UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

"CÁLCULO DA CONTRIBUIÇÃO DE IMPURE-
ZAS MAGNÉTICAS À RELAXAÇÃO NUCLEAR
EM METAIS"

ABRAHAM MOYSÉS COHEN

Dissertação apresentada ao Instituto
de Física e Química de São Carlos ,
USP, para a obtenção do título de Mes
tre em Física Básica.

Orientador. Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

1982

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - USP
FÍSICA

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE _____

Abraham Moysês Cohen

APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 08 DE novembro DE 1982.

COMISSÃO JULGADORA:

Luiz Nunes de Oliveira

Dr. Luiz Nunes de Oliveira - Orientador

Horácio Carlos Panepucci

Dr. Horácio Carlos Panepucci

José D'Albuquerque e Castro

Dr. José D'Albuquerque e Castro

Este trabalho foi realizado com o apoio financeiro da CAPES
através do Convênio PICD/FUA.

À minha esposa e filhos,
Mirtès, Salomão e David
com carinho.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Luiz Nunes de Oliveira, que me orientou neste trabalho, por sua participação segura, dedicação e por seus ensinamentos que muito contribuíram para minha formação profissional.

Ao Prof. José Roberto Drugowich de Felício pelo estímulo e amizade.

Aos colegas do Departamento de Física da FUA, entre eles Gláucia, Hamilton, Leitão, Rafael e Marcílio, pela amizade e apoio que sempre recebi.

Aos amigos Valter, Mariza, Pedro e Umbelino com quem tive o prazer de conviver.

Aos demais professores e colegas do Departamento de Física e Ciência dos Materiais, do Instituto de Física e Química de São Carlos.

À Marta Regina pelo excelente trabalho de datilografia.

Especialmente, à minha esposa Mirtes, de cuja compreensão e abdicção dependeu a realização deste trabalho.

ÍNDICE

Lista de ilustrações e de tabela	i
Resumo	ii
Abstract	iii
 CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO	 1
1.1. O problema Kondo	3
1.2. Tempo de relaxação Spin-Rede	7
1.3. Medida do tempo de relaxação T_1	9
1.4. Tempo de relaxação em ligas magnéticas diluídas	12
 CAPÍTULO II - GENERALIZAÇÃO DO FORMALISMO DE ONDAS-S PARA DOIS CENTROS DE SIMETRIA	 16
2.1. O modelo	16
2.1.1. Banda de condução	17
2.1.2. Interação eletron de condução- -impureza	17
2.1.3. Interação eletron de condução- -núcleo	18
2.1.4. Interação com campo magnético externo	19
2.2. Base com simetria de dois centros	22
2.2.1. Base esfericamente simétrica em relação à impureza e ao nú- cleo	23
2.2.2. Base ortogonal	25
2.2.3. Acoplamento com a impureza e com o núcleo	26
 CAPÍTULO III - TRANSFORMAÇÃO DO GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO	 30
3.1. Discretização da banda de condução	31
3.2. Definição de uma nova base	36
3.3. Generalização para o Hamiltoniano de relaxação	38
3.4. Truncamento do Hamiltoniano discreti- zado	40
3.5. Diagonalização iterativa	41

3.6. Análise dos pontos fixos	43
3.6.1. Ponto fixo de $[\bar{H}_O^N]$	45
3.6.2. Pontos fixos de $T[H_J^N]$	47
3.6.3. Pontos fixos de $[H_N]$	52
CAPÍTULO IV - CÁLCULO DO TEMPO DE RELAXAÇÃO	53
4.1. Expressão perturbativa para o cálculo do tempo de relaxação	53
4.2. Método da convulação	56
CAPÍTULO V - RESULTADOS	60
5.1. Recapitulação da metodologia para o cálculo de T_1	60
5.2. Cálculo analítico de T_1 para $T=0$	63
5.3. Cálculo numérico de T_1 para $T=0$	66
5.3.1. Detalhes do cálculo numérico	68
5.3.2. Comentários sobre as aproxima- ções numéricas	68
5.4. Análise do tempo de relaxação para $T > 0$	72
CAPÍTULO VI - CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTU- ROS	76
APÊNDICE A - DERIVAÇÃO DA EXPRESSÃO ANALÍTICA DE T_1 PARA $T=0$	79
REFERÊNCIAS	83

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

FIGURA 1.1 - Resistividade de ligas magnéticas diluídas em função da temperatura	4
FIGURA 1.2 - Curva universal para a suscetibilidade no problema Kondo	6
FIGURA 1.3 - Decaimento de indução livre em NMR	11
FIGURA 1.4 - Medida do tempo de relaxação T_1	11
FIGURA 2.1 - Banda de condução	20
FIGURA 2.2 - Localização da impureza e do núcleo	20
FIGURA 2.3 - Densidade de probabilidade para os estados $C_{\epsilon\mu}$ e $d_{\epsilon\mu}$	24
FIGURA 2.4 - Densidade de probabilidade para os estados $C_{\epsilon\mu}$ e $\bar{C}_{\epsilon\mu}$	27
FIGURA 3.1 - Discretização logarítmica da banda de con- dução	33
FIGURA 4.1 - Ilustração do processo de convolução	59
FIGURA 5.1 - Resultados do cálculo numérico da taxa de relaxação para $T=0$	69

LISTA DE TABELA

TABELA I - Informações sobre a diagonalização numérica de $\bar{H}_O^N$	51
--	----

RESUMO

As técnicas do grupo de renormalização, desenvolvidas originalmente por Wilson para o problema Kondo, são aplicadas, pela primeira vez, ao problema de relaxação de spins nucleares em ligas magnéticas diluídas. Desenvolve-se um formalismo para calcular o tempo de relaxação longitudinal T_1 válido para todas as faixas de temperatura $0 < k_B T < D$, onde D é a largura da banda. Em particular, para $T=0$ deriva-se uma expressão analítica para T_1 ; para distâncias R , entre o núcleo e a impureza, muito grandes comparadas com o inverso do momento de Fermi k_F o resultado recai na expressão obtida por Korringa para o tempo de relaxação de spins nucleares em metais puros. Diminuindo-se $k_F R$, T_1 aumenta, tornando-se infinito no limite $k_F R \rightarrow 0$.

Desenvolve-se um método numérico para o cálculo do tempo de relaxação a temperaturas finitas. Para estimar a precisão desse método, calcula-se T_1 no limite $T \rightarrow 0$; o resultado desse cálculo concorda muito bem com a expressão analítica obtida anteriormente.

O resultado de T_1 para $T \rightarrow 0$ concorda com aquele obtido recentemente por Roshen e Saam, que analisaram este problema usando a teoria de líquido de Fermi de Nozières apenas no limite $k_F R \rightarrow \infty$. Apontam-se as deficiências no tratamento desses autores para o caso de $k_F R$ finito, onde seus resultados discordam daqueles aqui derivados.

ABSTRACT

The renormalization group techniques developed by Wilson for the Kondo problem are applied, for the first time, to the calculation of nuclear spin relaxation rates in dilute magnetic alloys. A procedure that calculates the longitudinal relaxation time T_1 over the entire temperature range $0 < k_B T < D$, where D is the conduction bandwidth, is introduced. In particular for $T=0$ an analytical expression for T_1 is derived; for distances R between the impurity and the nucleus large compared to the inverse Fermi momentum k_F , the result is identical to Korringa's expression for the nuclear spin relaxation rate in the pure metal. For smaller $k_F R$, T_1 increases and becomes infinite as $k_F R \rightarrow 0$.

A numerical approach, capable of calculating T_1 at finite temperatures, is presented and tested by calculating T_1 for $T \rightarrow 0$; the numerical results are in excellent agreement with the analytical expression discussed above.

Only for $k_F R \rightarrow \infty$ do the results for T_1 at $T=0$ agree with those found by Roshen and Saam, who recently analysed this problem in the light of Nozières's Fermi liquid theory. The reasons for the discrepancy for finite $k_F R$ are discussed.

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

Durante as últimas três décadas, muitos autores têm investido consideráveis esforços para explicar o comportamento de impurezas magnéticas isoladas, imersas em metais não magnéticos. Experimentalmente, medem-se as contribuições de impurezas para as propriedades de ligas magnéticas diluídas tais como, resistividade elétrica, calor específico, susceptibilidade magnética, tempo de relaxação nuclear, etc. A explicação teórica desses resultados experimentais envolve a solução de um difícil problema de muitos corpos^{1,2}, hoje conhecido como problema Kondo devido às primeiras tentativas feitas por esse autor para resolvê-lo.

De fato, Kondo³ (1964) foi o primeiro a mostrar que o acoplamento magnético entre uma impureza localizada e os elétrons de condução é responsável pelo aparecimento de um mínimo na dependência da resistividade das ligas diluídas como função da temperatura; esse mínimo já havia sido observado experimentalmente muitos anos antes do trabalho de Kondo, permanecendo até então sem qualquer explicação teórica. A temperatura em que ocorre esse mínimo, passou-se então chamar temperatura de Kondo.

Não obstante o êxito obtido por seu trabalho, sob o ponto de vista de interpretação dos resultados experimentais, Kondo criou um novo problema, uma vez que o cálculo perturbativo da resistividade diverge quando a temperatura se anula. Esse novo problema teórico foi investigado por muitos autores durante os anos que se seguiram à publicação do trabalho de Kondo, tendo finalmente sido resolvido por Wilson⁴, em 1975, através de um método não perturbativo baseado em sua teoria de grupo de renormalização.

Esse método desenvolvido por Wilson para tratar o pro-

blema Kondo, tem sido largamente utilizado nos últimos anos, com bastante êxito, na solução de problemas que apresentem o mesmo tipo de divergência encontrada no problema Kondo, tal como o modelo de Anderson⁵, no caso de uma impureza e o problema de absorção de raios-x⁶; mais recentemente esse método foi usado para tratar o problema Kondo⁷ e o modelo de Anderson⁸, ambos para o caso de duas impurezas que interagem mutuamente.

Nesta dissertação, aplicaremos as técnicas de Wilson para analisar o problema da contribuição de impurezas magnéticas para a taxa de relaxação de spins nucleares do metal hospedeiro, em ligas diluídas. Vários autores têm-se dedicado a este problema, no caso de temperaturas altas (isto é, temperaturas muito acima da temperatura de Kondo) embora os resultados obtidos neste caso não estejam de pleno acordo com os resultados experimentais disponíveis⁹.

Em 1980, Roshen e Saam¹⁰ trataram pela primeira vez esse problema no caso de temperaturas baixas (isto é, muito menores que a temperatura de Kondo) usando diretamente os resultados de uma aproximação de líquido de Fermi, desenvolvida por Nozières¹¹ para o problema Kondo. Nesse trabalho, Roshen e Saam descreveram os estados eletrônicos de condução como estados-s de espalhamento, levando em conta os efeitos da impureza apenas na defasagem das funções de onda eletrônica. Infelizmente o problema que eles tentaram resolver não tem simetria esférica e sim uma simetria de dois centros definidos pela impureza e o núcleo cuja relaxação se observa, respectivamente. Uma vez que o tratamento de Nozières admite de partida um sistema com simetria esférica, espera-se deficiência no tratamento de Roshen e Saam.

De fato, os resultados por eles obtidos concordam com aqueles que aqui serão derivados num tratamento mais rigoroso apenas no caso em que impureza e núcleo estão separados por uma distância infinita. Mais ainda, uma vez que os resultados de Nozières

são válidos somente para temperaturas muito próximas de zero, os resultados de Roshen e Saam estão restritos a essa faixa de temperatura.

Embora a análise que será desenvolvida neste trabalho só discuta o caso de baixas temperaturas, o formalismo que será elaborado pode ser aplicado a todas as faixas de temperaturas, desde $T \gg T_K$ até $T \ll T_K$, onde T_K é a temperatura de Kondo.

As próximas seções deste capítulo serão dedicadas a um breve histórico, e a partir do Capítulo II começaremos a análise do problema.

1.1 - O Problema Kondo

A presença de momentos magnéticos localizados em ligas diluídas tem consequências importantes nas propriedades estáticas e dinâmicas dessas ligas. Até 1963 muitos trabalhos experimentais mostravam a ocorrência de um mínimo nas medidas de resistividade de algumas ligas em função da temperatura (ver fig. 1.1) e nenhuma teoria existente explicava como isso ocorria. Paralelamente, medidas de susceptibilidade dessas ligas indicavam a existência de momentos localizados. Uma análise mais cuidadosa dessas medidas revelavam uma correspondência um a um entre o fenômeno de resistência mínima e a ocorrência de momentos localizados; Kondo³ postulou então que esse fenômeno só ocorria em ligas magnéticas e calculou uma contribuição à resistividade originada da interação entre os elétrons de condução e o momento localizado e como resultado obteve um termo proporcional a $\ln T$. Esse termo, combinado com a resistividade da rede, dá origem à resistividade mínima que era encontrada experimentalmente.

Embora os resultados do cálculo perturbativo de Kondo sejam satisfatórios sob o ponto de vista de comparação com as medidas experimentais, o termo logarítmico colocou um novo problema de divergência que ocorre quando a temperatura vai a zero, diver-

FIG. 1.1 - Representação esquemática da resistividade de algumas ligas magnéticas diluídas em função da temperatura. Ao contrário do que acontece em metais contendo impurezas não magnéticas, a resistividade dessas ligas apresenta um valor mínimo numa temperatura característica T_K conhecida como temperatura de Kondo. No canto superior direito desta figura, representa-se a contribuição da impureza magnética para a resistividade (isto é, resistividade da liga menos resistividade do metal) $\Delta\rho$ em função da temperatura.

gência essa que tem sido encontrada em todas as propriedades dessas ligas, quando calculadas perturbativamente. Esse problema, que indica uma falha da teoria de perturbação, tem interessado a muitos autores e diversos enfoques teóricos foram propostos na década que seguiu o trabalho de Kondo; esse problema foi finalmente resolvido por Wilson⁴, em 1975, que usou um método não perturbativo por ele desenvolvido, para calcular a contribuição da impureza à susceptibilidade χ , tendo obtido o resultado mostrado na fig. 1.2.

