: $\Delta/W \rightarrow \infty$

Effektiver Hamiltonian für  $\Delta/W \rightarrow \infty$ :

$$H_{\text{eff}} = H_0 + H_U \quad (31)$$

mit

$$H_0 = -V \left( \mathbf{c}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_z \mathbf{d} + \mathbf{d}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_z \mathbf{c} \right) + \mathbf{c}^\dagger \mathbf{E}_\infty \mathbf{c}, \quad (32)$$

Insgesamt:

$$H_{\text{eff}} = -V \left( c_\uparrow^\dagger d_\uparrow + d_\uparrow^\dagger c_\uparrow - d_\downarrow^\dagger c_\downarrow - c_\downarrow^\dagger d_\downarrow \right) - \Delta \left( c_\uparrow^\dagger c_\downarrow + c_\downarrow^\dagger c_\uparrow \right) - U \left( d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow - \frac{1}{2} (d_\uparrow^\dagger d_\uparrow - d_\downarrow^\dagger d_\downarrow) + \frac{1}{4} \right). \quad (33)$$

- $\mathbf{G}_{0,dd}(\tau, \tau')$  des effektiven Modells stimmt mit  $\mathbf{G}_{0,dd}(\tau, \tau')$  des BCS-Anderson-Modells überein.
- Numerische Bestimmung von  $\mathbf{G}_{0,dd}(\tau, \tau')$
- Bestimmung von  $A(\omega)$  mit stochastischer Maximum Entropy Methode

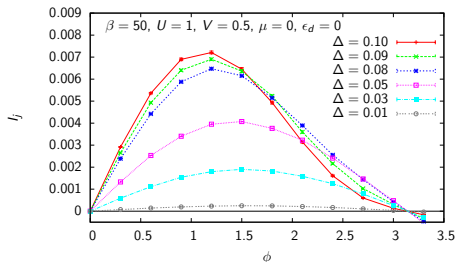
Im Limes  $\Delta \rightarrow \infty$ ,  $W \rightarrow \infty$  geht das BCS-Anderson-Modell über in folgendes effektives Modell (J. Phys.: Condens. Matter 19 (2007) 486211)

$$H_{\text{eff}} = \sum_{\sigma} \epsilon_d \tilde{d}_{\sigma}^{\dagger} \tilde{d}_{\sigma} - \Gamma \left( \tilde{d}_{\uparrow}^{\dagger} \tilde{d}_{\downarrow}^{\dagger} + \tilde{d}_{\downarrow} \tilde{d}_{\uparrow} \right) + U \left( \tilde{d}_{\uparrow}^{\dagger} \tilde{d}_{\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left( \tilde{d}_{\downarrow}^{\dagger} \tilde{d}_{\downarrow} - \frac{1}{2} \right). \quad (34)$$

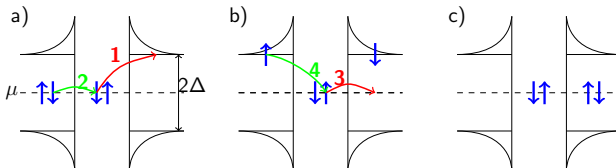
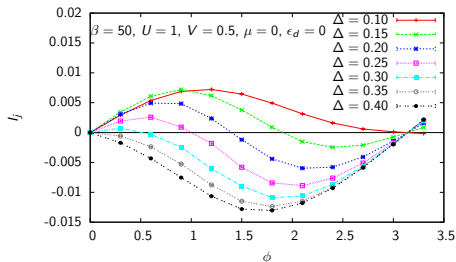
- Berechnung diverser Größen in der Lehmann-Darstellung möglich.
- $S(\omega)$ :  $\delta$ -Peak bei  $\omega = 0$
- $A(\omega)$ : 4 Peaks bei  $\omega = \pm \frac{U}{2} \pm \Gamma$
- $N(\omega)$ : 2 Peaks bei  $\omega = \pm 2\Gamma$

