

SUMMER SCHOOL  
on  
LOW-DIMENSIONAL QUANTUM SYSTEMS:  
Theory and Experiment  
(16 - 27 JULY 2001)

PLUS

PRE-TUTORIAL SESSIONS  
(11 - 13 JULY 2001)

---

VON NEUMANN-WIGNER POTENTIALS AND  
TRANSPORT IN LUTTINGER LIQUIDS

K. SCHÖNHAMMER  
Georg-August-Universität  
Institut für Theoretische Physik  
Bunsenstrasse 9  
D-37073 Göttingen  
Germany

---

These are preliminary lecture notes, intended only for distribution to participants



von Neumann-Wigner potentials and transport in  
Luttinger liquids

( K. Schönhammer, U Göttingen )

or

How long carbon nanotubes does one need to  
see the Kane-Fisher scenario for an impurity in a  
Luttinger liquid ?

work in collaboration with :

(e.g. cond-mat 0104336 )

V. Meden

W. Metzner

U. Schollwöck

## Kane + Fisher scenario :

Luttinger liquid + Delta potential of strength  $V_0$

bosonization  $\rightarrow$  local sine-Gordon model  $\rightarrow$  weak coupling

RG in  $V_0 \rightarrow "V_0 \rightarrow \infty"$

An arbitrarily weak impurity "cuts a LL in half"

(Complementary approach : weak link  $t'$  scales to zero)

$$\Rightarrow G \sim T^{1-K_F}$$

experimental verification(?): Bockrath et al.

Nature 397, 598 (1999)

simple fermionic picture ?

nonperturbative in  $V_0$  !?

## 1) Introduction

What is a von Neumann-Wigner potential?

Are they of any importance?

## 2) toy-model

scattering from a large range potential by noninteracting electrons

## 3) fermionic RG for spinless interacting electrons

## 4) Summary

1)

# PHYSIKALISCHE ZEITSCHRIFT

vereinigt mit dem

## JAHRBUCH DER RADIOAKTIVITÄT UND ELEKTRONIK

Nr. 15

1. August 1929  
Redaktionsschluß für Nr. 17 am 15. August 1929.

30. Jahrgang

### INHALT:

#### Originalmitteilungen:

- J. v. Neumann u. E. Wigner, Über merkwürdige diskrete Eigenwerte. S. 465.
- J. v. Neumann u. E. Wigner, Über das Verhalten von Eigenwerten bei adiabatischen Prozessen. S. 467.
- L. Schiller und Th. Burbach, Über die Beziehung zwischen Widerstand und Wärmeüber-

- gang bei der Strömung in Rohren. S. 471.
- A. Glaser, Über den Bau eines großen Elektromagneten. S. 472.
- W. Ende, Über Kontaktpotentiale zwischen gleichen Metallen. S. 477.
- W. Alexandrow, Über die Ausbreitung der ebenen elektromagnetischen Wellen im kugelsymmetrischen Gravitationsfelde. S. 480.

W. Anderson, Über die Bildung des Ozons in den höchsten Atmosphärenschichten. S. 485.

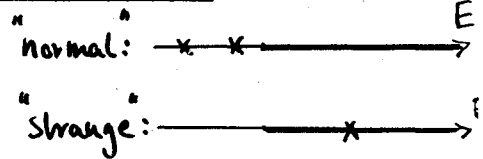
#### Besprechungen:

- A. Haas, Materiewellen und Quantenmechanik. S. 488.
- M. v. Ardenne, Verstärkermeßtechnik. S. 488.

Personalien. S. 488.

"About strange discrete eigenvalues"

### ORIGINALMITTEILUNGEN.



#### Über merkwürdige diskrete Eigenwerte.

Von J. v. Neumann und E. Wigner.

1. Es sind in der quantentheoretischen Literatur mehrfach anschauliche Schlüsse von der Art gemacht worden, daß z. B. aus der Tatsache, daß ein Elektron genügend kinetische Energie hat, um sich aus einem atomaren System (klassisch gerechnet) ins Unendliche zu entfernen, geschlossen wurde, daß der betreffende Energiewert zum kontinuierlichen Spektrum des genannten Systems gehört. Im folgenden soll gezeigt werden, daß derartige Überlegungen mit äußerster Vorsicht zu handhaben sind, denn es kommt häufig ein entgegengesetztes Verhalten vor. Dieser Umstand, daß ein Elektron auf einer stationären Bahn verharrt (Punkteigenwert!), obwohl es Energie genug hätte, um sich aus dem Anziehungsbereich des ihn umgebenden Systems zu befreien, ist nur scheinbar paradox. Wir werden uns an zwei verschiedenen Beispielen klar machen, daß dieses Phänomen zwei ganz verschiedene Ursachen haben kann — aber in beiden Fällen bis zu einem gewissen Grade anschaulich deutbar ist.

Wir werden stets ein Elektron im Bereiche eines geeigneten kugelsymmetrischen Potentials betrachten, also die Wellengleichung

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \Delta \psi + (V(r) - E) \psi = 0$$

$$\left( \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right), \text{ da wir}$$

uns auf kugelsymmetrische  $\psi$  beschränken und die Ableitungen nach den Winkeln  $\theta$  und  $\varphi$  weglassen können). Damit  $E = 0$  ein Punkteigenwert mit der kugelsymmetrischen Eigenfunktion  $\psi = \psi(r)$  sei, muß also  $V = \frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \left( \frac{\psi''}{\psi} + \frac{2\psi'}{r\psi} \right)$  sein. Wir werden nun durch geeignete Wahl von  $\psi$  dem  $V$  die oben erwähnten, scheinbar paradoxen, Formen erteilen.

Sei zuerst  $\psi = \frac{\sin(r^3)}{r^2}$ , dann ergibt sich<sup>1)</sup> (unter Weglassung des unwesentlichen Faktors  $\frac{\hbar^2}{8\pi^2m}$ )  $V = 2r^{-2} - 9r^4$ . Ein ebener Schnitt durch den Potentialverlauf sieht also wie auf der Figur angedeutet aus. Nach allem Erwarteten müßte das Elektron den Potentialabhang hinabstürzen und daher nur ein Streckenspektrum besitzen — dennoch ist eine stationäre Bahn und der Punkteigenwert  $E = 0$  da!

Jedoch ist dieses Verhalten sogar auf Grund klassisch-mechanischer Analogien zu verstehen<sup>2)</sup>.

1) Man setze versuchsweise  $\psi(r) = r^a \sin(r^b)$ . Damit das Quadratintegral von  $\psi$ , d. h.  $\int_0^\infty 4\pi r^2 |\psi(r)|^2 dr = \int_0^\infty 4\pi r^{a+2} \sin^2(r^b) dr$  endlich sei, muß mit Rücksicht auf das Verhalten bei  $r=0$ :  $2a+b+2 > -1$  und auf das Verhalten bei  $r=\infty$ :  $2a+2 < -1$  sein. Die Regularität von  $V(r)$  für  $r \neq 0$  erfordert  $2a+b+1=0$ . Beides erfüllt  $a=-2, b=3$ .

2) Diese Bemerkung rührt von Herrn L. Szilard her.

d = 3 : s-waves

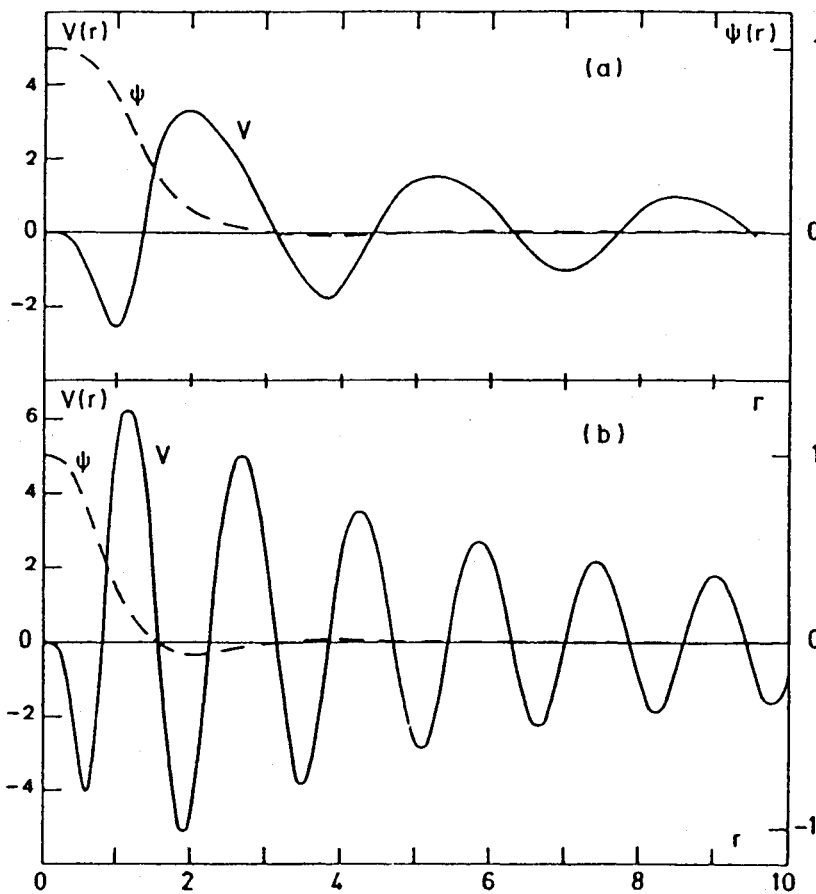


Fig. 1. Two examples of potential  $V(r)$  that possess a bound state  $\psi(r)$  with positive energy  $E$ ; (a)  $E = 1$ ; (b)  $E = 4$ .