Esse método, que descreveremos em detalhes no Capítulo III, consiste em desacoplar sistematicamente as várias escalas de energia na banda de condução, que são responsáveis pelo aparecimento daquela divergência, e tratar numericamente apenas as escalas que sejam relevantes quando comparadas com escala da temperatura (isto é, $k_B T$). Como resultado da aplicação dessa técnica ao problema Kondo, Wilson encontrou que esse problema se separa em três regiões fisicamente distintas, dependendo se a temperatura que estamos considerando é maior, menor ou da ordem de uma temperatura característica, dada por $T_K = (D/k_B) \sqrt{|\rho J|} e^{-1/|\rho J|}$ - que a grosso modo é igual à temperatura onde a contribuição dos termos perturbativos torna-se da ordem do termo não perturbado, no cálculo de Kondo - sendo ρ a densidade de estados, J a constante de troca e D a largura da banda. Para $T \gg T_K$, os resultados encontrados por Wilson são aproximadamente iguais àqueles para elétrons de condução e impureza desacoplados, isto é, para $J=0$; por exemplo, a contribuição da impureza para a susceptibilidade é aproximadamente dada por $T\chi = (g\mu_B)^2/4k_B$ conforme se esperaria para um momento magnético livre correspondente a spin 1/2. No caso $T \ll T_K$, uma nova situação é encontrada na qual a impureza está fortemente acoplada à banda de condução na formação do estado singleto com um elétron, o que é equivalente a se tomar um acoplamento efetivo $J = -\infty$; para a susceptibilidade encontra-se $T\chi = 0$ que é caracterís

FIG. 1.2 - Contribuição de uma impureza de spin 1/2 para a suscetibilidade magnética de ligas diluídas, como função da temperatura, normalizada pela temperatura de Kondo em escala logarítmica, derivada por Wilson (Ref. 4) a partir do Hamiltoniano de Kondo (esquemático). Para $|\rho J| \ll 1$, onde ρ é a densidade de estados e J a constante de acoplamento, esta curva é independente de J , e portanto universal; observa-se no entanto que a temperatura de Kondo T_K depende de J (ver texto).

tico de uma entidade não magnética. Para $T \sim T_K$, a curva da suscetibilidade interpola entre esses dois extremos.

Com argumentos envolvendo apenas comparações entre as várias escalas de energia do problema, podemos interpretar qualitativamente os resultados obtidos por Wilson para $T \gg T_K$ e $T \ll T_K$. Uma vez que o sistema está em equilíbrio térmico com um reservatório a uma temperatura T , podemos associar a essa temperatura um tempo de coerência do sistema $\tau_T \sim \hbar/k_B T$ que define a duração de uma medida sobre o sistema. Outra escala que encontramos no problema está relacionada com o tempo de vida τ_J da impureza num estado Zeeman, devido ao acoplamento desta com os elétrons de condução. Para temperaturas altas, τ_T é pequeno, de modo que $\tau_J \gg \tau_T$; uma vez que o tempo de medida é muito menor do que o tempo necessário para a impureza inverter seu spin, qualquer medida relativa ao spin da impureza mostrará então que o valor médio de S_z , observado nessa medida, será $1/2$ ou $-1/2$, o que implica numa impureza livre. Por outro lado, quando a temperatura é pequena, τ_T é grande de modo que, $\tau_J \ll \tau_T$; logo, uma medida relativa ao spin da impureza mostrará que o valor médio de S_z , observado nessa medida, será nulo, o que é característico de uma entidade não magnética. Assim, para altas temperaturas χ segue a lei de Curie $[\chi = (g\mu_B)^2/4k_B]$ enquanto $T\chi$ se aproxima de zero para baixas temperaturas. A temperatura de Kondo T_K , que separa as regiões de altas e baixas temperaturas, corresponde à temperatura em que $\tau_J \sim \tau_T$.

1.2 - Tempo de Relaxação Spin-Rede

Nesta seção, apresentaremos sucintamente o conceito de tempo de relaxação spin-rede, sem entrarmos em detalhes de como determiná-lo. O cálculo desse tempo para spins nucleares em ligas magnéticas diluídas será mostrado a partir do próximo Capítulo.

Para fixar idéias, consideraremos uma amostra contendo vários núcleos idênticos não interagentes entre si; suponhamos que cada núcleo tenha um spin $I = 1/2$ e que inicialmente o sistema esteja colocado num campo magnético nulo. Nesta situação os núcleos se distribuem igualmente entre os dois níveis Zeeman, que possuem a mesma probabilidade de ocupação, e nenhuma magnetização macroscópica será detectada uma vez que esta depende da diferença de população entre esses níveis. Se aplicarmos agora um campo magnético finito, os níveis Zeeman terão diferentes probabilidades de ocupação e neste caso se desenvolverá uma magnetização macroscópica ao longo da direção desse campo magnético. O tempo médio que decorre entre a aplicação do campo e o estabelecimento de uma magnetização de equilíbrio da amostra, é chamado tempo de relaxação longitudinal ou tempo de relação spin-rede, convencionalmente denotado por T_1 , tempo esse que deve depender da natureza das interações microscópicas entre os spins nucleares e a rede. (A palavra rede representa aqui genericamente todos os outros graus de liberdade do sistema com quem os spins nucleares possam interagir.)

De fato, para se estabelecer uma magnetização na amostra, alguns núcleos fazem transições do nível de maior energia (correspondente a momentos magnéticos antiparalelos ao campo) para o nível de menor energia, e em consequência o sistema de núcleos libera um excesso de energia. Uma vez que neste processo a energia deve ser conservada, conclui-se que deva haver um mecanismo de interação entre spins nucleares e a rede, mecanismo esse que permita à rede absorver o excesso de energia. Em síntese, podemos dizer que o grau de magnetização de uma amostra depende da capacidade da rede em absorver energia e o tempo T_1 para se estabelecer essa magnetização está relacionado com a eficiência dos mecanismos de interação¹².

De passagem, mencionaremos, apenas, um outro tempo de

relaxação, denominado tempo de relaxação transversal e denotado por T_2 , tempo esse que está relacionado com evolução da magnetização transversal. Um dos possíveis mecanismos para T_2 , em sólidos, é a interação mútua entre os spins nucleares.

1.3 - Medida do Tempo de Relaxação T_1

Várias técnicas experimentais têm sido usadas para medir o tempo de relaxação T_1 , a maioria delas baseada em métodos transientes. Um desses métodos que é usado para essa medida é o chamado decaimento de indução livre, que passamos a descrever a seguir¹³.

Consideremos um sistema de spins nucleares e vamos supor que nesse sistema já se tenha estabelecido a magnetização de equilíbrio $\vec{M}_0$, ao longo do campo (estático) $\vec{H}_0$. Apliquemos então um campo magnético $\vec{H}_1$ circularmente polarizado, transversal a $\vec{H}_0$. (Os efeitos do campo $\vec{H}_1$ sobre a magnetização são mais facilmente descritos por meio de um sistema de coordenadas girantes.¹⁴). Se a frequência ω de $\vec{H}_1$ satisfaz a condição de ressonância, isto é, $\omega = \omega_0 = \gamma H_0$, o campo efetivo, visto do sistema girante com $\vec{H}_1$ ao longo do eixo- x' , é $\vec{H}_{ef} = \vec{H}_1$ e a frequência com que a magnetização precessa em torno de $\vec{H}_1$ é então γH_1 . Assim, desligando-se $\vec{H}_1$ após um tempo $t = t_\omega$ satisfazendo a condição $\gamma H_1 t_\omega = \pi/2$, temos produzindo um pulso de 90° (como é comumente conhecido na literatura) pulso esse que gira a magnetização, inicialmente ao longo de z , para o plano $x' - y'$. Se $t = 2t_\omega$, geramos um pulso de 180° , e assim por diante. Na figura 1.3 representamos esquematicamente os efeitos de um único pulso de 90° . Os eventos daquela figura são descritos a seguir.

A. - Aplica-se um campo $\vec{H}_0$ ao sistema de spins e espera-se um tempo maior do que T_1 , para que a magnetização de equilí -

brio M_0 seja estabelecida.

B. - Com um pulso de 90° , gira-se essa magnetização para o plano $x' - y'$, que então precessa em torno de $\vec{H}_0$ com uma frequência ω_0 , induzindo uma corrente na bobina, que inicialmente é proporcional a $\vec{M}_0$.

C. - Esse evento é melhor entendido, idealizando-se a seguinte situação. Consideremos que a amostra esteja colocada num campo $\vec{H}_0$, não homogêneo; vamos então dividir essa amostra arbitrariamente, digamos em cinco regiões, de maneira que em cada uma delas os momentos individuais precessem em fase. Caracterizemos então cada região por um elemento de magnetização. Dos cinco elementos que representamos na figura, apenas um precessa com frequência ω_0 , enquanto que dois precessam com frequências maiores e os outros dois com frequências menores do que ω_0 . Após o intervalo de tempo BC, esses cinco elementos têm-se defasado, como mostrado na figura. Existe ainda um momento resultante ao longo de $-y'$, no plano $x' - y'$, mas é muito menor do que $\vec{M}_0$. Portanto, o sinal induzido terá decaído.

D. - Após um intervalo de tempo suficientemente grande os elementos de magnetização estão aleatoriamente distribuídos no sistema de coordenados girantes; nenhum sinal é induzido na bobina.

A sequência BCD, na figura 1.3, representa o que se chama de decaimento de indução livre.

Até aqui temos desprezado os efeitos de relaxação. Consideremos a sequência da figura 1.4, que agora inclui os efeitos de T_1 . Os eventos mostrados naquela figura são descritos como segue.

A,B. - Idênticos aos correspondentes na figura 1.3.

C. - Além da defasagem dos elementos de magnetização no plano $x' - y'$, cada um desses elementos é agora diminuído, pois

FIG. 1.3 - Representação esquemática da sequência de eventos seguindo a aplicação de um pulso de 90° , mostrando o decaimento de indução livre (ver descrição no texto).

FIG. 1.4 - Medida do tempo de relaxação T_1 , usando o decaimento de indução livre após a aplicação de um segundo pulso de 90° (ver explicação no texto).

parte dos momentos retornam ao equilíbrio ao longo de z' , devido ao processo T_1 .

D. - Um segundo pulso de 90° é aplicado após o processo de relaxação ter restaurado uma apreciável componente M_z .

E. - A componente M_z estabelecida por T_1 é agora girada para o plano $x'-y'$. O decaimento de indução livre, resultante da precessão dessa componente girada, é evidentemente proporcional à parte da magnetização que tinha relaxado durante o tempo τ . Variando-se τ , podemos então determinar T_1 uma vez que a amplitude do decaimento seguindo o segundo pulso é $(1 - e^{-\tau/T_1})$ da amplitude inicial.

1.4 - Tempo de Relaxação em Ligas Magnéticas Diluídas

Passemos, agora, a discutir alguns dos mecanismos propostos para descrever a relaxação nuclear em metais. Para o caso de metais puros, a interação hiperfina entre o núcleo e os elétrons de condução é a fonte dominante desse mecanismo principalmente a parte de contato, uma vez que é grande a concentração de elétrons na posição do núcleo. Korringa, em 1950, usando o modelo de elétrons livres, foi o primeiro a levar em conta a interação de contato para calcular o tempo de relaxação T_1 , cujo resultado pode ser expresso para relação $T_1 T = \text{Constante}$ ¹⁵. Embora essa relação tenha sido obtida partindo de um modelo muito simplificado para o metal - como é o caso do modelo de elétrons livres - ela é preservada mesmo numa derivação mais completa, incluindo-se a interação elétron-elétron¹⁶ e tem sido observada para a maioria dos metais.

Nas últimas duas décadas, muitos autores têm-se interessado em investigar a relaxação nuclear em metais na presença de uma impureza magnética. Uma vez que os elétrons de condução são polarizados em torno de uma impureza, espera-se que isto consti -

tua uma nova fonte para a relaxação. A seguir, descreveremos em poucas palavras alguns trabalhos sobre relaxação em ligas magnéticas diluídas para temperaturas elevadas.

Benoit, de Gennes e Silhouette¹⁷, em 1963, foram os primeiros a incorporarem a contribuição de impurezas magnéticas na relaxação de núcleos hospedeiros em metais, propondo um mecanismo que envolve um acoplamento indireto, entre o núcleo e a impureza, via interação de contato com os elétrons de condução, acoplamento este conhecido como RKKY¹⁸. Mais tarde, em 1969, Giovannini e Heeger^{19,20} propuseram um outro mecanismo também envolvendo um acoplamento indireto entre a impureza e o núcleo tipo RKKY. A diferença entre esses dois mecanismos é que um deles (BGS) envolve transições reais e o outro (GH), transições virtuais da impureza entre os níveis Zeeman. Como consequência, diferentes dependências funcionais de T_1 , tanto com o campo como com a temperatura, podem ser encontradas para esses dois mecanismos²⁰. Muitos trabalhos experimentais^{9,21} tem mostrado que nenhuma dessas teorias propostas oferece uma completa explicação para a relaxação nuclear em ligas magnéticas diluídas mesmo para o caso de temperaturas altas, onde essas ligas não exibem o efeito Kondo, muito embora exista alguma evidência de que o mecanismo BGS seja dominante, pelo menos em campos magnéticos fracos²¹.