# Josephson Strom

Josephson Strom für unterschiedliche Werte von  $\Delta$

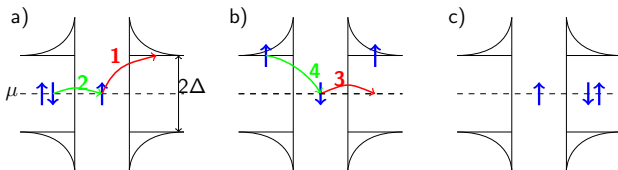
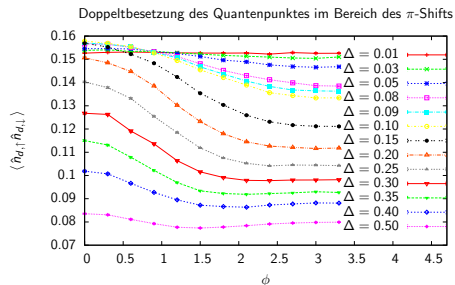
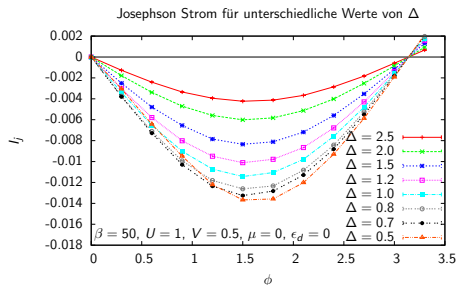


Josephson Strom für unterschiedliche Werte von  $\Delta$



0-Junction Mechanismus

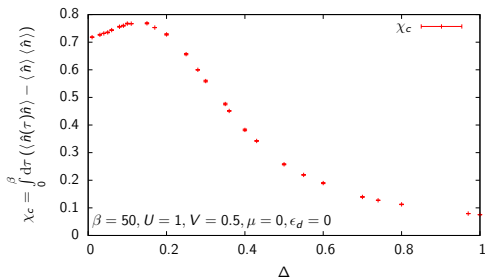
# Josephson Strom



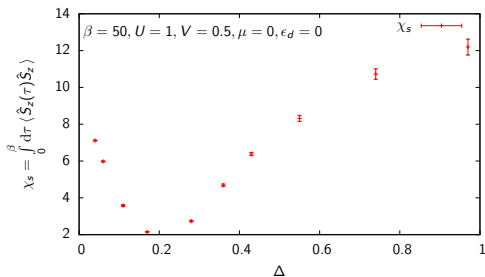
$\pi$  Junction Mechanismus

# Suszeptibilitäten

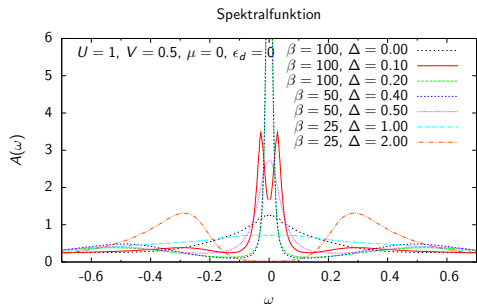
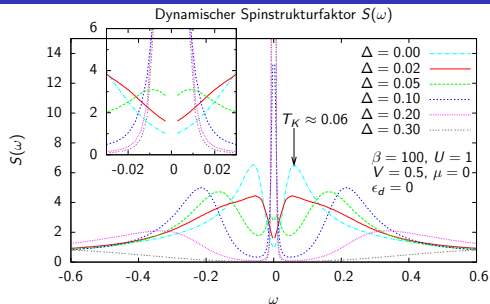
Ladungssuszeptibilität  $\chi_c$  in Abhängigkeit von  $\Delta$