$$V(r) = 16k^2 \{ -8A^2 \sin^4 kr f^2(r) + [6 \sin^4 kr - (2kr - \sin 2kr) \sin 2kr] f(r) \}$$

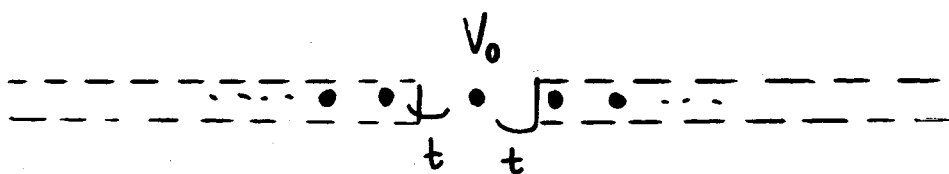
$$f(r) = [A^2 + s^2(r)]^{-1} ; \quad s(r) = 2kr - \sin(2kr). \\ (A^2 = 4k^2)$$



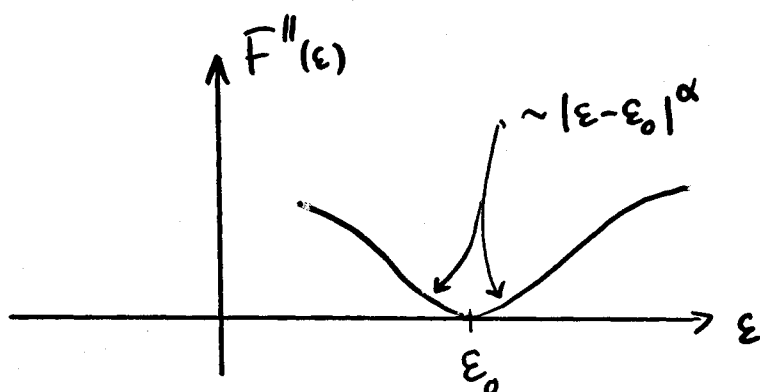
One verifies easily that  $\underline{V(r)} \sim -16k^2 \underline{(\sin 2kr)/2kr}$  for  $\underline{r \rightarrow \infty}$ .

↑  
discussed later

Simple explanation for a 1-d lattice model :



$$\langle 0 | \frac{1}{\epsilon - H - i0} | 0 \rangle = \frac{1}{\epsilon - i0 - V_0 - \underbrace{t^2 (G_{1,1}(\epsilon - i0) + G_{-1,-1}(\epsilon - i0))}_{F'(\epsilon) + iF''(\epsilon)}}$$



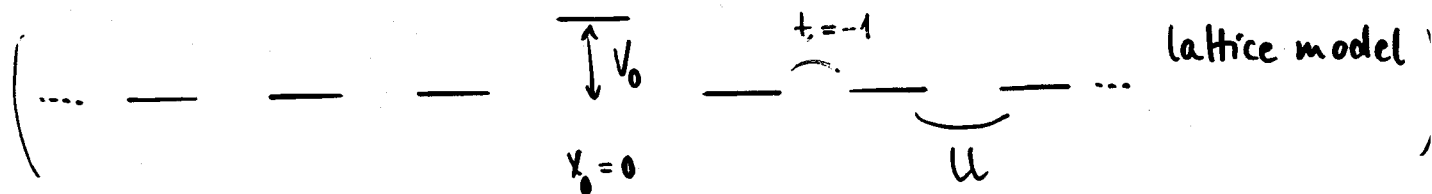
fine tuning, i.e.  $V_0 = \epsilon_0 - F'(\epsilon_0)$  leads to a vNw bound state in the continuum for  $\alpha > 1$

$$V(x) \sim \frac{\sin 2k_0 x}{x} \quad \longleftrightarrow \quad P_{loc}(\epsilon) \sim |\epsilon - \epsilon_0|^\alpha$$

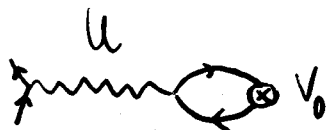


**Why...?** : Interacting 1d - electrons:

Elementary attempt : Hartree-Fock ("half of the story")



To leading order in  $V_0$  the change of the Hartree-potential is



$$|x| \gg a : \quad \delta V_H(x) \rightarrow U(2k_F) \underbrace{\delta \rho_{(1)}(x)}_{\text{change of density}}$$

$$\delta \rho_{(1)}(x) \sim V_0 \sin(2k_F|x| + \delta_F) / |x|$$

|| Friedel oscillations for noninteracting electrons in  $d$ -dimensions decay  $\sim 1/|x|^d$

For  $d=1$  such an additional long-range potential leads to peculiar scattering behaviour and to drastic effects in the local density of states

## 2) Tog-model

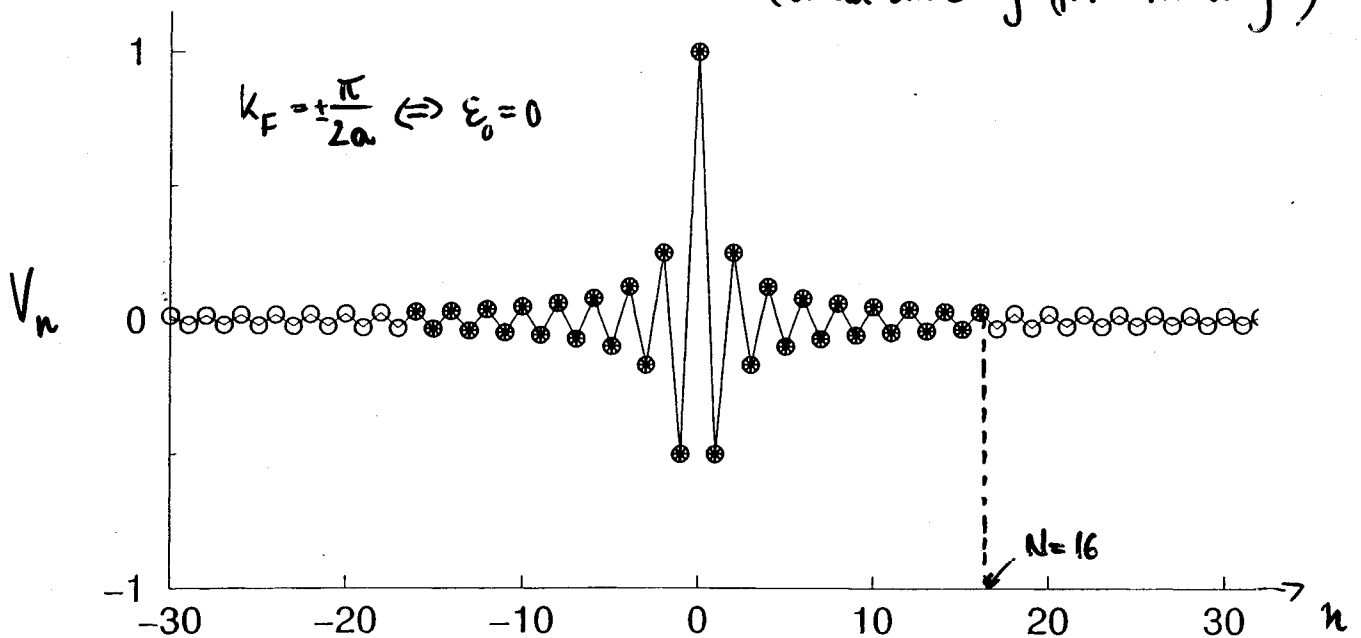
Noninteracting 1-d electrons in a potential

$$V = \sum_n |n\rangle V_n \langle n|$$

$$V_n = V_0 \delta_{n,0} + V' \frac{\sin(2k_F |n| a)}{|n|^\beta} \quad \text{for } n \leq N$$

mostly  $\beta = 1$  : "von-Neumann - Wigner potential"

(bound state by fine tuning)