Uma situação muito mais complicada, sob o ponto de vista teórico, é tratar o problema de relaxação em ligas magnéticas diluídas a temperaturas muito baixas. Neste caso se faz necessário um completo conhecimento do estado fundamental e dos estados de baixa excitação do sistema eletrôn-impureza, que está intimamente ligado à solução do problema Kondo. Uma vez que a solução desse problema só aconteceu na metade da última década, poucos resultados²² foram obtidos nesta área até o presente. Da mesma forma, existem poucos dados experimentais disponíveis sobre relaxação em ligas, a temperaturas baixas, dos quais a maioria foram ob

tidos em campos magnéticos fortes que, polarizando a impureza, suprime o efeito Kondo uma vez que o estado singlete é quebrado^{9,23}.

Roshen e Saam¹⁰, em 1980, trataram teoricamente o problema de relaxação em ligas a temperaturas muito baixas, e pela primeira vez, levando em consideração as propriedades do problema Kondo através dos resultados de uma aproximação de líquido de Fermi, desenvolvida por Nozières¹⁵, para este problema.

O resultado central do trabalho Roshen e Saam (Eq. 9 da ref. 10) mostra que a taxa de relaxação, na presença de uma concentração x de impurezas, denotada por $(T_1(x)T)^{-1}$, recai na taxa de Korringa, quando $x \rightarrow 0$ (ou, de maneira equivalente, quando a distância média R entre o núcleo e a impureza torna-se infinita), este resultado concorda plenamente com o obtido nesta dissertação (cf. Eq. (5.11)). Entretanto, para x finito (ou R finito), nossos resultados discordam daqueles da Ref. 10; a razão para essa discordância é atribuída ao fato de Roshen e Saam terem usado diretamente os resultados de Nozières para o problema Kondo (que possui uma simetria esférica com relação ao sítio de impureza) num problema que possui uma simetria de dois centros com relação aos sítios do núcleo e da impureza, respectivamente. Para contornar essa dificuldade, desenvolvemos um formalismo mais rigoroso, que será mostrado no Capítulo II, envolvendo esses dois centros de simetria. No Capítulo III, as técnicas do grupo de renormalização, que foram desenvolvidas originalmente por Wilson⁴ para o problema Kondo, serão adaptadas ao problema de relaxação. Com essas técnicas, transformamos o Hamiltoniano original da forma contínua para a discretizada, esta última sendo utilizada no cálculo numérico da taxa de relaxação. No Capítulo IV desenvolveremos um método para obter os resultados do cálculo da taxa de relaxação no limite do contínuo. No Capítulo V aplicamos essas técnicas para o cálculo dessa taxa a uma situação relativamente simples ($T=0$) para qual derivamos também uma solução analítica. Como resultado dessa

solução, encontramos que $[T_1 T]^{-1} = [T_1 T]_K^{-1} [1 - (\sin^2 k_F^2 R / k_F^2 R^2)]^2$ onde $[T_1 T]_K^{-1}$ é a taxa de Korringa (que é uma constante) e R a distância entre impureza e núcleo. Para $R \rightarrow \infty$ vemos que a taxa de relaxação recai na taxa de Korringa, como se esperaria neste caso, uma vez que a impureza, estando fortemente acoplada aos elétrons de condução que estão num pequeno raio em torno dela, desacopla-se dos demais, não exercendo assim qualquer influência sobre um núcleo muito distante. Quando aproximamos essa impureza, indevidamente, do núcleo, vemos que $[T_1 T]^{-1}$ aproxima-se de zero, ou em outras palavras, $T_1 T \rightarrow \infty$. Ao contrário do caso anterior, o núcleo está agora dentro da região onde os elétrons estão fortemente acoplados à impureza, não podendo assim participarem do proceso, resultando por isso, um tempo de relaxação infinito.

No Capítulo V, consideramos também o caso de temperaturas finitas. Entretanto, por limitações de tempo nenhum resultado quantitativo é obtido, o que será deixado para trabalhos futuros. Isto encerra a parte introdutória desta dissertação; já no próximo Capítulo formularemos o problema de relaxação.

CAPÍTULO II

GENERALIZAÇÃO DO FORMALISMO DE ONDAS-S PARA DOIS CENTROS DE SIMETRIA

Neste capítulo, vamos introduzir o Hamiltoniano do modelo, que descreve o problema de relaxação de spins nucleares na presença de uma impureza magnética, onde impureza e núcleo estão imersos num metal (não magnético) de eletrons de condução não interagentes, separados por uma distância R . Em virtude das dificuldades que se antecipam - como no caso do problema Kondo - é necessário que esse Hamiltoniano seja escrito numa forma que possibilite a aplicação de técnicas do grupo de renormalização, desenvolvidas por Wilson (ver Capítulo III).

Essa forma do Hamiltoniano foi obtida para o problema Kondo, representando os estados eletrônicos de condução através de ondas-s, definidas em relação ao centro de simetria posicionado na impureza. É possível generalizarmos esse procedimento para o nosso caso, onde contamos com dois centros de simetria, definidos em relação aos sítios da impureza e do núcleo, respectivamente; isso será feito na seção 2.2. Antes, porém, passaremos a descrever o modelo que usaremos neste trabalho.

2.1 - O Modelo

Estamos interessados em calcular a contribuição de uma impureza magnética para o tempo de relaxação de spins nucleares, em ligas magnéticas diluídas, tendo como matriz um metal não magnético (por exemplo Cu:Fe). O modelo que vamos escolher para representar essa liga é o mais elementar possível, contendo apenas os elementos básicos indispensáveis, como veremos a seguir.

2.1.1 - Banda de Condução

Usaremos uma única banda de energia para representar os eletrons de condução, tendo esta uma largura 2D centrada no nível de Fermi. Consideramos, também, para esta banda uma relação de dispersão linear,

$$\epsilon_k = v_F k \quad (2.1)$$

onde escolheremos as unidades de maneira que $v_F=1$. As energias e momentos são medidos a partir do nível de Fermi ($\epsilon_F=0$).

Para descrever os eletrons nessa banda, vamos usar o Hamiltoniano

$$H_c = \sum_{\underline{k}\mu} \epsilon_k C_{\underline{k}\mu}^\dagger C_{\underline{k}\mu} \quad (2.2)$$

Nesta equação, $C_{\underline{k}\mu}$ é um operador de Fermi que aniquila um eletron num estado de onda plana com momento $\vec{k}$ e projeção de spin μ , verificando as relações usuais de anticomutação, por exemplo,

$$\{C_{\underline{k}\mu}, C_{\underline{k}'\mu'}^\dagger\} = \delta_{\underline{k}\underline{k}'} \delta_{\mu\mu'} \quad (2.3)$$

Na fig. 2.1, representamos esquematicamente essa banda de condução.

2.1.2 - Interação Eletrons de Condução-Impureza

O efeito de blindagem do potencial da impureza pelos eletrons de condução, num metal, resulta que somente aqueles eletrons que estiverem espacialmente próximos ao sítio da impureza é que se acoplarão a esta. Como primeira aproximação para se descrever esse acoplamento considera-se apenas uma interação localizada (isto é, descrita por uma constante de acoplamento J independente

do momento) entre a impureza - representada por uma variável de spin 1/2 - e os eletrons de condução em estados de onda-s em relação a um centro de simetria posicionado na impureza. Mais explicitamente, descreve-se esse acoplamento pelo Hamiltoniano de troca²⁴

$$H_{e-i} = -J \{ [\psi_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{R}_i) \psi_{\uparrow}(\vec{R}_i) - \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{R}_i) \psi_{\downarrow}(\vec{R}_i)] \tau_z + [\psi_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{R}_i) \psi_{\downarrow}(\vec{R}_i) \tau_{+} + h.c.] \} \quad (2.4)$$

onde

$$\psi_{\mu}(\vec{R}_i) = \sum_{\underline{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} c_{\underline{k}\mu} \quad (2.5)$$

é um operador que aniquila um eletron no estado de Wannier em torno do ponto $\vec{R}_i$ com projeção de spin μ . τ_z e $\tau_{\pm} = \tau_x \pm i\tau_y$ são matrizes de Pauli associadas com a variável de spin (1/2) da impureza.

2.1.3 - Interação Eletrons de Condução-Núcleo

Para o problema de relaxação, estamos somente interessados nas transições em que a componente-z do spin nuclear hospedeiro ($\vec{I}$) muda de M para $M \pm 1$. A interação envolvendo $\vec{I}$ resulta de um campo magnético produzido pelos eletrons de condução, no sítio do núcleo; dessa interação (hiperfina) usaremos apenas o termo de contato (ou interação de Fermi) que é a parte dominante⁽²⁷⁾ para metais que exibam forte caráter "s" (por exemplo, metais nobres) como estamos considerando neste trabalho; esse termo de contato vem da interação dos eletrons nos estados-s, definidos com relação a um centro de simetria posicionado no núcleo, com este. Explicitamente, esta interação pode ser escrita como

$$H_x = -A \left[\psi_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{R}_n) \psi_{\downarrow}(\vec{R}_n) I_- + \text{h.c.} \right] \quad (2.6)$$

onde

$$\psi_{\mu}(\vec{R}_n) = \sum_{\underline{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} c_{\underline{k}\mu} \quad (2.7)$$

é um operador que aniquila um elétron no estado de Wannier em torno do ponto $\vec{R}_n$ com projeção de spin μ . I_- é o operador abaixamento de spin nuclear. O parâmetro A é a constante de acoplamento hiperfino, suficientemente pequeno para que termos proporcionais a A^2 sejam desprezados neste trabalho. Em particular já foram desprezados termos do tipo $\psi_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{R}_n) \psi_{\uparrow}(\vec{R}_n) I_z$ na Eq. (2.6), os quais dão uma contribuição da ordem de A^2 para a taxa de transição.

Na fig. 2.2, representamos uma situação (que adotaremos daqui por diante) em que o núcleo e a impureza se encontram a uma distância R , um do outro, escolhendo o sistema de referência de maneira que a direção- z seja definida pelo segmento que liga os dois centros, com a origem situada no ponto médio deste segmento. Logo, $\vec{R}_i = -\vec{R}_n = \vec{R}/2 = (0, 0, R/2)$.

2.1.4 - Interação com Campo Magnético Externo

Tratando o problema de espalhamento de elétrons de condução por uma impureza magnética localizada, com uma interação descrita pela Eq. (2.4), verifica-se⁴ a formação de um estado singlete (elétron-impureza) no estado fundamental do sistema; referir-nos-emos à formação desse estado singlete como efeito Kondo. A energia desse estado fundamental, dada aproximadamente por $E_0 \sim k_B T_K$, onde T_K é a temperatura de Kondo, que depende da liga que estamos considerando (por exemplo; para Cu:Fe $T_K \sim 10K$) define uma escala de energia do problema (ver Capítulo III, para maio

FIG. 2.1 - Representação esquemática da banda de condução de largura $2D$ centrado no nível de Fermi ($\epsilon_F \equiv 0$). Consideramos para esta banda uma densidade de estados constante $\rho = 1/D$.

(Ver ref. 24]

FIG. 2.2 - Sistema de referência adotado neste trabalho, mostrando a impureza e o núcleo sobre o eixo- z , localizados simetricamente em relação à origem.

res detalhes).

A interação com um campo magnético externo H_O define uma outra escala de energia $E_H = \mu_B H_O$, onde μ_B é o magneton de Bohr. Comparando-se, então, essas duas escalas de energia (E_O e E_H), é possível entendermos, qualitativamente, os efeitos do campo magnético sobre o sistema eletrons-impureza.

Seja, por exemplo,

$$\mu_B H_O \gg k_B T_K \quad (2.8)$$

Neste caso, temos que a energia magnético é muito maior do que a energia de ligação do estado fundamental; assim sendo, o campo magnético quebra o estado singleto, polarizando a impureza. Nessa situação o campo magnético prevalece sobre o efeito Kondo.

Por outro lado, quando

$$\mu_B H_O \ll k_B T_K \quad (2.9)$$

acontece exatamente o oposto, isto é, a energia do estado fundamental sendo, neste caso, muito maior do que a energia magnética, o efeito Kondo é dominante.

Nesta dissertação, ficaremos restritos à análise do problema de relaxação nuclear em ligas magnéticas, apenas nos casos onde se verifica essa última situação, isto é, onde o efeito do campo magnético pode ser desconsiderado.

De passagem, observamos que a energia Zeeman nuclear pode ser desprezada. De fato, a energia do núcleo no campo magnético é dada por $\mu_N H_O$, onde μ_N é o magneton nuclear, cerca de três ordens de grandeza menor que μ_B ; para campos magnéticos tipicamente usados em laboratório ($H_O \sim 10^4$ G) essa energia, medida em graus Kelvin, é da ordem de $10^{-3} - 10^{-4}$ K. Assim, a condição

$$\mu_N H_O \ll k_B T \quad (2.10)$$

é quase sempre verificada para temperaturas obtidas em laboratório e, portanto, a energia magnética nuclear pode ser desprezada.

Como resultado dessas considerações, nosso modelo será representado pelo Hamiltoniano de Relaxação.

$$H_R = H_c + H_{e-i} + H_x \quad (2.11)$$

onde os termos do segundo membro são dados pelas Eqs. (2.2), (2.4) e (2.6), respectivamente.

2.2 - Base com simetria de dois centros

Nesta seção, transformaremos o Hamiltoniano da Eq. (2.11) para uma forma que permita a aplicação das técnicas do grupo de renormalização, que serão introduzidas no Capítulo III.