Spinsuszeptibilität  $\chi_s$  in Abhängigkeit von  $\Delta$



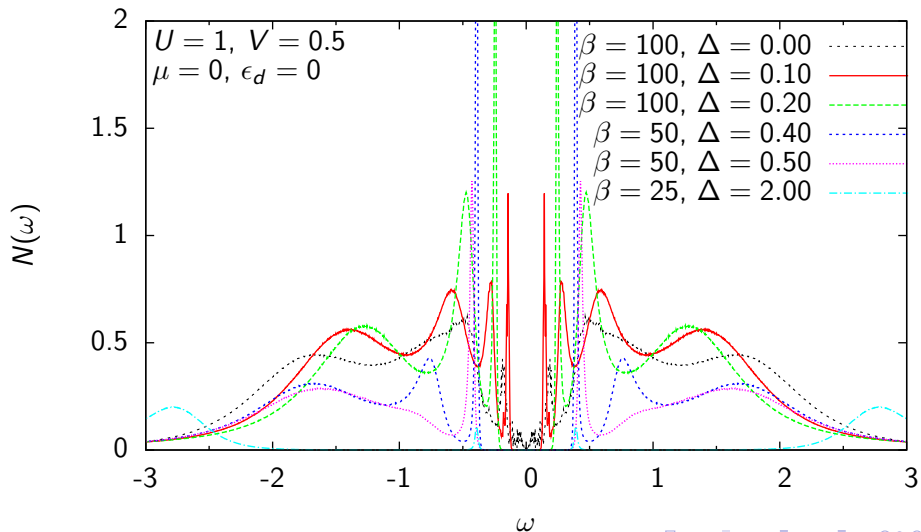




## 4 Regimes

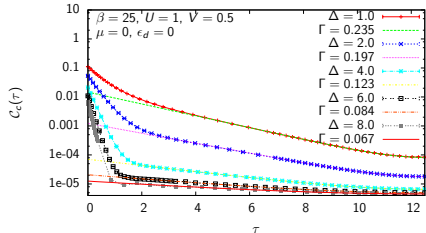
- Kondo-Regime  
 $\Delta \approx 0 \dots 0.02$
- Andreev-Regime  
 $\Delta \approx 0.05 \dots 0.1$
- Doublett-Regime 1  
 $\Delta \approx 0.1 \dots 0.5$  Vergleich mit  $\Delta \rightarrow \infty$  und  $W \rightarrow \infty$
- Doublett-Regime 2  
Vergleich mit  $\Delta/W \rightarrow \infty$

## Dynamischer Ladungsstrukturfaktor $N(\omega)$

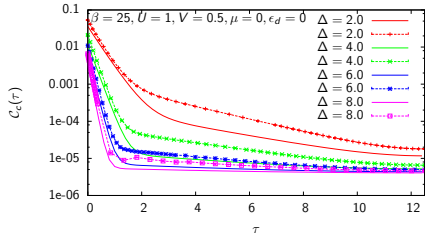


# Effektive Modelle

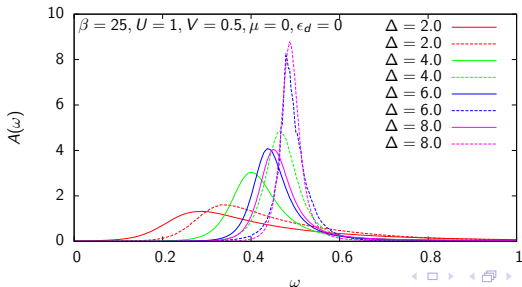
Vergleich der numerischen Ladungskorrelationsfunktion mit der analytischen Näherung im Limes  $\Delta \rightarrow \infty$



Vergleich der numerischen Ladungskorrelationsfunktion mit der analytischen Näherung für  $\Delta/W \rightarrow \infty$



Vergleich der numerischen Spektralfunktion mit der analytischen Näherung für  $\Delta/W \rightarrow \infty$



- DDQMC ist eine geeignete Methode zur Untersuchung des Josephson-Stromes durch einen Kondo Quantenpunkt
- $\pi$ -Phasenverschiebung des Josephson-Stroms
- Traditionelle Erklärung der  $\pi$ -Phasenverschiebung bestätigt
- Messung dynamischer Größen
- Gute Übereinstimmung der effektiven Modelle mit der Simulation
- Genaueres Studium des Ladungsstrukturfaktors nötig

Danke für die Aufmerksamkeit!