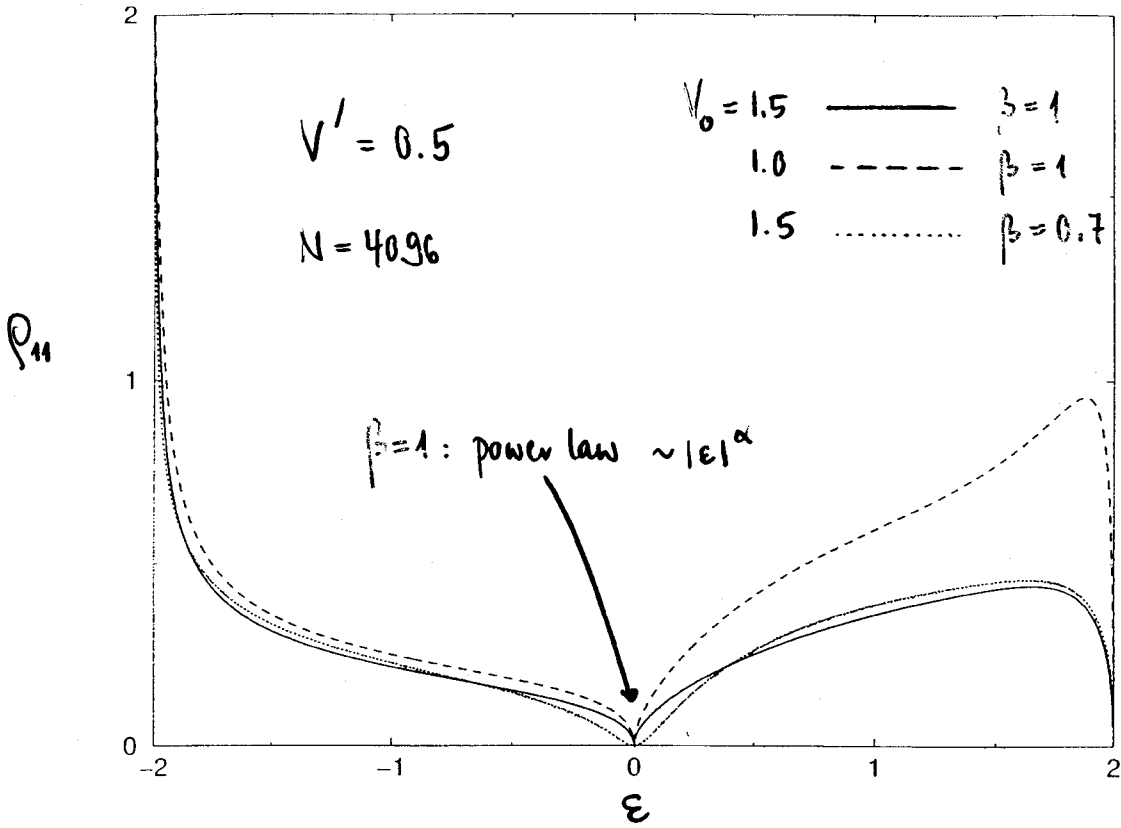


quantities of interest:

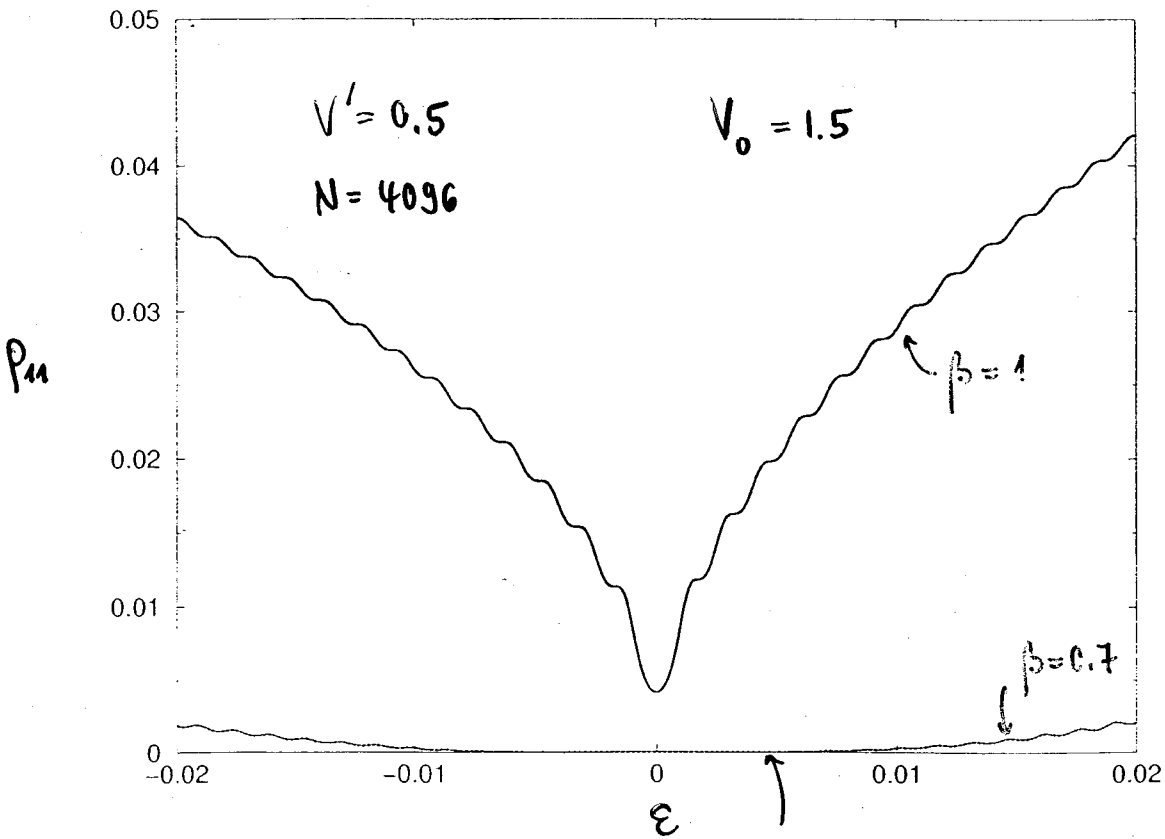
a) local density of states:  $\rho_{nn}(\epsilon) = \langle n | \delta(\epsilon - H) | n \rangle$   
(near the center of the potential.)

b) transmission amplitude:  $|t(\epsilon)|$

local DOS next to the impurity site:

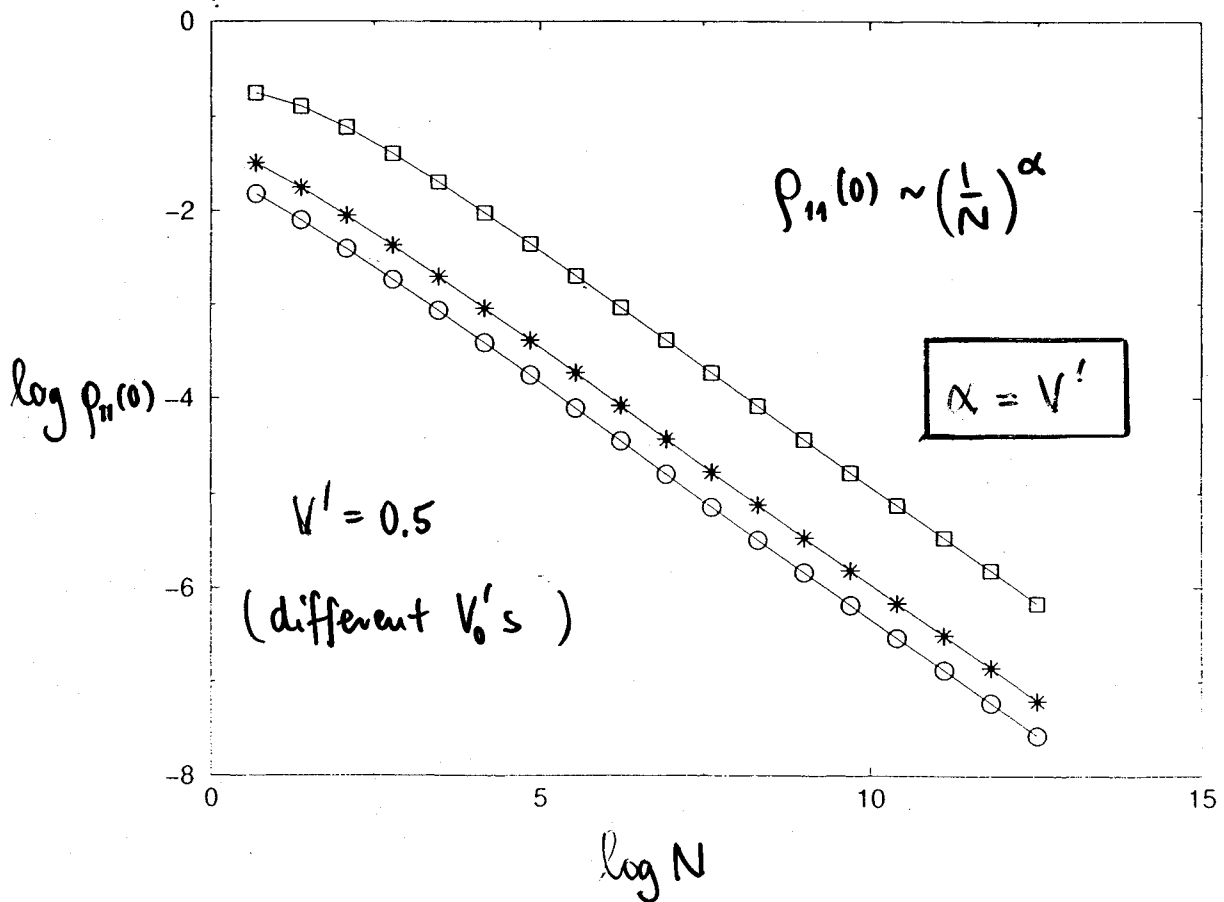
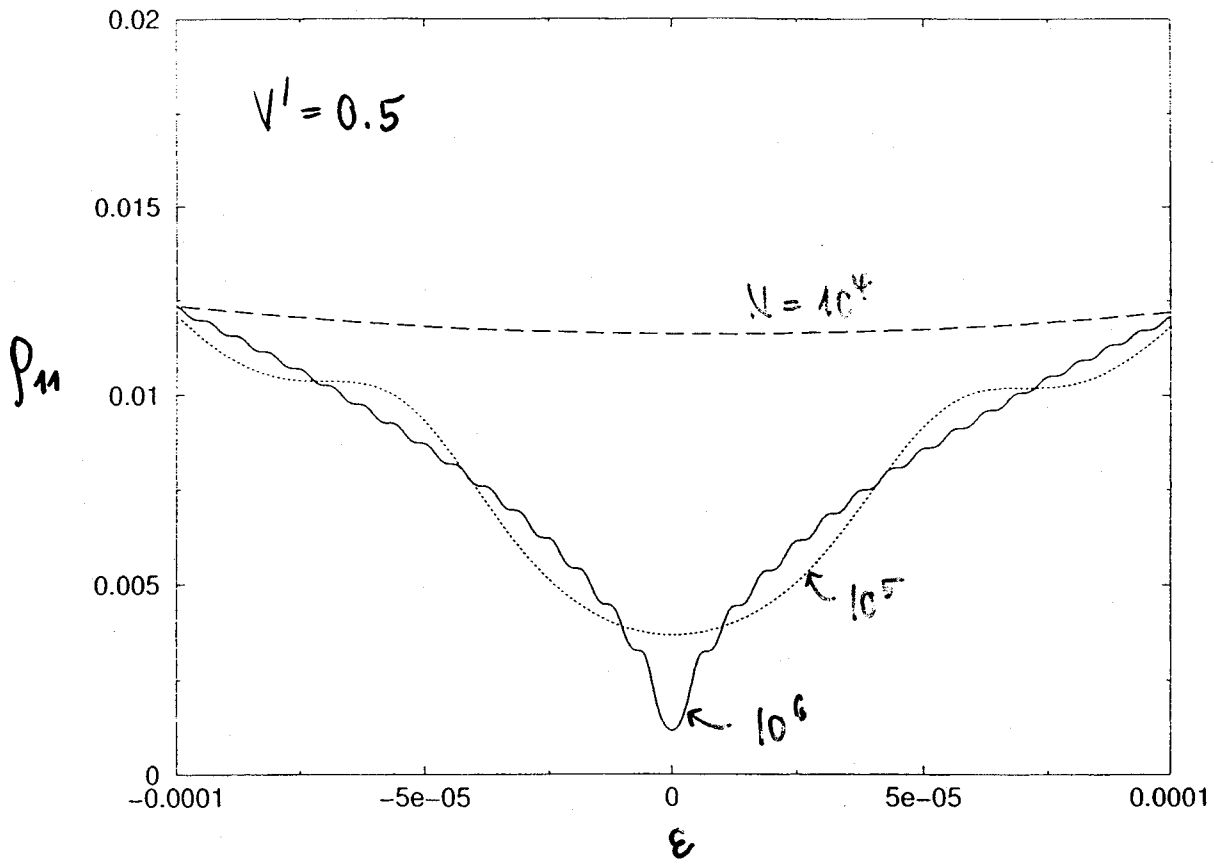


Zooming in :



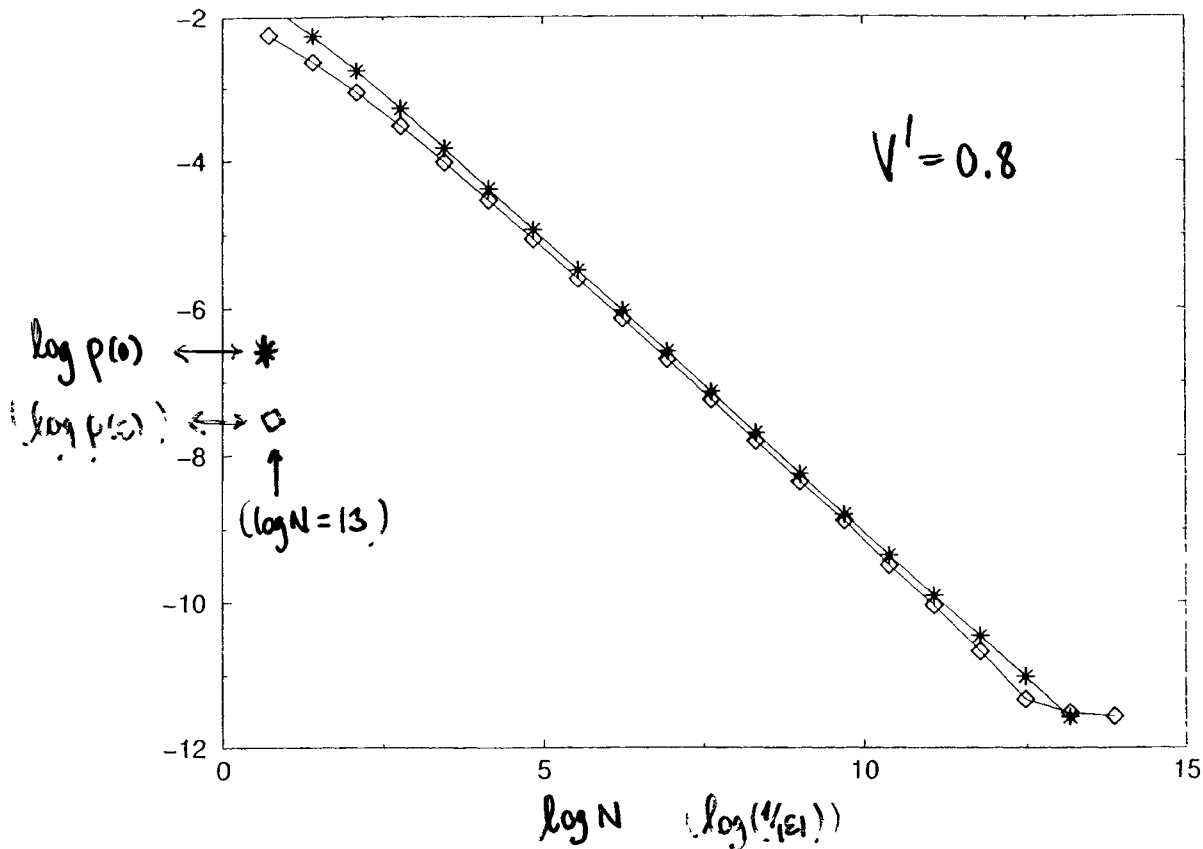
"pseudo-gap" ( $\beta \rightarrow 0, N \rightarrow \infty$  real gap (A-B-chain))

further zooming in:

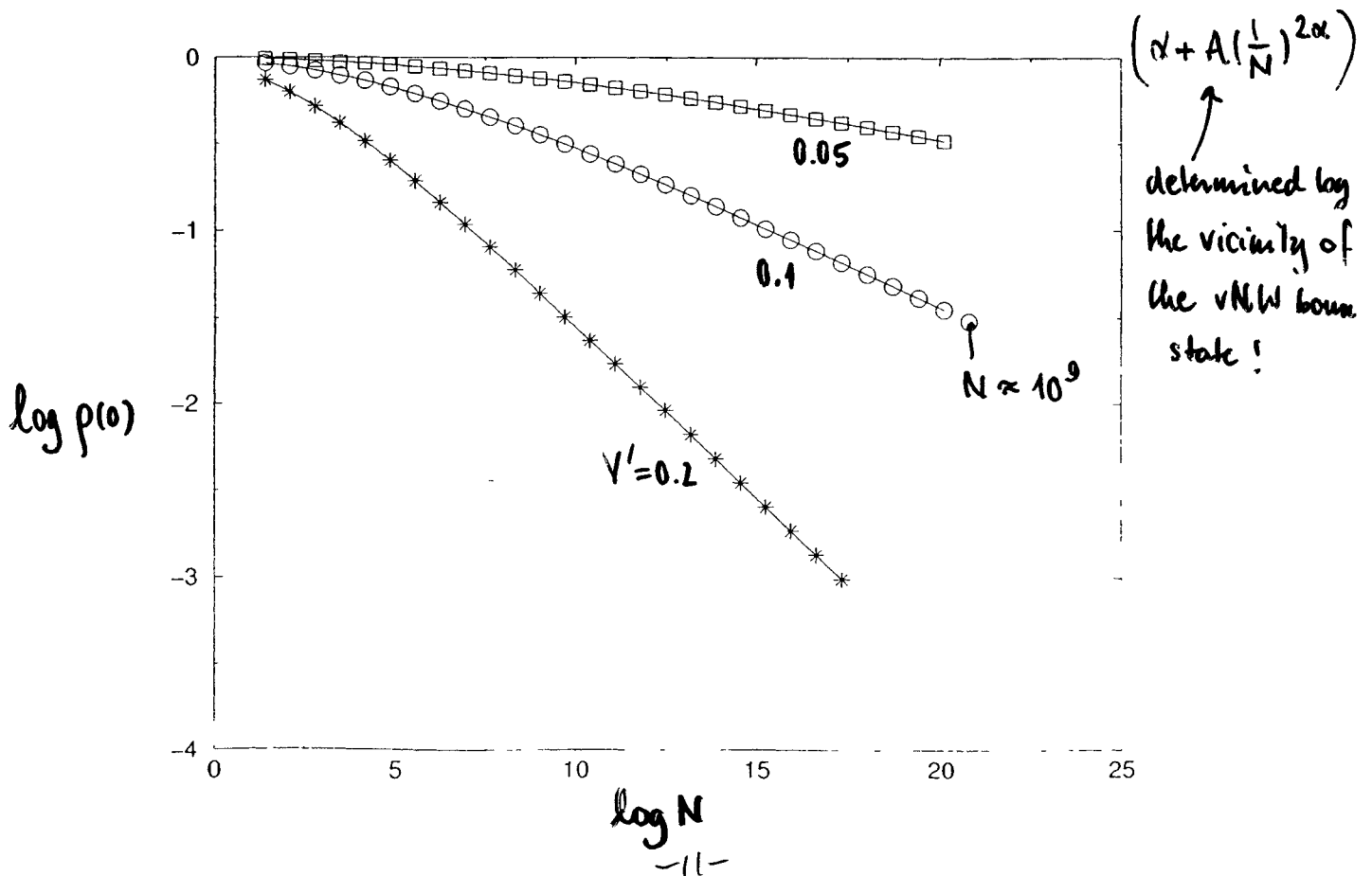


the power law  $p(\omega) \sim (1/N)^\alpha$  is easier to detect than the

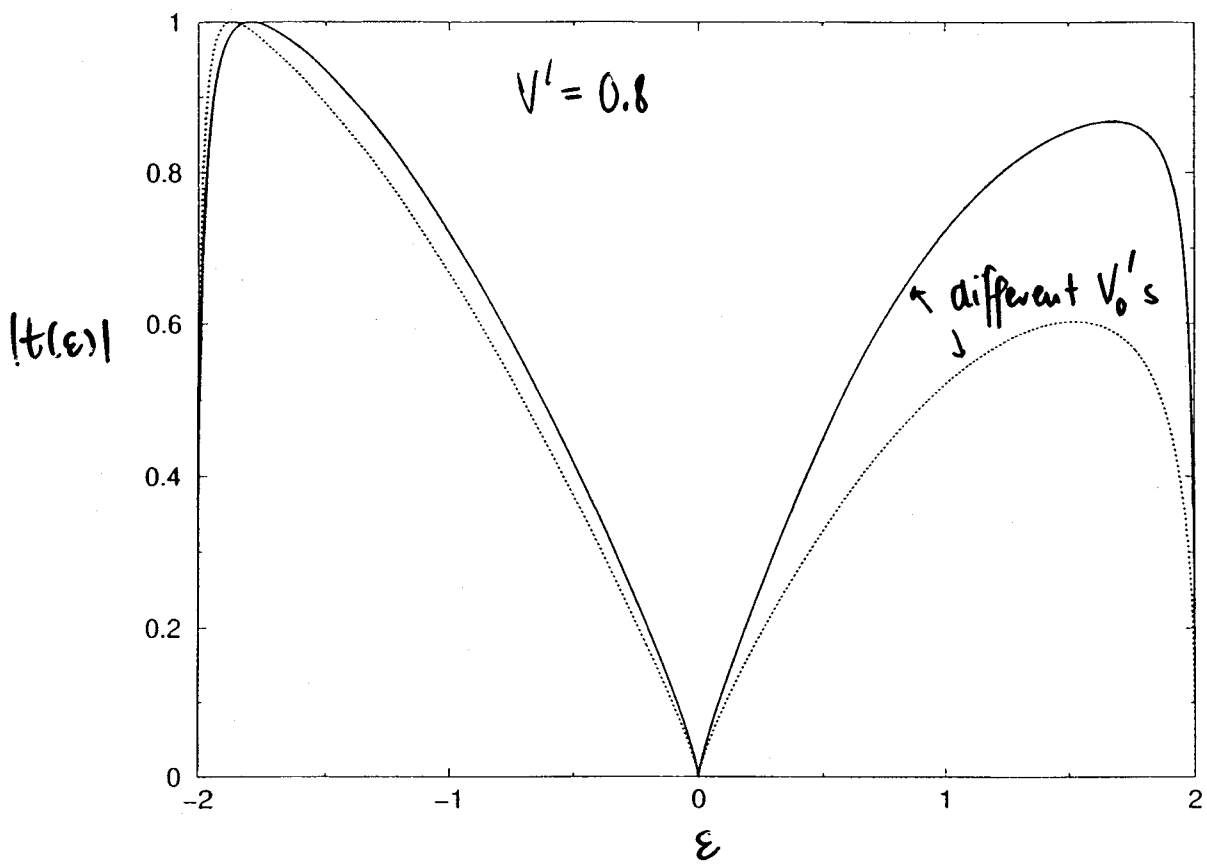
" "  $p(\omega) \sim |\omega|^\alpha$



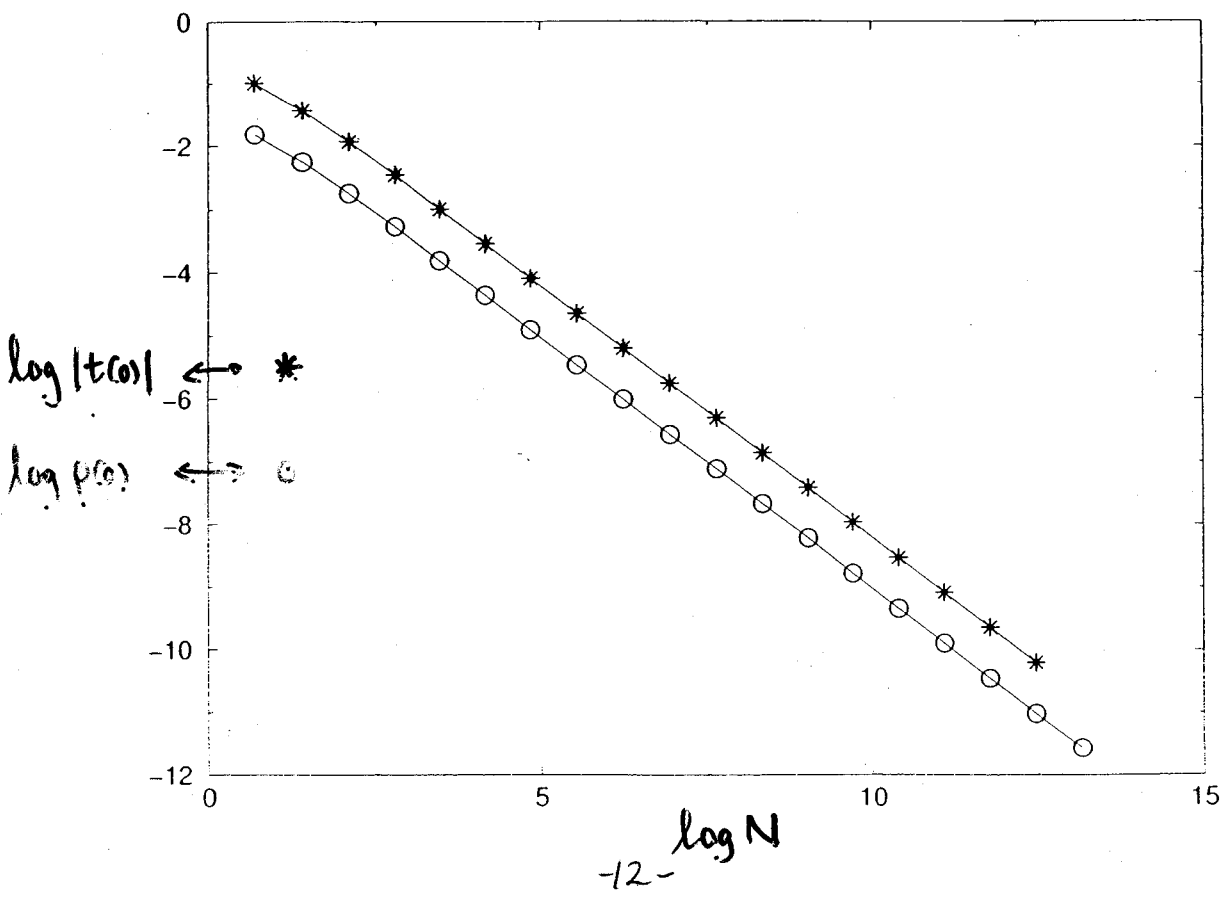
for smaller values of V' the approach to the power law is slow