Para obtermos essa forma, levaremos em conta a simetria das interações descritas na seção 2.1. Seja, por exemplo, a interação dos eletrons com a impureza; como vimos, ela é descrita pelo operador $\psi_\mu(\vec{R}_i)$ e portanto, usando um conjunto de ondas esféricas (em torno da impureza) como estados de base para os eletrons de condução, a impureza se acopla apenas aos estados de ondas-s. Isso também acontece quando consideramos somente a interação dos eletrons com o núcleo. Consequentemente, estados com momentos angulares maiores do que zero podem ser ignorados, quando consideramos, isoladamente, a impureza ou o núcleo, tornando portanto, conveniente introduzirmos uma nova base que seja formada por dois conjuntos de operadores de onda-s - um para o centro de simetria posicionado na impureza e o outro, no núcleo - representando os estados de condução, em substituição aos operadores $C_{k\mu}$.

2.2.1 - Base esfericamente simétrica em relação à Impureza e ao Núcleo

Devido à simetria da nova base que vamos introduzir, usaremos a variável ϵ (que admitiremos ser uma função isotrópica do momento $\vec{k}$, definida no intervalo $-D < \epsilon < D$) para rotular seus operadores, cujos conjuntos serão denotados por $C_{\epsilon\mu}$ e $d_{\epsilon\mu}$, respectivamente. Assim sendo, definimos

$$C_{\epsilon\mu} = \frac{1}{\sqrt{\rho}} \sum_{\underline{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \delta(\epsilon - \epsilon_k) C_{\underline{k}\mu} \quad (2.12)$$

onde $\rho^{-1/2}$ foi introduzido por questão de normalização. $C_{\epsilon\mu}$ é um operador que aniquila um eletrón num estado de onda-s (em torno da impureza) com energia $\epsilon = \epsilon_k$ e spin μ e satisfaz às relações usuais de anticomutação, por exemplo,

$$\{C_{\epsilon\mu}, C_{\epsilon'\mu'}^\dagger\} = \delta(\epsilon - \epsilon') \delta_{\mu\mu'} \quad (2.13)$$

Definimos também

$$d_{\epsilon\mu} = \frac{1}{\sqrt{\rho}} \sum_{\underline{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} \delta(\epsilon - \epsilon_k) C_{\underline{k}\mu} \quad (2.14)$$

$(\rho)^{-1/2}$ sendo introduzido pela mesma razão. $d_{\epsilon\mu}$ é um operador que aniquila um eletrón num estado de onda-s (em torno do núcleo) com energia $\epsilon = \epsilon_k$ e spin μ e satisfaz às relações usuais de anticomutação, por exemplo,

$$\{d_{\epsilon\mu}, d_{\epsilon'\mu'}^\dagger\} = \delta(\epsilon - \epsilon') \delta_{\mu\mu'} \quad (2.15)$$

(As posições $\vec{R}_i$ e $\vec{R}_n$, da impureza e do núcleo, que aparecem nas Eqs. (2.12) e (2.14), respectivamente, são mostradas na fig. 2.2).

Na fig. 2.3, representamos a densidade de probabilidade

FIG. 2.3 - Densidade de probabilidade para os estados de onda-s relacionados com os operadores $C_{\varepsilon\mu}$ (em torno da impureza) e $d_{\varepsilon\mu}$ (em torno do núcleo). Esses operadores, definidos pelas Eqs. (2.12) e (2.14), constituem a base (não ortogonal) usada para escrever o Hamiltoniano de relaxação.

para os estados definidos através dos operadores $C_{\epsilon\mu}$ e $d_{\epsilon\mu}$. Em termos desses operadores, podemos mostrar facilmente que

$$\psi_{\mu}(\vec{R}_i) = \int_{-D}^{+D} d\epsilon \sqrt{\rho} C_{\epsilon\mu} \quad (2.16)$$

e

$$\psi_{\mu}(\vec{R}_n) = \int_{-D}^{+D} d\epsilon \sqrt{\rho} d_{\epsilon\mu} \quad (2.17)$$

2.2.2 - Base ortogonal

Os conjuntos de operadores $C_{\epsilon\mu}$ e $d_{\epsilon\mu}$, que acabamos de definir, não constituem uma base ortogonal, como podemos ver calculando o anticomutador

$$\{d_{\epsilon\mu}, C_{\epsilon'\mu'}^{\dagger}\} = \frac{\text{sen}kR}{kR} \delta(\epsilon-\epsilon') \delta_{\mu\mu'} \quad (2.18)$$

onde R é a distância entre a impureza e o núcleo.

Vamos, então, introduzir em substituição aos $d_{\epsilon\mu}$, os operadores $\bar{C}_{\epsilon\mu}$, ortogonais aos $C_{\epsilon\mu}$, através do processo de ortogonalização de Schmidt. Desta maneira, definimos

$$\bar{C}_{\epsilon\mu} = \alpha \left[d_{\epsilon\mu} - \frac{\{d_{\epsilon\mu}, C_{\epsilon'\mu'}^{\dagger}\}}{\{C_{\epsilon\mu}, C_{\epsilon'\mu'}^{\dagger}\}} C_{\epsilon\mu} \right] \quad (2.19)$$

onde a constante α é obtida impondo-se a normalização, isto é

$$\{\bar{C}_{\epsilon\mu}, \bar{C}_{\epsilon'\mu'}^{\dagger}\} = \delta(\epsilon-\epsilon') \delta_{\mu\mu'} \quad (2.20)$$

Vem então que

$$\bar{C}_{\epsilon\mu} = \frac{1}{U(k)} \left[d_{\epsilon\mu} - \left(\frac{\text{sen}kR}{kR} \right) C_{\epsilon\mu} \right] \quad (2.21)$$

onde

$$U(k) = \left[1 - (\sin^2 kR/k^2 R^2) \right]^{1/2} \quad (2.22)$$

Na fig. 2.4 representamos, esquematicamente, a densidade e probabilidade para os estados definidos através dos operadores $\bar{C}_{\epsilon\mu}$.

2.2.3 - Acoplamento com a Impureza e com o Núcleo

Da Eq. (2.21), obtemos facilmente $d_{\epsilon\mu}$ em função dos operadores (ortogonais) $C_{\epsilon\mu}$ e $\bar{C}_{\epsilon\mu}$. Com isto, podemos representar o operador $\psi_{\mu}(\vec{R}_n)$ (Eq. (2.17)), que descreve a interação eletrons - núcleo, nessa base ortogonal. (Notar que o operador $\psi_{\mu}(\vec{R}_i)$, que descreve a interação eletrons-impureza, só depende dos $C_{\epsilon\mu}$ e portanto já se encontra definido nessa base, cf. Eq. (2.16)). Assim sendo, das Eqs. (2.17) e (2.21) temos:

$$\begin{aligned} \psi_{\mu}(\vec{R}_n) = & \left[\left(\frac{\sin k_F R}{k_F R} \right) \int_{-D}^{+D} d\epsilon \sqrt{\rho} C_{\epsilon\mu} + \left(1 - \frac{\sin^2 k_F R}{k_F^2 R^2} \right)^{1/2} \right. \\ & \times \left. \int_{-D}^{+D} d\epsilon \sqrt{\rho} \bar{C}_{\epsilon\mu} \right] \end{aligned} \quad (2.23)$$

onde usamos $k = k_F$ (k_F é o momento no nível de Fermi).

Substituindo-se, agora, as Eqs. (2.16) e (2.23) nas Eqs. (2.4) e (2.6), podemos obter H_{e-i} e H_X em termos da base dos operadores $C_{\epsilon\mu}$ e $\bar{C}_{\epsilon\mu}$.

Entretanto, por razões que ficarão conhecidas no Capítulo III, é conveniente introduzirmos um operador normalizado, que denotaremos por $f_{o\mu}$, em substituição ao operador $\psi_{\mu}(\vec{R}_i)$. (Notar que $\{\psi_{\mu}(\vec{R}_i), \psi_{\mu}^{\dagger}(\vec{R}_i)\} = 2$). De (2.16), temos então

FIG. 2.4 - Densidade de probabilidade para os estados relacionados com os operadores ortogonais $C_{\epsilon\mu}$ e $\bar{C}_{\epsilon\mu}$, definidos pelas Eqs. (2.12) e (2.21) a partir daqueles indicados na figura 2.3, calculada para $k_F R=2$ e $R=20$ cm. Observa-se que o centro eficaz de simetria para os estados $\bar{C}_{\epsilon\mu}$ se afasta do núcleo à medida que $k_F R$ diminui; em particular, o centro eficaz torna-se infinitamente distante do núcleo para $k_F R \rightarrow 0$. Por outro lado, quando $k_F R \rightarrow \infty$ o centro eficaz coincide com o núcleo.

$$f_{o\mu} = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-D}^{+D} d\varepsilon \sqrt{\rho} C_{\varepsilon\mu} \quad (2.24)$$

Da mesma forma, vamos definir o operador normalizado

$$\bar{f}_{o\mu} = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-D}^{+D} d\varepsilon \sqrt{\rho} \bar{C}_{\varepsilon\mu} \quad (2.25)$$

Em termos dos operadores $f_{o\mu}$ e $\bar{f}_{o\mu}$, obtemos facilmente

$$\psi_{\mu}(\vec{R}_i) = \sqrt{2} f_{o\mu} \quad (2.26)$$

e (com a ajuda da Eq. (2.23))

$$\psi_{\mu}(\vec{R}_n) = \sqrt{2} \left\{ \left(\frac{\sin k_F R}{k_F R} \right) f_{o\mu} + \left(1 - \frac{\sin^2 k_F R}{k_F^2 R^2} \right)^{1/2} \bar{f}_{o\mu} \right\} \quad (2.27)$$

Voltemos, agora, à Eq. (2.11) para reescrevermos o Hamiltoniano de Relaxação na base ortogonal dos operadores $C_{\varepsilon\mu}$ e $\bar{C}_{\varepsilon\mu}$.²⁵ Usando a notação em que se subentende a soma sobre índices repetidos temos:

$$H_R = \int_{-D}^{+D} d\varepsilon \varepsilon \left(C_{\varepsilon\mu}^{\dagger} C_{\varepsilon\mu} + \bar{C}_{\varepsilon\mu}^{\dagger} \bar{C}_{\varepsilon\mu} \right) \\ - 2J \left[\left(f_{o\uparrow}^{\dagger} f_{o\uparrow} - f_{o\downarrow}^{\dagger} f_{o\downarrow} \right) \tau_z + \left(f_{o\uparrow}^{\dagger} f_{o\downarrow} \tau_{-} + h.c. \right) \right] + H_X \quad (2.28)$$

onde

$$H_X = -2A \left[\left(\frac{\sin^2 k_F R}{k_F^2 R^2} \right) f_{o\uparrow}^{\dagger} f_{o\downarrow} + \left(1 - \frac{\sin^2 k_F R}{k_F^2 R^2} \right) \bar{f}_{o\uparrow}^{\dagger} \bar{f}_{o\downarrow} \right. \\ \left. + \left(\frac{\sin k_F R}{k_F R} \right) \left(1 - \frac{\sin^2 k_F R}{k_F^2 R^2} \right)^{1/2} \left(f_{o\uparrow}^{\dagger} \bar{f}_{o\downarrow} + \bar{f}_{o\uparrow}^{\dagger} f_{o\downarrow} \right) \right] I_{-} + h.c. \quad (2.29)$$

Para concluirmos este capítulo, faremos alguns comentários sobre o Hamiltoniano obtido na Eq. (2.28). Em primeiro lugar,

observamos que apenas os estados (de condução) de ondas-s em relação ao núcleo e à impureza é que comparecem nessa equação; isto porque os estados com momentos angulares maiores do que zero estão desacoplados do núcleo e da impureza, sendo portanto desconsiderados.

Em segundo lugar, chamamos a atenção para o fato de que as interações dos eletrons de condução com a impureza e com o núcleo são descritas, exclusivamente, através dos operadores $f_{0\mu}$ e $\bar{f}_{0\mu}$. Isto está no espírito das técnicas de cálculo, que serão introduzidas no Capítulo III, e que consistem basicamente em tratar a interação entre eletrons de condução e a impureza e o núcleo, exatamente, bem como usar uma aproximação para a banda de condução, mas mantendo sua invariância por uma dilatação de escala.

CAPÍTULO III

TRANSFORMAÇÃO DO GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO

Neste capítulo, vamos introduzir a transformação do grupo de renormalização, que foi desenvolvida originalmente por Wilson⁴, para o tratamento do problema Kondo, e aplicá-la à determinação do efeito de uma impureza no tempo de relaxação de spins nucleares em metais. Essa transformação também já foi empregada, com bons resultados, na solução do modelo de Anderson⁵ e do problema de absorção de raio-X⁶.

Com essa transformação, objetiva-se tratar numericamente o Hamiltoniano do sistema e, portanto, algumas aproximações devem ser introduzidas para possibilitar a realização prática da mesma. Em particular, vamos escrever o Hamiltoniano numa forma onde podemos distinguir, separadamente, as várias escalas de energia e, em seguida, diagonalizá-lo, usando um processo iterativo que permita desprezar, de maneira controlada, as energias pequenas comparadas com a escala de energia de interesse no problema (isto é, a temperatura).

A obtenção do Hamiltoniano nessa forma difere, em geral, de um problema para o outro, constituindo-se uma tarefa muito difícil, que tem sido realizada somente em alguns casos. Nos problemas supra citados^{4,5,6}, a derivação decorre de uma transformação envolvendo três passos: (i) discretização da banda de condução; (ii) definição de uma base de estados apropriada; e (iii) truncamento da série infinita resultante da aplicação de (i) e (ii).

No caso do Hamiltoniano de Relaxação, que estamos considerando neste trabalho, a aplicação dessa técnica é imediata, devido à forma desse Hamiltoniano (Eq. (2.28)) resultante das manipulações realizadas no capítulo anterior. Entretanto, por ser

mais instrutivo, discutiremos os passos (i) e (ii) em conexão com o problema Kondo (seções 3.1 e 3.2) que, aliás, é um caso particular do nosso modelo, quando desprezamos H_x em (2-28); a generalização para o nosso problema será obtida nas seções 3.3 e 3.4. As demais seções serão dedicadas à obtenção e discussão da transformação do grupo de renormalização.

3.1 - Discretização da banda de condução

Vamos partir do Hamiltoniano de Kondo, na forma tratada por Wilson⁴

$$H_J = \int_{-D}^{+D} d\varepsilon \varepsilon C_{\varepsilon\mu}^{\dagger} C_{\varepsilon\mu} - 2J \left[\left(f_{0\uparrow}^{\dagger} f_{0\uparrow} - f_{0\downarrow}^{\dagger} f_{0\downarrow} \right) \tau_z + \left(f_{0\uparrow}^{\dagger} f_{0\downarrow} \tau_- + \text{h.c.} \right) \right] \quad (3.1)$$

onde $C_{\varepsilon\mu}$ é um operador que aniquila um elétron num estado de energia ε , em torno do sítio da impureza de $f_{0\mu}$, o operador normalizado definido na Eq. (2.19).

Quando o termo J , em (3.1), é tratado como uma perturbação, as grandezas físicas calculadas a partir deste Hamiltoniano, tais como resistividade, calor específico, tempo de relaxação, etc, relativos à impureza, divergem logarithmicamente a temperaturas muito baixas¹. Para fixar idéia, vamos calcular a correção na energia ε_k de um elétron devido ao seu acoplamento magnético com a impureza (J), em segunda ordem de perturbação (a correção em primeira ordem não apresenta comportamento singular e portanto, não consideramos aqui; para maiores detalhes, ver ref. 1).

$$\Delta\varepsilon_k^{(2)} \sim J^2 \int_0^D \frac{\rho d\varepsilon}{\varepsilon_k - \varepsilon} = \rho J^2 \ln \left| \frac{D}{\varepsilon_k} \right|, \quad (\varepsilon_k \ll D) \quad (3.2)$$

Como o eletrão de interesse estará dentro de um intervalo de energia $k_B T$ acima do nível de Fermi (isto é, $0 < \epsilon_k < k_B T$), temos de (3.2) que

$$\ln \left| \frac{D}{\epsilon_k} \right| \rightarrow \infty \quad \text{para } T \rightarrow 0$$

Essencialmente, este mesmo tipo de divergência é encontrado em todas as propriedades derivadas de H_J .

A causa dessa divergência, como observado por Wilson, é a presença de muitas escalas de energia acopladas, contribuindo igualmente para a integral (3.2). Por exemplo, dividindo-se a banda de condução em intervalos de energia de diferentes ordens de grandeza (ou escalas), como mostrado na fig. 3.1, e calculando a integral

$$\begin{aligned} \int_{\epsilon_K}^D \frac{d\epsilon}{\epsilon} &= \int_{\Lambda^{-1}D}^D \frac{d\epsilon}{\epsilon} + \int_{\Lambda^{-2}D}^{\Lambda^{-1}D} \frac{d\epsilon}{\epsilon} + \int_{\Lambda^{-3}D}^{\Lambda^{-2}D} \frac{d\epsilon}{\epsilon} + \\ &+ \dots + \int_{\epsilon_K}^{\Lambda^{-n}D} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \end{aligned}$$

(que dá essencialmente o mesmo resultado final de (3.2)), podemos notar que cada um dos termos do segundo membro contribui com $\ln \Lambda$; assim, se $\epsilon_K \rightarrow 0$, temos um número infinito desses termos e, portanto, a integral divergirá.

A discretização da banda de condução, tem como objetivo, desacoplar sistematicamente essas escalas de energia, de maneira que possam ser tratados convenientemente, de acordo com o grau de relevância de cada uma, no problema. (Ver seção 3.4).

Começamos, escolhendo um parâmetro $\Lambda (>1)$ em termos do qual dividimos o domínio ϵ $(-D, +D)$ numa sequência de intervalos

FIG. 3.1 - Discretização logarítmica da banda de condução como parte do formalismo do grupo de renormalização desenvolvida por Wilson para o problema Kondo. O parâmetro Λ pode, a princípio, ser qualquer número maior do que a unidade.

cujos comprimentos tendem a zero à medida que nos aproximamos da energia de Fermi ($\epsilon_F = 0$), conforme mostramos na fig. 3.1.

A próxima etapa é definir estados eletrônicos com energias distribuídas segundo esta escala logarítmica. Para isto, vamos construir um conjunto completo de funções ortonormais em todo o domínio, desenvolvendo séries de Fourier, independentes, em cada um desses intervalos. Tomemos como base para o desenvolvimento as funções

$$\psi_{m\ell}(\epsilon) = \begin{cases} \left[\Lambda^m / D(1 - \Lambda^{-1}) \right]^{1/2} \exp\{i\omega_m \ell \epsilon\}, & \text{se } \Lambda^{-(m+1)} < \epsilon < \Lambda^{-m} \\ 0, & \text{fora desse intervalo} \end{cases} \quad (3.3)$$

onde $m = (0, 1, 2, \dots)$ rotula os intervalos e ℓ , o índice harmônico de Fourier toma todos os valores inteiros desde $-\infty$ a $+\infty$. ω_m é a frequência fundamental de Fourier no m -ésimo intervalo, e portanto

$$\omega_m \equiv \frac{2\pi}{D[\Lambda^{-m} - \Lambda^{-(m+1)}]} = 2\pi\Lambda^m(1 - \Lambda^{-1})^{-1}/D \quad (3.4)$$

Os operadores $C_{\epsilon\mu}$ (que aniquilam elétrons com energia entre $-D$ e $+D$) podem agora ser expandidos nessa base

$$C_{\epsilon\mu} = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} \{a_{m\ell} \psi_{m\ell}(\epsilon) + b_{m\ell} \psi_{m\ell}(-\epsilon)\} \quad (3.5)$$

e, como resultado desta expansão, obtêm-se um conjunto completo de operadores de elétrons, $a_{m\ell\mu}$ e $b_{m\ell\mu}$ discretos e independentes, definidos como

$$a_{m\ell\mu} = \int_{-D}^{+D} d\epsilon \psi_{m\ell}^*(\epsilon) C_{\epsilon\mu} \quad (3.6)$$

e

$$b_{m\ell\mu} = \int_{-D}^{+D} d\varepsilon \psi_{m\ell}^*(-\varepsilon) C_{\varepsilon\mu} \quad (3.7)$$

satisfazendo as relações usuais de anticomutação, por exemplo,

$$\{a_{m\ell\mu}, a_{m'\ell'\mu'}^\dagger\} = \delta_{m,m'} \delta_{\ell,\ell'} \delta_{\mu,\mu'} \quad (3.8)$$

Por substituição direta de (3.5), podemos chegar facilmente aos seguintes resultados

$$\begin{aligned} \int_{-D}^{+D} d\varepsilon \varepsilon C_{\varepsilon\mu}^\dagger C_{\varepsilon\mu} = D \left\{ \left(\frac{1+\Lambda^{-1}}{2} \right) \sum_m \sum_\ell \Lambda^{-m} \left(a_{m\ell\mu}^\dagger a_{m\ell\mu} - b_{m\ell\mu}^\dagger b_{m\ell\mu} \right) \right. \\ \left. + \frac{(1-\Lambda^{-1})}{2\pi i} \sum_m \sum_{\ell \neq \ell'} \frac{\Lambda^{-m}}{(\ell' - \ell)} \left(a_{m\ell\mu}^\dagger a_{m\ell'\mu} - b_{m\ell\mu}^\dagger b_{m\ell'\mu} \right) \right. \\ \left. \times \exp \left[2\pi i (\ell' - \ell) / (1 - \Lambda^{-1}) \right] \right\} \quad (3.9) \end{aligned}$$

e

$$f_{0\mu} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-D}^{+D} d\varepsilon \sqrt{\rho} C_{\varepsilon\mu} = \frac{(1-\Lambda^{-1})^{1/2}}{\sqrt{2}} \sum_m \Lambda^{-m/2} (a_{m\mu} + b_{m\mu}) \quad (3.10)$$

onde introduzimos a notação $a_{m\mu} \equiv a_{m0\mu}$ e $b_{m\mu} \equiv b_{m0\mu}$. O fator $\sqrt{\rho D}$ no lado direito de (3.10), foi omitido porque $\rho = 1/D$.

Das Eqs. (3.10) e (3.1), concluimos que os operadores $a_{m\ell\mu}$ e $b_{m\ell\mu}$, com $\ell \neq 0$, não estão acoplados diretamente com a impureza, e da Eq. (3.9), que seu acoplamento com os demais estados de condução (correspondentes a $a_{m0\mu}$ e $b_{m0\mu}$), é proporcional a $(1-\Lambda^{-1})$ que se anula quando $\Lambda \rightarrow 1$. Neste limite, podemos ignorar esses operadores, pois estarão desacoplados do Hamiltoniano em questão. Na prática o custo de cálculos numéricos com $\Lambda \rightarrow 2$ são proibidos.

tivos; entretanto, uma boa aproximação do contínuo ($\Lambda=1$) tem sido obtida, por exemplo, para o problema Kondo⁴ com $\Lambda=3$, e para o problema de absorção de raio-X⁶ até mesmo com $\Lambda=9$.

Por isso, como uma aproximação, vamos desprezar os termos no Hamiltoniano que envolvam os operadores $a_{m\ell\mu}$ e $b_{m\ell\mu}$ para $\ell \neq 0$. Temos, então

$$H_J \approx \left(\frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} \right) \sum_{m=0}^{\infty} D\Lambda^{-m} \left(a_{m0}^{\dagger} a_{m0} - b_{m0}^{\dagger} b_{m0} \right) - 2J \left[\left(f_{0\uparrow}^{\dagger} f_{0\uparrow} - f_{0\downarrow}^{\dagger} f_{0\downarrow} \right) \tau_z + \left(f_{0\uparrow}^{\dagger} f_{0\downarrow} \tau_{-} + \text{h.c.} \right) \right] \quad (3.11)$$

com $f_{0\mu}$, definido na Eq. (3.10), satisfazendo à condição de normalização

$$\{f_{0\mu}, f_{0\mu'}^{\dagger}\} = \delta_{\mu, \mu'} \quad (3.12)$$

3.2 - Definição de uma nova base

Como vimos na seção anterior, a discretização logarítmica da banda de condução resultou na definição de uma base de operadores ($a_{m\mu}$ e $b_{m\mu}$) que foi usada para se obter o Hamiltoniano de Kondo numa forma discretizada. Como desejamos tratar numericamente o sistema eletrons-impureza para todas as ordens em seu acoplamento J , esta base se mostra inconveniente uma vez que a impureza se acopla a todos os estados de condução e, conseqüentemente o truncamento da série infinita no lado direito da Eq. (3.11) reflete-se diretamente nesse acoplamento. Para contornar esse problema, vamos definir uma nova base onde apenas um de seus operadores esteja acoplado à impureza; a Eq. (3.11), sugere uma base $\{f_{n\mu}\}$ com $f_{0\mu}$ (seu primeiro elemento) satisfazendo essa condição.

Entretanto, somente esta condição não define, unvocamente, a base $\{f_{n\mu}\}$. Por isto, vamos requerer, ainda, que ela possua as seguintes propriedades: (a) seus operadores sejam normalizados e ortogonais entre si, isto é, $\{f_n, f_n^\dagger\} = \delta_{n,n'} \delta_{\mu,\mu'}$; (b) quando escrito nesta base, o Hamiltoniano de Kondo (Eq. (3.11)) exiba, apenas, acoplamentos do tipo "vizinho próximos", ou seja, que $f_{n\mu}$ esteja acoplado somente com $f_{(n\pm 1)\mu}$. Estas condições, juntamente com a definição de $f_{o\mu}$ (Eq. (3.10)) são suficientes para gerarmos esta nova base. Na seção 7 da ref. 4, encontramos, em detalhes, o procedimento para esta transformação. Assim nos restringiremos, apenas, a mostrar os resultados obtidos para alguns operadores ($f_{o\mu}$ já foi mostrado na Eq. (3.10)).

$$f_{1\mu} = \frac{1}{\sqrt{2}} (1-\Lambda^{-3})^{1/2} \sum_{m=0}^{+\infty} \Lambda^{-3m/2} (a_{m\mu} - b_{m\mu}) \quad (3.13)$$

$$f_{2\mu} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\Lambda^{1/2} (1-\Lambda^{-5})^{1/2}}{(1-\Lambda^{-2})} \sum_{m=0}^{+\infty} \left[(1-\Lambda^{-3}) \Lambda^{-5m/2} - (1-\Lambda^{-1}) \Lambda^{-m/2} \right] \times (a_{m\mu} + b_{m\mu}) \quad (3.14)$$

Escrevendo o Hamiltoniano (3.11) nesta base, temos

$$\left(\frac{2}{1+\Lambda^{-1}} \right) H_J = \sum_{n=0}^{+\infty} \epsilon_n \left(f_{n\mu}^\dagger f_{(n+1)\mu} + \text{h.c.} \right) - \tilde{J} \left[\left(f_{o\uparrow}^\dagger f_{o\uparrow} - f_{o\downarrow}^\dagger f_{o\downarrow} \right) \tau_z + \left(f_{o\uparrow}^\dagger f_{o\downarrow} \tau_- + \text{h.c.} \right) \right] \quad (3.15)$$

onde os coeficientes ϵ_n são dados por

$$\epsilon_n = D\Lambda^{-n/2} \left[1-\Lambda^{-(n+1)} \right] \left[1-\Lambda^{-(2n+1)} \right]^{-1/2} \left[1-\Lambda^{-(2n+3)} \right]^{-1/2}, \quad (3.16)$$

$\tilde{J}$ sendo definido como

$$\tilde{J} = 4J/(1+\Lambda^{-1}) \quad (3.17)$$

Vale ressaltar que a Eq. (3.15) é uma transformação exata de (3.11). Para grandes valores de n , os ε_n se aproximam da forma

$$\varepsilon_n \approx D\Lambda^{-n/2} \quad (3.18)$$

A diminuição progressiva dos ε_n , à medida que n cresce, torna possível o truncamento da série resultante (Eq. (3.15)) como veremos na seção 3.4. Antes disso, porém, deduziremos o Hamiltoniano de Relaxação.