the transmission amplitude  $|t(\epsilon)|$  vanishes with a power law near  $\epsilon=0$



with the same exponent  $\alpha$  as the LDCS



attempt to verify Kane + Fisher within HF successful?

- power laws in LDOS and transmission 😊
- exponent  $\alpha$  depends on  $V_0$

$$\alpha = \alpha_{\text{HF}}(U, k_F, V_0)$$

$$\neq \alpha_{\text{boundary}}(U, k_F) \quad (\text{Kane + Fisher}) \quad \text{😞}$$

---

3) needed: better treatment of electron correlations to obtain the flow " $V_0 \rightarrow \infty$ "

Method: "Exact" functional RG technique

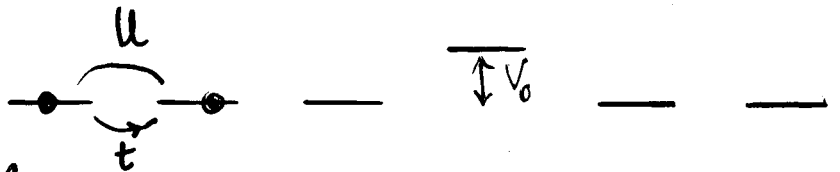
- Polchinski
- Salmhofer
- • Wetterich (Morris) (!-FI)

1 loop:

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left( \Sigma \right)_{i \rightarrow j} = \text{Diagram with } \Gamma_4 \text{ and a loop}$$

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \left( \Gamma_4 \right) = \text{Diagram with two } \Gamma_4 \text{ and a loop} + (\leftrightarrow) + (\leftrightarrow) + \text{Diagram with two } \Gamma_4$$

spinless fermions:



half filling: LL for  $0 \leq U < 2$

aim: anomalous dimension linear in  $U$  ( $V_0$  arbitrary)

approximation:  $\Gamma_4 \rightarrow U$  (antisymmetrized) ("no" flow)  
 (↔ with spin)

cut-off in Matsubara frequencies ( $\alpha \rightarrow \Lambda$ ):  $(G_\Lambda^0(i\omega_n))_{nn} = \Theta(|\omega_n| - \Lambda) \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_n}$

$\Rightarrow$  (in site representation) non-perturbative in the impurity strength, perturbative in  $U$

$$\dot{\Sigma}_{ii}^{(\Lambda)} = -\frac{1}{2\pi} U \left[ G_{i+1, i+1}(i\Lambda) + G_{i-1, i-1}(i\Lambda) + (\Lambda \rightarrow -\Lambda) \right]$$

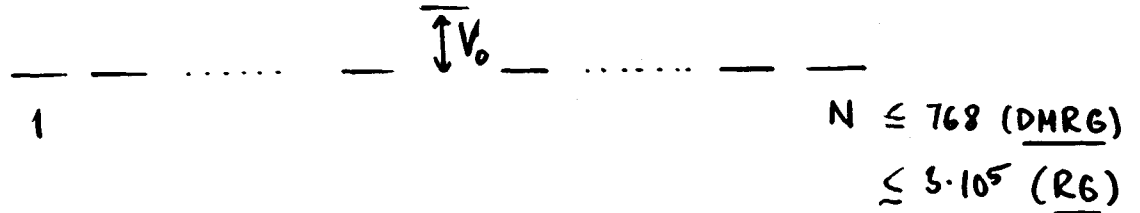
$$\dot{\Sigma}_{i, i\pm 1}^{(\Lambda)} = \frac{1}{2\pi} U \left[ G_{i, i\pm 1}(i\Lambda) + G_{i, i\pm 1}(-i\Lambda) \right]$$

small  $V_0$  allows analytical solution:  $\sum_{k_F, -k_F}^{(\Lambda)} \sim \left( \frac{1}{\Lambda} \right) \frac{\tilde{v}(0) - \tilde{v}(2k_F)}{2\pi v_F}$   
 (as long as  $\Sigma_{ii}$  stays small)

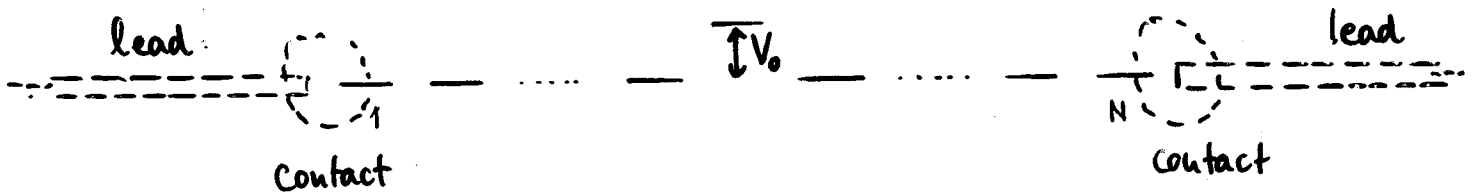


Systems studied :

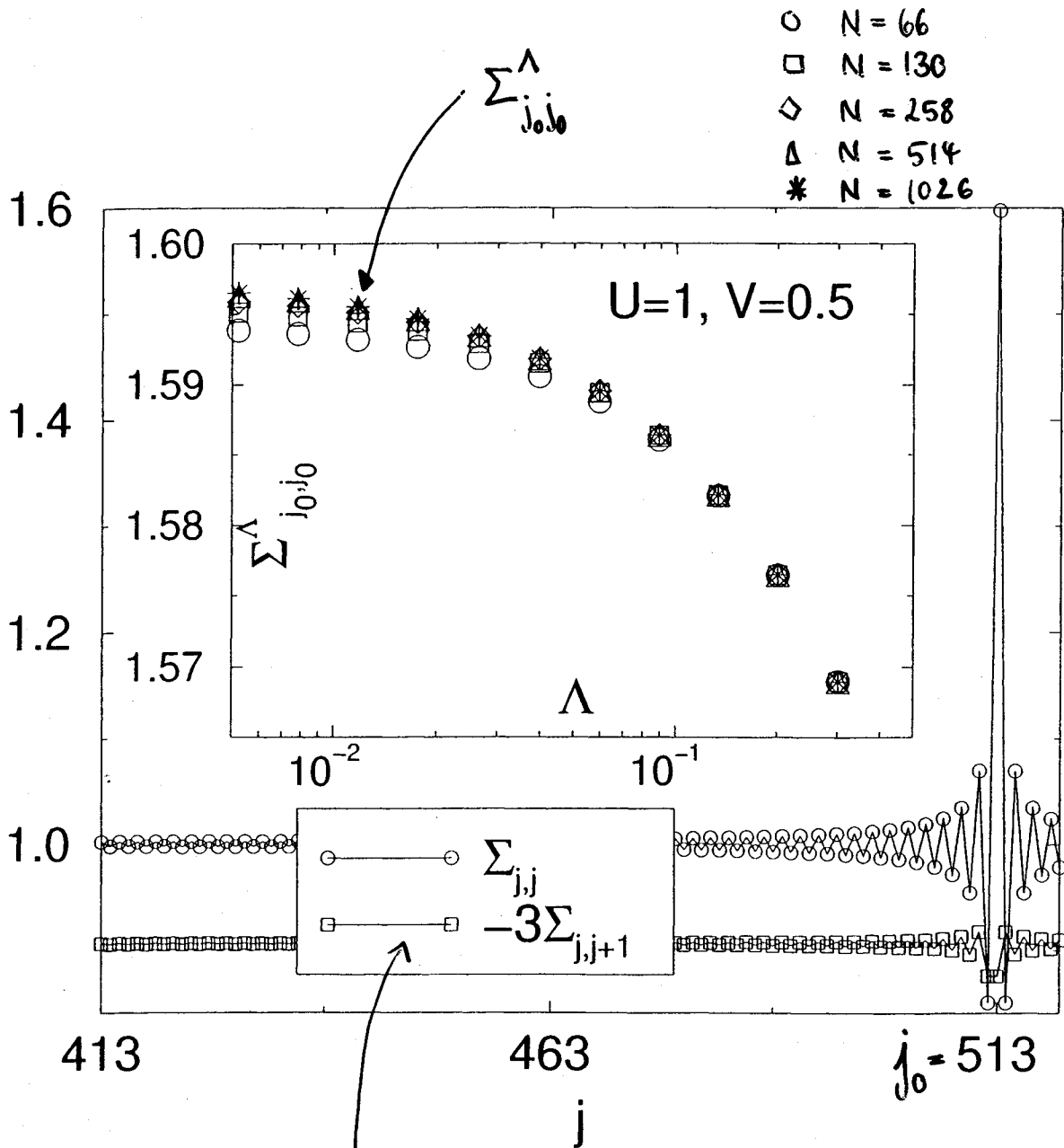
a) finite systems with open boundaries



b) finite LL's with semiinfinite noninteracting leads



site impurity:



$\Sigma_{j,j'}^{\Lambda=0}$  for N = 1026

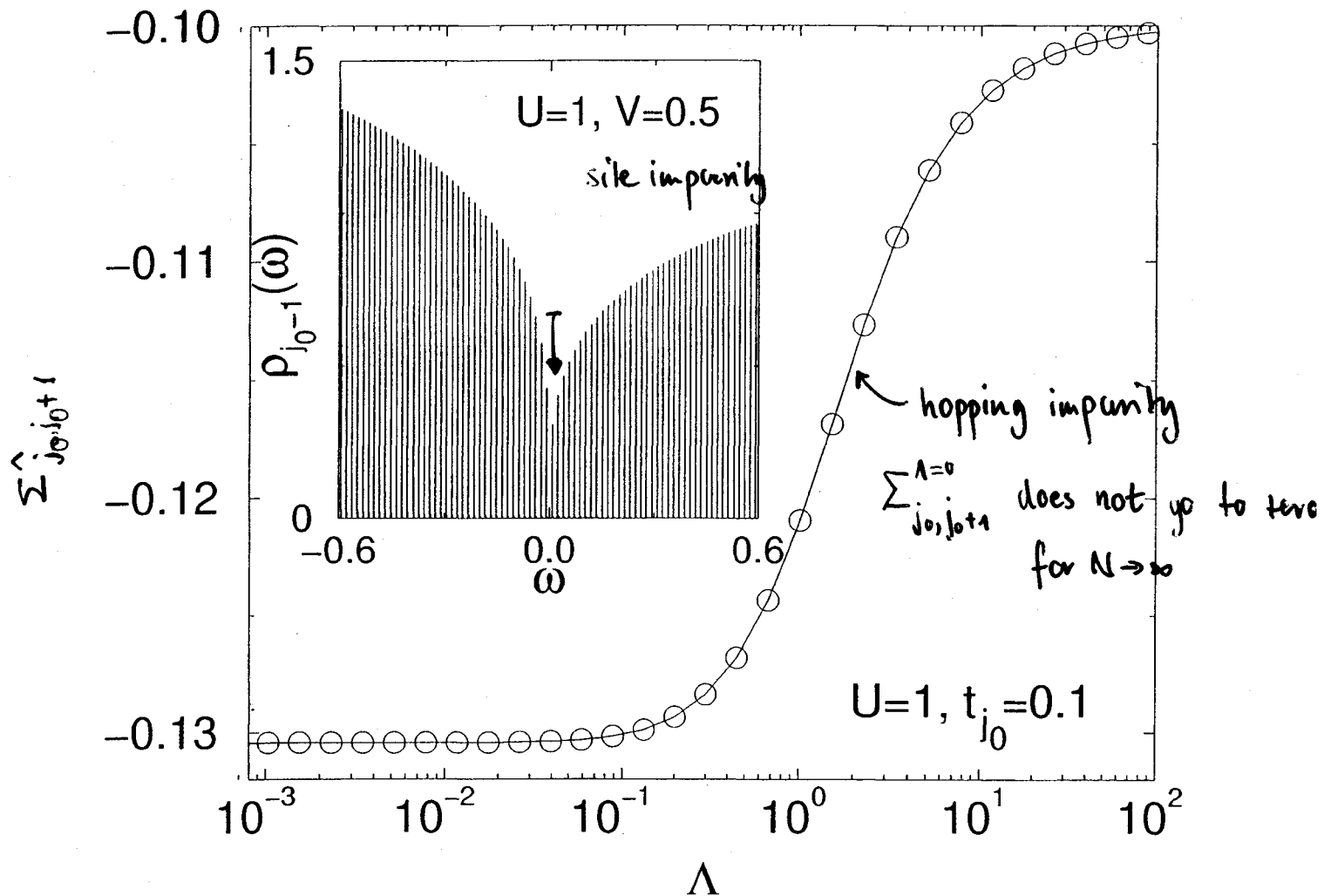
$V_0^{\text{eff}}$   
 $\Lambda=0$   
 $\Sigma_{j_0, j_0}$

goes to a finite constant for  $N \rightarrow \infty$

$\Sigma_{k_F, -k_F}^{\Lambda=0}$

diverges for  $N \rightarrow \infty$

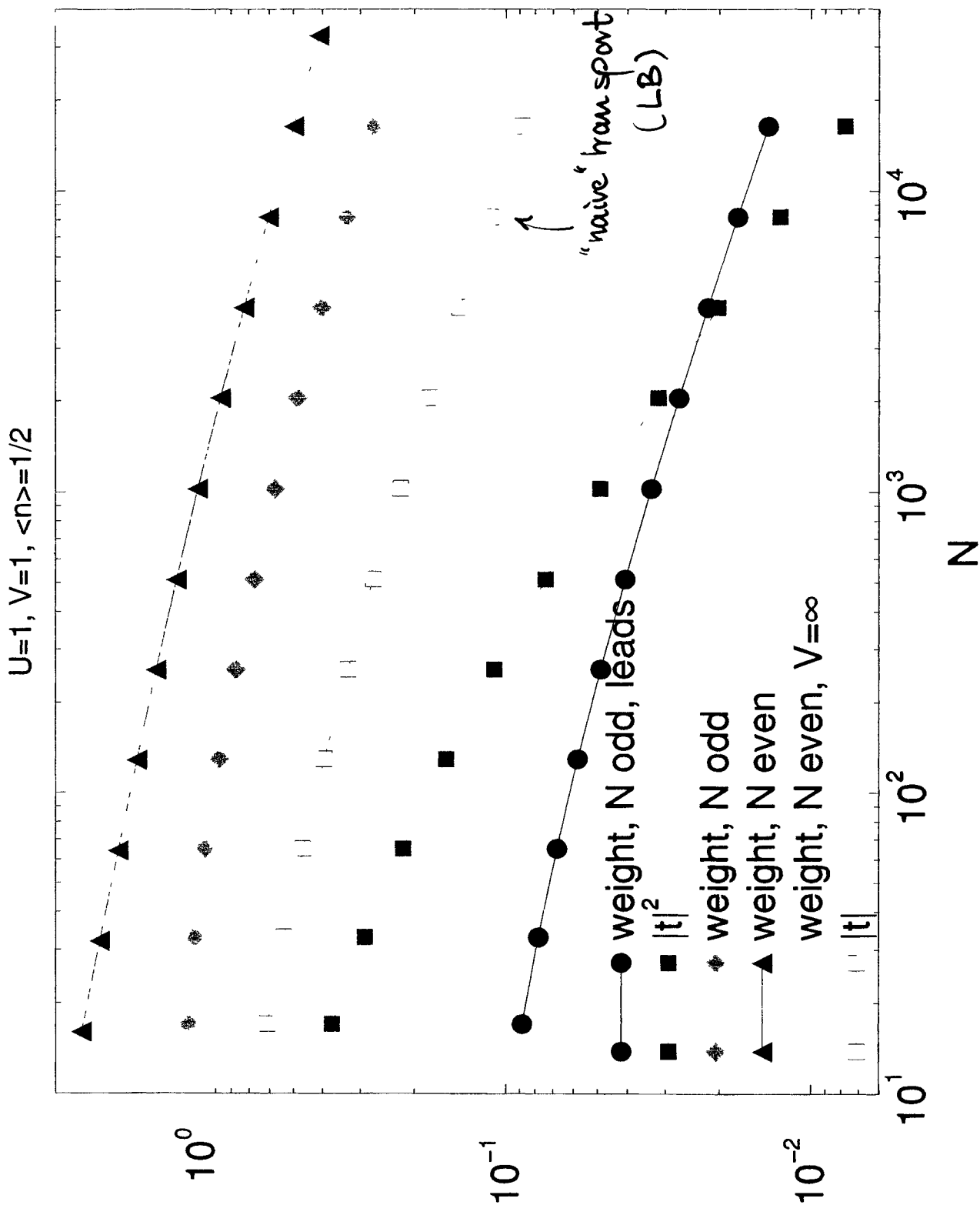
finite chain : discrete spectrum



finite site scaling of peak at  $\omega=0$ :