3.3 - Generalização para o Hamiltoniano de Relaxação

Até aqui, temos aplicado as técnicas do grupo de renormalização, para transformar o Hamiltoniano de Kondo da Eq. (3.1) para uma forma numericamente tratável (Eq. (3.15)). Nesta seção, aplicaremos o mesmo procedimento para o Hamiltoniano de Relaxação (Eq. (2.28)),

$$\begin{aligned} H_R = & \int_{-D}^{+D} d\varepsilon \varepsilon (C_{\varepsilon\mu}^\dagger C_{\varepsilon\mu} + \bar{C}_{\varepsilon\mu}^\dagger \bar{C}_{\varepsilon\mu}) - 2J \left[\left(f_{O\uparrow}^\dagger f_{O\uparrow} - f_{O\downarrow}^\dagger f_{O\downarrow} \right) \tau_z \right. \\ & \left. + \left(f_{O\uparrow}^\dagger f_{O\downarrow} \tau_- + h.c \right) \right] + H_X \end{aligned} \quad (3.19)$$

onde H_X (uma pequena perturbação) é dado por

$$\begin{aligned} H_X = & -2A \left\{ \left[\frac{\sin^2 k_F R}{k_F^2 R^2} \right] f_{O\uparrow}^\dagger f_{O\downarrow} + \left[1 - \frac{\sin^2 k_F R}{k_F^2 R^2} \right] \bar{f}_{O\uparrow}^\dagger \bar{f}_{O\downarrow} \right. \\ & \left. + \left[\frac{\sin k_F R}{k_F R} \right] \left[1 - \frac{\sin^2 k_F R}{k_F^2 R^2} \right]^{1/2} \left(f_{O\uparrow}^\dagger \bar{f}_{O\downarrow} + \bar{f}_{O\uparrow}^\dagger f_{O\downarrow} \right) \right\} I_- + h.c \end{aligned} \quad (3.20)$$

Os operadores que aparecem nestas equações já foram definidos no Capítulo II. Lembramos apenas que o conjunto $(C_{\epsilon\mu}, \bar{C}_{\epsilon\mu})$ foi obtido pela ortogonalização do conjunto $(C_{\epsilon\mu}, d_{\epsilon\mu})$, onde $C_{\epsilon\mu}$ e $d_{\epsilon\mu}$ são operadores de onda-s, em torno dos centros definidos pelos sítios da impureza e do núcleo, respectivamente, e correspondem a estados com energia ϵ .

Agora, vamos estabelecer um procedimento semelhante àquele descrito anteriormente para o problema Kondo. Naquele caso, partimos de um conjunto de operadores contínuos $(C_{\epsilon\mu})$ para os operadores discretos $(a_{m\mu}, b_{m\mu})$ através de um processo de discretização da banda de condução (seção 3.1) seguido por uma transformação para a base $\{f_{n\mu}\}$, sendo $f_{o\mu}$ o primeiro elemento (seção 3.2). No problema de relaxação temos dois desses conjuntos $(C_{\epsilon\mu})$ e $(\bar{C}_{\epsilon\mu})$ mutuamente ortogonais e, portanto, para cada um deles devemos repetir esse processo. Para os operadores $C_{\epsilon\mu}$ valem as equações já obtidas; para $\bar{C}_{\epsilon\mu}$, definimos os operadores $(\bar{a}_{m\mu}, \bar{b}_{m\mu})$ e posteriormente $\bar{f}_{n\mu}$ de maneira similar aos correspondentes de $C_{\epsilon\mu}$, com $\bar{f}_{o\mu}$ dado pela Eq. (2.25). Como essas transformações são unitárias, a ortogonalidade entre os operadores $f_{n\mu}$ e $\bar{f}_{n\mu}$ verifica-se trivialmente.

Desta dupla transformação resulta (ver Eq. (3.15))

$$\begin{aligned} \left(\frac{2}{1+\Lambda^{-1}} \right) H_R = & \sum_{n=0}^{+\infty} \epsilon_n \left[\left(f_{n\mu}^\dagger f_{(n+1)\mu} + \bar{f}_{n\mu}^\dagger \bar{f}_{(n+1)\mu} \right) + h.c. \right] \\ & - \tilde{J} \left[\left(f_{o\uparrow}^\dagger f_{o\uparrow} - f_{o\downarrow}^\dagger f_{o\downarrow} \right) \tau_z + \left(f_{o\uparrow}^\dagger f_{o\downarrow} \tau_- + h.c. \right) \right] + H_x \end{aligned} \quad (3.21)$$

sendo que ϵ_n e $\tilde{J}$ estão definidos nas Eqs. (3.16) e (3.17), respectivamente. O termo H_x é dado pela Eq. (3.20).

3.4 - Truncamento do Hamiltoniano discretizado

As transformações discutidas nas seções anteriores permitiram passar o Hamiltoniano de Relaxação da forma contínua (Eq. (3.19)) para a discretizada, resultando esta numa série infinita (Eq. (3.21)).

Como um primeiro passo, no sentido de tentar resolver numericamente o problema vamos procurar uma versão truncada desse Hamiltoniano que seja apropriada para descrever as propriedades do sistema, numa determinada situação.

Esse truncamento só é possível, em virtude da forma na qual resultou o Hamiltoniano discretizado (Eq. (3.21)) onde conseguimos isolar as escalas de energia de diferentes ordens de grandeza. Por exemplo, a escala de energia associada ao n -ésimo termo da soma é da ordem de ϵ_n ($\epsilon_n \approx D\Lambda^{-n/2}$, n grande) e decresce sucessivamente à medida que n aumenta, para qualquer valor de $\Lambda (>1)$ (cf. Eq. (3.18)). Assim, tomando-se os N primeiros termos da série, estaremos levando em conta escalas de energia desde $\sim D$ (a maior) até $\sim D\Lambda^{-N/2}$. Quando esta última é muito menor do que $k_B T$ (isto é, a escala de energia definida pela temperatura) a inclusão de mais termos no Hamiltoniano quase não altera o fator de Boltzmann para os estados do sistema e, portanto, esses termos podem ser desprezados. (Para maiores detalhes e justificativas deste procedimento, ver seção 9 da ref. 4). Com isto, podemos usar o Hamiltoniano da Eq. (3.23), numa forma truncada, dado por

$$\left(\frac{2}{1+\Lambda^{-1}}\right) H_R \approx \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_n \left[\left(f_{n\uparrow}^\dagger f_{(n+1)\uparrow} + \text{h.c.} \right) + \left(\bar{f}_{n\uparrow}^\dagger \bar{f}_{(n+1)\uparrow} + \text{h.c.} \right) \right] \\ - J \left[\left(f_{0\uparrow}^\dagger f_{0\uparrow} - f_{0\downarrow}^\dagger f_{0\downarrow} \right) \tau_z + \left(f_{0\uparrow}^\dagger f_{0\downarrow} \tau_- + \text{h.c.} \right) \right] + H_x \quad (3.22)$$

onde se escolhe N suficientemente grande para que

$$\Lambda^{1/2} \left(\frac{1+\Lambda^{-1}}{2} \right) \epsilon_N = \bar{\beta} k_B T \rightarrow \epsilon_N \ll k_B T \quad (3.23)$$

sendo $\bar{\beta}$ um número fixo, muito menor do que a unidade e ϵ_N dado pela Eq. (3.16), para $n=N$.

Convém ressaltar que o truncamento, assim obtido, não afeta diretamente as interações, nem da impureza, nem do núcleo, com os eletrons de condução, pois estes acoplamentos (eletrons de condução-impureza e eletrons de condução-núcleo) são descritos pelos operadores $f_{o\mu}$ e $\bar{f}_{o\mu}$. A exclusão desses operadores do processo de truncamento é, pois, a principal motivação que nos levou a definir as bases $\{f_{n\mu}\}$ e $\{\bar{f}_{n\mu}\}$, na seção 3.2.

3.5 - Diagonalização iterativa

O Hamiltoniano truncado, obtido na seção anterior, pode, em princípio, ser diagonalizado numericamente, pois possui um número finito de termos. Naquela equação, H_x é um termo efetivamente muito pequeno e, assim, será tratado em teoria de perturbação (como é permitido nesses casos) até primeira ordem (veja Capítulo IV). Nesta seção, estamos interessados apenas na diagonalização da parte não perturbada de H_R , que iremos denotar por H ($H_R = H + H_x$). Para esta diagonalização, usaremos o método numérico, introduzido por Wilson⁴, cujas idéias básicas discutiremos a seguir. (Uma motivação para o uso deste método, numa forma elementar, pode ser encontrada na ref. 26).

Em primeiro lugar, é conveniente reescalarmos o Hamiltoniano da Eq. (3.22), sem o termo H_x , por um fator $\Lambda^{(N-1)/2}$, para que a menor escala de energia que compareça em H , correspondente aos termos $(f_{(N-1)\mu}^\dagger f_{N\mu} + h.c)$ e $(\bar{f}_{(N-1)\mu}^\dagger \bar{f}_{N\mu} + h.c)$, seja da ordem da unidade, qualquer que seja N . O Hamiltoniano reescalado é, portanto, definido como

$$\begin{aligned}
H_N \equiv & \left(\frac{2}{1+\Lambda} \right) \Lambda^{(N-1)/2} H = \Lambda^{(N-1)/2} \left\{ \sum_{n=0}^{(N-1)} \epsilon_n \left(f_{n\mu}^\dagger f_{(n+1)\mu} + h.c \right) \right. \\
& - \tilde{J} \left[\left(f_{0\uparrow}^\dagger f_{0\uparrow} - f_{0\downarrow}^\dagger f_{0\downarrow} \right) \tau_z + \left(f_{0\uparrow}^\dagger f_{0\downarrow} \tau_- + h.c \right) \right. \\
& \left. \left. + \sum_{n=0}^{(N-1)} \epsilon_n \left(\bar{f}_{n\mu}^\dagger \bar{f}_{(n+1)\mu} + h.c \right) \right] \right\} \quad (3.24)
\end{aligned}$$

Após isto, usamos esta equação para definir uma sequência de Hamiltonianos $\{H_N\}$, da qual H_0 (H_N , para $N=0$) é o primeiro termo e contém, apenas, a maior escala de energia; os demais (H_1 , H_2 , etc) são obtidos, incluindo-se progressivamente outros termos da soma, que estão associados a escalas de energia cada vez menores (ver seção anterior). Com esta sequência, objetiva-se estabelecer um processo de diagonalização, consistindo em vários estágios (cada um envolvendo somente uma nova escala de energia) que se desenvolvem iterativamente. Em outras palavras, tendo definido a sequência $\{H_N\}$, diagonaliza-se inicialmente o termo H_0 , obtendo-se daí 32 autovalores e 32 autovetores. Do produto direto dos operadores $f_{1\mu}$ e $\bar{f}_{1\mu}$ (que não aparecem em H_0) com cada um dos auto-vetores de H_0 , construímos uma base, com 512 estados, que será usada para representar H_1 ; este, então, é diagonalizado, resultando um conjunto de 512 autovalores e 512 autovetores. Repete-se, agora, o mesmo procedimento para diagonalizar H_2 , H_3 , etc.

De cada iteração (que consiste em representar H_{N+1} numa base em que H_N é diagonal e diagonalizar H_{N+1}) resulta um número de autovetores e autovalores que é dezesseis vezes maior do que o da iteração anterior. Assim, após poucas iterações, o número de autovalores e autovetores a serem computados é muito grande, frustrando com isto, qualquer tentativa para determinar seus conjuntos completos. O que se faz, na prática, é selecionar um subconjunto de auto-estados pertencentes a autovalores abaixo de um

determinado limite de energia; estados com energias que excedam esse limite são desprezados, em cada iteração, pois estão associados com fatores de Boltzmann muito pequenos e por isso são inexpressivos para cálculos termodinâmicos. Para maiores detalhes desta aproximação, ver seção 8 da ref. 4.

3.6 - Análise dos pontos fixos

Quando realizamos várias iterações na sequência de Hamiltoniano $\{H_N\}$, como descritas na seção anterior, podemos, em última análise, avaliar o comportamento do sistema relativamente a mudanças de escalas de energia. Nesta seção, estamos particularmente interessados em analisar os casos em que o sistema se mostra invariante por uma dilatação da escala de energia, pelo fator Λ , dilatação essa que é consistente com a simetria da discretização original da banda de condução, como mostrada na fig. (3.1). Com este objetivo, vamos definir uma transformação T do grupo de renormalização que aplicada em H_N (N ímpar) resulte H_{N+2} ; essa transformação satisfaz à fórmula de recorrência

$$\begin{aligned} T[H_N] \equiv H_{N+2} = & \Lambda H_N + \Lambda^{(N+1)/2} \epsilon_N \left[\left(f_{N\mu}^\dagger f_{(N+1)\mu} + \text{h.c.} \right) \right. \\ & + \left. \left(\bar{f}_{N\mu}^\dagger \bar{f}_{(N+1)\mu} + \text{h.c.} \right) \right] + \Lambda^{(N+1)/2} \epsilon_{N+1} \left[\left(f_{(N+1)\mu}^\dagger f_{(N+2)\mu} + \text{h.c.} \right) \right. \\ & + \left. \left(\bar{f}_{(N+1)\mu}^\dagger \bar{f}_{(N+2)\mu} + \text{h.c.} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.25)$$

como podemos verificar facilmente da Eq. (3.24). (Podemos notar explicitamente, na Eq. (3.25), que as escalas de energia que compõem em H_N , são multiplicadas (isto é, dilatadas) pelo fator Λ , quando da aplicação de T .) Em seguida, vamos procurar por um H_N^* que seja invariante por essa transformação, ou seja, $T[H_N^*] = H_N^*$; na linguagem do grupo de renormalização, dizemos que H_N^* é

um ponto fixo de T . Os pontos fixos dessa transformação são importantes, como veremos, porque resultam de situações em que a escala de energia relativa à impureza é muito maior ou muito menor do que $k_B T$ (isto é, a escala de energia definida pela temperatura) fornecendo interpretações físicas simples aos resultados numéricos obtidos.

Com o propósito de simplificar a análise dos pontos fixos de T , devemos notar que H_N (Eq. (3-24)) pode ser decomposto em duas partes independentes (uma das quais envolvendo somente os operadores $\bar{f}_{n\mu}$ e a outra $f_{n\mu}$) que identificaremos por $\bar{H}_O^N$ e H_J^N , respectivamente ($H_N = \bar{H}_O^N + H_J^N$), sendo que

$$\bar{H}_O^N = \Lambda^{(N-1)/2} \left\{ \sum_{n=0}^{(N-1)} \epsilon_n \left(\bar{f}_{n\mu}^\dagger \bar{f}_{(n+1)\mu} + \text{h.c.} \right) \right\} \quad (3.26)$$

e

$$H_J^N = \Lambda^{(N-1)/2} \left\{ \sum_{n=0}^{(N-1)} \epsilon_n \left(f_{n\mu}^\dagger f_{(n+1)\mu} + \text{h.c.} \right) - \tilde{J} \left[\left(f_{O\uparrow}^\dagger f_{O\uparrow} - f_{O\downarrow}^\dagger f_{O\downarrow} \right) \tau_z + \left(f_{O\uparrow}^\dagger f_{O\downarrow} \tau_- + \text{h.c.} \right) \right] \right\} \quad (3.27)$$

Levando em conta que T é uma transformação linear, podemos reescrever (3.25) na forma

$$T[H_N] \equiv T[\bar{H}_O^N + H_J^N] = T[\bar{H}_O^N] + T[H_J^N] \quad (3.28)$$

Disto concluímos que, se $T[\bar{H}_O^N]$ e $T[H_J^N]$ tiveram pontos fixos, os conjuntos destes serão os pontos fixos de $T[H_N]$. Assim, vamos inicialmente pesquisar os pontos fixos de $T[\bar{H}_O^N]$ e $T[H_J^N]$ e em seguida estabelecer os pontos fixos de $T[H_N]$.

3.6.1 - Ponto fixo de $T \begin{bmatrix} \bar{H}_0^N \end{bmatrix}$

Ponto fixo de eletrons livres. O Hamiltoniano $\bar{H}_0^N$ (para N grande) (Eq.(3.26)) é ponto fixo de T, como veremos, a seguir, analisando a estrutura de seus autovalores. Nessa equação, vemos que $\bar{H}_0^N$ é uma forma quadrática nos operadores $\bar{f}_{n\mu}$ e $\bar{f}_{n\mu}^\dagger$ e, portanto, pode ser escrito na forma matricial,

$$\bar{H}_0^N = \bar{f}_\nu^\dagger \mathcal{H}_0^N \bar{f}_\nu \quad (3.29)$$

onde $\bar{f}$ é o vetor

$$\bar{f}_\nu^\dagger = \left(\bar{f}_{0\mu}^\dagger, \bar{f}_{1\mu}^\dagger, \bar{f}_{2\mu}^\dagger, \dots, \bar{f}_{N\mu}^\dagger \right) \quad (3.30)$$

e $\mathcal{H}_0^N$ é uma matriz de dimensão (N+1), cujos únicos elementos não nulos são dados por

$$\left[\mathcal{H}_0^N \right]_{n,n+1} = \left[\mathcal{H}_0^N \right]_{n+1,n} = \Lambda^{(N-1)/2} \epsilon_n \quad (3.31)$$

Sendo uma matriz simétrica real, $\mathcal{H}_0^N$ pode ser diagonalizada pela transformação de similaridade $\tilde{M} \mathcal{H}_0^N M$, onde M é uma matriz ortogonal ($\tilde{M}M=1$) cujas colunas são formadas pelos autovetores de $\mathcal{H}_0^N$. Consequentemente, quando escrito na base dos operadores $g=\tilde{M}f$, $\bar{H}_0^N$ tem a forma diagonal

$$\bar{H}_0^N = \sum_{\ell=1}^{(N+1)} \epsilon_\ell \bar{g}_{\ell\mu}^\dagger \bar{g}_{\ell\mu} \quad (3.32)$$

onde os ϵ_ℓ são os autovalores de $\mathcal{H}_0^N$, e $\bar{g}_{\ell\mu}$ é um operador de Fermi que aniquila um eletrón no auto-estado de $\bar{H}_0^N$ associado com o autovalor ϵ_ℓ .

Da diagonalização numérica de $\bar{H}_0^N$ encontra-se que (N+1)/2 de seus autovalores são positivos; esses autovalores serão denominados por $\bar{\eta}_j$ [$j=1,2,3,\dots,(N+1)/2$] ordenados de tal maneira que

$\bar{\eta}_1 < \bar{\eta}_2 < \dots < \bar{\eta}_{(N+1)/2}$. Os restantes $(N+1)/2$ autovalores são negativos e respectivamente iguais a $-\bar{\eta}_j$. Que os auto-valores de $\bar{H}_O^N$ são simétricos dois a dois também pode ser mostrado diretamente da Eq. (3.26), fazendo-se a substituição $\bar{f}_{n\mu} \rightarrow \bar{\phi}_{n\mu} = (-1)^n \bar{f}_{n\mu}$. (Nota-se que os operadores $\bar{\phi}_{n\mu}$ possuem as mesmas relações de anticomutação dos $\bar{f}_{n\mu}$). Quando escrito na base $\bar{\phi}_{n\mu}$, $\bar{H}_O^N \rightarrow -\bar{H}_O^N$, o que assegura que, se $\bar{\eta}_j$ é um auto-valor de $\bar{H}_O^N$, $-\bar{\eta}_j$ também o é. Os resultados numéricos mostram, ainda, que os autovalores $\bar{\eta}_j$ de $\bar{H}_N^O$ aproximam-se rapidamente (à medida que N cresce) de um conjunto limite de valores $\bar{\eta}_j^*$ que se comportam como $\bar{\eta}_j^* = \Lambda^{j-1}$ para $j \gg 1$. Consideremos, por exemplo, os valores de $\bar{\eta}_j^*$ para $\Lambda = 2,5$; $3,0$ e $9,0$. Temos, então, os seguintes resultados:

$$\text{Para } \Lambda = 2,5; \bar{\eta}_j^*: 0,74686 ; 2,49321 ; 6,24999 ; \\ (2,5)^3; \dots; (2,5)^{j-1}; \dots, \quad (3.33)$$

$$\text{Para } \Lambda = 3,0; \bar{\eta}_j^*: 0,80005 ; 2,99749 ; (3)^2; \\ (3)^3; \dots; (3)^{j-1}; \dots \quad (3.34)$$

e

$$\text{Para } \Lambda = 9,0; \bar{\eta}_j^*: 0,94216 ; 9,00000 ; \\ (9)^2; \dots; (9)^{j-1}; \dots \quad (3.35)$$

exatos até cinco casas decimais. Nota-se, por exemplo, que os $\bar{\eta}_j$ de $\bar{H}_O^N$ para $\Lambda = 3,0$ e $N \geq 5$ já são indistinguíveis dos correspondentes $\bar{\eta}_j^*$ (Eq. (3.34)) até aquela ordem. Para valores de $\Lambda > 3$, observa-se uma convergência ainda mais rápida.

Dessas observações, podemos então concluir que $\bar{H}_O^N$ (para N grande) é um ponto fixo de T , no sentido de que seus mais baixos autovalores ($j \ll (N+1)/2$) não mudam com a aplicação da transformação T , isto é, os mais baixos autovalores de $\bar{H}_O^{N+2}$ são também os autovalores de $\bar{H}_O^N$. Para referências futuras, iremos denominar $\bar{H}_O^N$ como ponto fixo de eletrons livres.

Passemos, agora, a considerar os estados de muitos corpos que podem ser construídos a partir dos níveis de energia de

$\bar{H}_O^N$. O estado fundamental, por exemplo, é obtido preenchendo-se todos os níveis de energia negativa, $-\bar{\eta}_j$, com dois elétrons cada; os níveis de energia positiva estão todos vazios, neste estado. Os estados excitados correspondem à transição de um elétron de um nível ocupado $-\bar{\eta}_j$ para um nível vazio $\bar{\eta}_j$; todas essas transições têm energias positivas, como pode ser mostrado facilmente. A construção desses estados torna-se bastante simplificada, especificando-se apenas os elétrons envolvidos nessas transições. Para isto, vamos definir um operador de Fermi $\bar{g}_{j\mu}$ que aniquila um elétron no auto-estado de $\bar{H}_O^N$ associado com $\bar{\eta}_j$. Da mesma maneira, para cada autovalor negativo, definimos um operador $\bar{h}_{j\mu} = \bar{g}_{j\mu}^\dagger$ que cria um elétron (isto é, aniquila um buraco) no auto-estado associado com $-\bar{\eta}_j$. Medindo as energias a partir do estado fundamental (que corresponde ao estado "vácuo" nesta representação) podemos reescrever a Eq. (3.36) como

$$\bar{H}_O^N = \sum_{j=1}^{(N+1)/2} \bar{\eta}_j (\bar{g}_{j\mu}^\dagger \bar{g}_{j\mu} + \bar{h}_{j\mu}^\dagger \bar{h}_{j\mu}) \quad (3.36)$$

que envolve, apenas, autovalores positivos. Mais informações sobre a diagonalização numérica de $\bar{H}_O^N$ são encontradas na Tabela I.

3.6.2 - Pontos fixos de $T \left[\bar{H}_J^N \right]$

Vamos, agora, analisar a estrutura de auto-valores de $\bar{H}_J^N$; este Hamiltoniano é o mesmo que foi tratado na Ref. 4. Como veremos, a transformação T tem dois pontos fixos, correspondentes a $\tilde{J} = 0$ e $\tilde{J} = -\infty$.

Ponto fixo de impureza livre. Tomando-se $\tilde{J} = 0$ em (3.27), o Hamiltoniano resultante, que denotaremos por $\bar{H}_{IL}^N$, é exatamente o Hamiltoniano de elétrons (de condução) livres ($\bar{H}_O^N$) mais uma impureza livre, que tem dois estados de spin, dependendo da proje-

ção $S_z = \pm 1/2$. Pelo que vimos anteriormente, H_O^N é justamente $\bar{H}_O^N$, exceto pela substituição $f_{n\mu} \rightarrow \bar{f}_{n\mu}$, valendo, portanto, todas as equações já obtidas. Logo, para N grande, H_O^N é um ponto fixo de T , com os autovalores η_j^* , comportando-se como Λ^{j-1} (para $j \gg 1$). Os resultados para η_j^* com $\Lambda = 2, 5; 3$ e 9 são os mesmos dados nas Eqs. (3.33), (3.34) e (3.35), respectivamente. Consequentemente, H_{IL}^N é também um ponto fixo de T , sendo que seus auto-estados (duplamente degenerados) são construídos a partir dos estados de muitos eletrons de H_O^N , fazendo-se corresponder a cada um deles, um estado de spin da impureza. H_{IL}^N será referido como ponto fixo de impureza livre.

Ponto fixo de impureza congelada. Consideremos, agora, o caso $\tilde{J} = -\infty$. No sentido de diagonalizar (3.27) iremos tratar, perturbativamente, o termo $H' = \epsilon_O (f_{O\mu}^\dagger f_{1\mu} + h.c.)$, que é muito pequeno comparado com $H_O = -\tilde{J} [(f_{O\uparrow}^\dagger f_{O\uparrow} - f_{O\downarrow}^\dagger f_{O\downarrow}) \tau_z + (f_{O\uparrow}^\dagger f_{O\downarrow} \tau_- + h.c.)]$. Temos então o Hamiltoniano

$$H_{IC}^N = \Lambda^{(N-1)/2} \left[H_O + \sum_{n=1}^{(N+1)} \epsilon_n (f_{n\mu}^\dagger f_{(n+1)\mu} + h.c.) \right] \quad (3.37)$$

que pode ser decomposto em duas partes independentes (notar que H_O só depende dos operadores $f_{O\mu}$ e τ) e, assim, será diagonalizado, separadamente, nos respectivos sub-espacos.