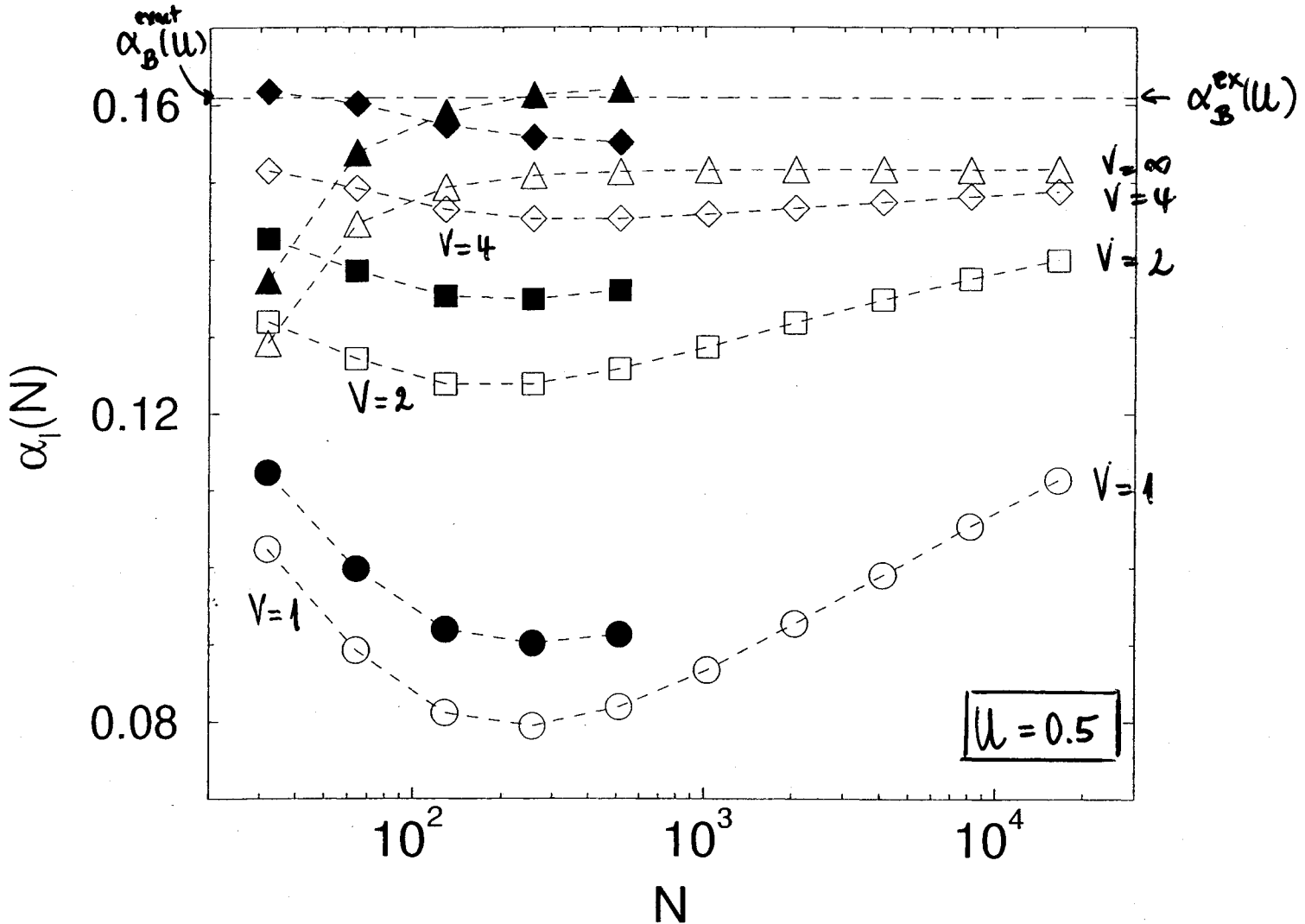
RG und DMRE

chain with infinite leads :



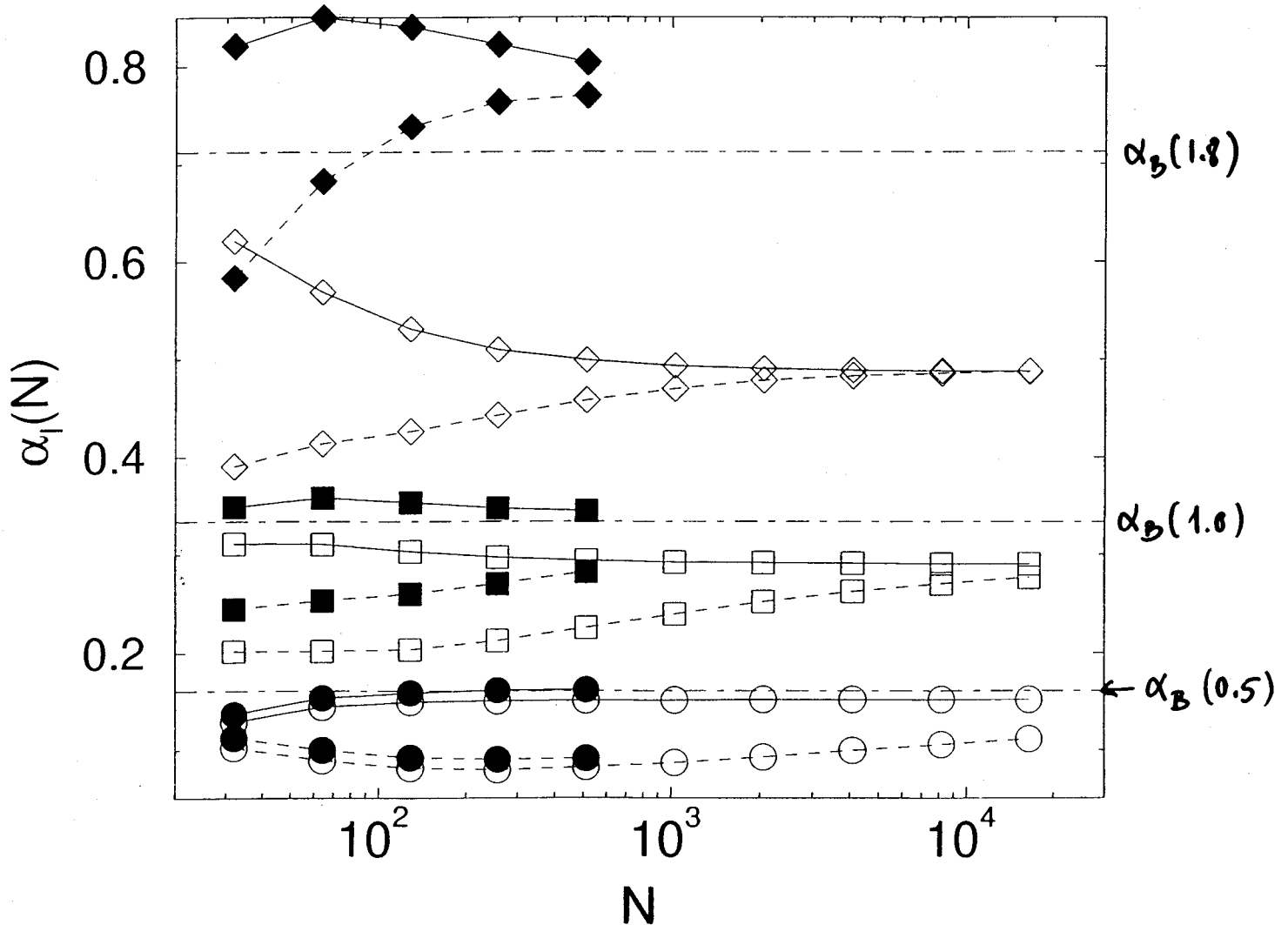
slowly approach to the open boundary result

$$\left( \alpha_I(N) \equiv - \frac{\Delta \log P(N)}{\Delta N} \right)$$



full symbols: DMRG

different values of  $u$  :



—  $V = \infty$        $\square$  :  $u = 1$        $\circ$  :  $u = 0.5$   
 ---  $V = 1$        $\diamond$  :  $u = 1.8$

full symbols : DMRG

## Conclusion.

- The experimental verification of the asymptotic open boundary physics in transport in Luttinger liquids requires very long chains (e.g. nanotubes)
- The RG-method used (non-perturbative in the impurity strength, perturbative in the electron-electron interaction) shows the importance of oscillatory long range effective potentials for the understanding of the Kane-Fisher scenario directly in the fermionic language.