O termo H_O é facilmente diagonalizado, usando-se uma base construída a partir das auto-funções das projeções-z do spin associado ao operador f_O e da impureza, ou seja, $|\tau_z\rangle$, $f_{O\uparrow}^\dagger |\tau_z\rangle$, $f_{O\downarrow}^\dagger |\tau_z\rangle$ e $f_{O\uparrow}^\dagger f_{O\downarrow}^\dagger |\tau_z\rangle$ onde omitimos a notação do vácuo e $|\tau_z\rangle = |\uparrow\rangle$ ou $|\downarrow\rangle$. Os auto-estados de H_O contêm zero, um ou dois eletrons, dependendo da ocupação do nível f_O ($n_O = f_{O\mu}^\dagger f_{O\mu}$). Para $n_O = 0$ ou 2 o spin associado ao operador f_O é $\vec{S} = 0$ e os auto-estados correspondem ao auto-valor $E = 0$ (quadruplamente degenerado, devido aos dois estados de spin da impureza); para $n_O = 1$, $\vec{S} = 1/2$ que, juntamente

com o spin da impureza, dá origem aos estados singlete e tripleto com auto-valores $E_s = 3\tilde{J}$ e $E_t = -\tilde{J}$, respectivamente. Como estamos considerando $\tilde{J} < 0$, vê-se que o estado fundamental de H_0 é o estado singlete. Todos os estados excitados (isto é, tripleto, $n_0 = 0$ e $n_0 = 2$) têm energia infinita ($\tilde{J} = -\infty$), em relação ao estado fundamental e, portanto, fator de Boltzmann nulo, podendo então, ser desprezados, reduzindo-se H_0 , apenas ao estado fundamental. Como a perturbação H' só conecta este estado com os estados excitados de H_0 pode, então, ser ignorada. Assim, medindo-se as energias em relação a E_s , a Eq. (3.37) pode ser substituída por um Hamiltoniano efetivo, dado por:

$$H_{IC}^N = \Lambda^{(N-1)/2} \sum_{n=1}^{(N-1)} \epsilon_n (f_{n\mu}^\dagger f_{(n+1)\mu} + \text{h.c.}) \quad (3.38)$$

Dessa equação, notamos que H_{IC}^N é um Hamiltoniano de elétrons (de condução) livres; exceto pela exclusão do estado de condução f_0 (que está fortemente ligado à impureza, na formação do estado singlete) tem a mesma forma quadrática já tratada anteriormente (Eq. (3.29), para $N \rightarrow N-1$). Quando se diagonaliza numericamente, encontra-se que um de seus auto-valores é sempre zero e os demais, simétricos, se aproximam rapidamente, à medida que N cresce, de um conjunto limite de valores $\pm \hat{\eta}_j^*$ que se comportam como $\hat{\eta}_j^* = \Lambda^{j-1/2}$ para $j \gg 1$. Sejam, por exemplo, os valores de $\hat{\eta}_j^*$ para $\Lambda = 2,5$; $3,0$ e $9,0$. Temos então

$$\begin{aligned} \text{Para } \Lambda = 2,5; \hat{\eta}_j^*: & 1,52048 ; 3,95255 ; 9,88212 ; \\ & (2,5)^{7/2}; (2,5)^{9/2}; \dots ; (2,5)^{j-1/2} \dots; \end{aligned} \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned} \text{para } \Lambda = 3,0; \hat{\eta}_j^*: & 1,69575; 5,19610; 3^{5/2}; \\ & 3^{7/2}; \dots; 3^{j-1/2} \end{aligned} \quad (3.40)$$

$$\begin{aligned} \text{para } \Lambda = 9,0; \hat{\eta}_j^*: & 2,99792; 27,00000; 9^{5/2}; \\ & 9^{7/2}; \dots; 9^{j-1/2} \end{aligned} \quad (3.41)$$

exatos até cinco casas decimais. Assim, para N grande, H_{IC}^N é um ponto fixo de T , que denominaremos de ponto fixo de impureza congelada. (Ver Tabela I).

Os resultados numéricos para J finito, mas pequeno, mostram que o ponto fixo de impureza livre é uma boa aproximação para o Hamiltoniano (3.27) para N pequeno, isto é, $k_B T \approx D$ (ver Eq. (3.23)) enquanto que o ponto fixo de impureza congelada dá uma boa aproximação para N grande, que corresponde a $k_B T \ll D$. Entre esses dois limites, existe uma região de crossover onde os níveis de energia perdem completamente sua semelhança com os pontos fixos; essa região é caracterizada por uma temperatura T_K , conhecida como temperatura de Kondo, que depende do valor de J . As duas regiões limites são conceitualmente muito simples, como podemos ver, comparando as escalas de energia (ou de tempo) existentes no problema. Dada a temperatura T , associamos uma escala de tempo $\tau_T = h/k_B T$ que define o tempo de coerência do sistema, isto é, um tempo característico no qual se realiza uma determinada medida. Para J finito, existe ainda uma escala de tempo associada com o tempo de vida da impureza num estado de spin (por exemplo, $\tau_z = 1/2$), finito por causa de seu acoplamento magnético com os elétrons de condução. Para $k_B T \approx D$, podemos estimar esse tempo, usando a regra de ouro de Fermi, como $\tau_J \sim h/(\rho^2 J^2 k_B T)$; uma análise mais cuidadosa mostra que⁽¹⁾

$$\tau_J \sim h/\rho^2 J^2 k_B T \left[1 + 4\rho |J| \ln(D/k_B T) \right]^{-1}.$$

Uma vez que $|\rho J| \ll 1$, temos $\tau_J \gg \tau_T$. Assim, qualquer medida relativa à impureza, feita nesta temperatura, mostrará que ela se encontra num determinado estado de spin, comportando-se como uma entidade magnética, o que caracteriza um spin livre. Por outro lado, à medida que a temperatura diminui, τ_T aumenta mais rapidamente do que τ_J , devido a presença do fator $[1 + 4\rho |J| \ln(D/k_B T)]^{-1}$, multi

TABELA I

Informações sobre a Diagonalização numérica de $\bar{H}_O^N$

$$\bar{H}_O^N = \sum_{j=1}^{(N+1)/2} \bar{\eta}_j (\bar{g}_{j\mu}^+ \bar{g}_{j\mu} + \bar{h}_{j\mu}^+ \bar{h}_{j\mu})$$

$$\bar{f}_{O\mu} = \Lambda^{-(N-1)/4} \sum_{j=1}^{(N+1)/2} \alpha_{Oj} (\bar{g}_{j\mu} + \bar{h}_{j\mu}^+)$$

$$f_{1\mu} = \Lambda^{-3(N-1)/4} \sum_{j=1}^{(N+1)/2} \alpha_{1j} (\bar{g}_{j\mu} + \bar{h}_{j\mu}^+)$$

Para N grande e $j \gg 1$, temos

$$\eta_j = \Lambda^{j-1}$$

$$\alpha_{Oj} = \alpha_O \Lambda^{(j-1)/2}$$

$$\alpha_O = \left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2} \right)^{1/2}$$

$$\alpha_{1j} = \alpha_1 \Lambda^{3(j-1)/2}$$

$$\alpha_1 = \left(\frac{1-\Lambda^{-3}}{2} \right)^{1/2}$$

plicando este último, que agora passa a contribuir significativamente; eventualmente, para temperaturas suficientemente pequenas obtém-se $\tau_J \ll \tau_T$. Logo, uma medida realizada neste regime de temperatura, mostrará a impureza, ora no estado de spin $S_z = 1/2$, ora no estado $S_z = -1/2$, tendo assim, um comportamento característico de uma impureza não magnética, isto é, $S_z = 0$.

3.6.3 - Pontos fixos de $T[H_N]$

Os resultados das sub-seções anteriores, permitem agora estabelecer os pontos fixos da transformação $T[H_N]$. Como vimos anteriormente, nesta seção, esses pontos fixos resultam da união dos pontos fixos de $T[\bar{H}_O^N]$ e de $T[H_J^N]$. Devido $\bar{H}_O^N$ (ponto fixo de elétrons livres) ser um ponto fixo estável, isto é, não mudar com N , vamos caracterizar os pontos fixos de $T[H_N]$, usando a mesma denominação daqueles de $T[H_J^N]$. Assim, iremos nos referir aos pontos fixos de $T[H_N]$ como ponto fixo de impureza livre ou ponto fixo de impureza congelada, dependendo da situação em que nos encontramos (ver sub-seção 3.6.2).

Nesta dissertação, entretanto, estamos muito mais interessados em desenvolver um formalismo do que propriamente obter resultados. Por isso, nos capítulos seguintes, vamos estudar apenas H_N no ponto fixo de impureza congelada (isto é, $T=0$) e considerar somente pequenos desvios desse limite que corresponde a um regime de temperatura $T \ll T_K$, onde T_K é a temperatura de Kondo.

CAPÍTULO IV

CÁLCULO DO TEMPO DE RELAXAÇÃO

Neste capítulo, mostraremos como utilizar o formalismo desenvolvido no Capítulo III para o cálculo do tempo de relaxação (T_1) de spins nucleares em ligas magnéticas diluídas; esse cálculo será feito com a ajuda da regra de ouro de Fermi. Entretanto, como consequência da discretização logarítmica da banda de condução na seção 3.1, por meio de um fator Λ , será necessário definir um processo limite que convirja rapidamente para o limite do contínuo ($\Lambda \rightarrow 1$). Um processo direto seria utilizar valores de $\Lambda \rightarrow 1$; isto porém, não pode ser realizado na prática devido aos altos custos de cálculos. Assim, empregaremos um método alternativo que consiste na convolução dos resultados obtidos para um Λ qualquer (maior do que a unidade) com uma função apropriada; isto será feito na seção 4.2. Antes, introduziremos uma expressão perturbativa para o cálculo do tempo de relaxação.

4.1 - Expressão perturbativa para o cálculo do tempo de relaxação

Usaremos a regra de ouro de Fermi, para o cálculo de T_1 , que é dado por²⁷

$$\frac{1}{T_1} = \frac{4\pi}{h} \sum_{I,F} P_I |\langle I | H_X | F \rangle|^2 \delta(E_I - E_F) \quad (4.1)$$

Nesta equação, $P_I = e^{-\beta E_I} / \sum_I e^{-\beta E_I}$ é o peso estatístico para o estado inicial de muitos elétrons com energia E_I ; E_F é a energia do estado eletrônico final. (Devemos lembrar que neste trabalho estamos desprezando as energias Zeeman, de acordo com o que foi discutido no Capítulo II). O estado inicial $|I\rangle$ é o produto dire-

to dos estados de spin nuclear - que representaremos por uma variável de spin $1/2$ - com os estados de muitos eletrons, correspondentes a uma configuração inicial do sistema; o estado final $|F\rangle$ é também um produto direto desses estados, satisfazendo rigorosamente a conservação de energia expressa através da função delta no lado direito da Eq. (4.1). H_x é uma pequena perturbação dada pela Eq. (3.20).

Em virtude de havermos escalado o Hamiltoniano não perturbado por um fator $2\Lambda^{(N-1)/2}/(1+\Lambda^{-1})$ na seção 3.5 (ver Eq.(3.24)) convém procedermos, aqui, da mesma maneira em relação a H_x e às variáveis de energia do lado direito da Eq. (4.1). Desta maneira, vamos definir

$$H_x^N = \left(\frac{2}{1+\Lambda^{-1}} \right) \Lambda^{(N-1)/2} H_x \quad , \quad (4.2)$$

$$E_{IN} = \left(\frac{2}{1+\Lambda^{-1}} \right) \Lambda^{(N-1)/2} E_I \quad (4.3)$$

e

$$E_{FN} = \left(\frac{2}{1+\Lambda^{-1}} \right) \Lambda^{(N-1)/2} E_F \quad (4.4)$$

Com essas definições, a Eq. (4.1) transforma-se em

$$\frac{1}{T_1} = \frac{4\pi}{hD} \left(\frac{1+\Lambda^{-1}}{2} \right) \Lambda^{-(N-1)/2} \frac{\sum_{IF} e^{-\bar{\beta}_N E_{IN}/D} |\langle I | H_x^N | F \rangle|^2 \delta[(E_{IN} - E_{FN})/D]}{\sum_I e^{-\bar{\beta}_N E_{IN}/D}} \quad (4.5)$$

onde escrevemos

$$\bar{\beta}_N = \left(\frac{1+\Lambda^{-1}}{2} \right) \Lambda^{-(N-1)/2} D/k_B T \quad . \quad (4.6)$$

Comparando-se, agora, a Eq. (4.6) com a Eq. (3.23) concluímos que

$$\bar{\beta}_N \ll 1 \quad (4.7)$$

Na prática, valores de $\bar{\beta}_N$ muito menores do que a unidade são proibitivos, pois implicam em conhecermos estados de H_N com energias (pelo menos) da ordem de $1/\bar{\beta}_N$, ou seja, muito maiores do que a unidade; como observamos na seção 3.5, esses estados são desconsiderados nos cálculos, por questão de custos computacionais. Entretanto, bons resultados têm sido obtidos^{4,5} escolhendo-se $\bar{\beta}_N = \bar{\beta}$, onde $\bar{\beta}$ é um número fixo, pouco menor do que a unidade. Neste trabalho, em particular, mostraremos que os resultados obtidos com valores de $\bar{\beta}$ no intervalo 0,10 a 1,00 convergem, o que de certo modo justifica a validade deste procedimento (ver Capítulo V). Assim sendo, podemos reescrever a Eq. (4.5) na forma:

$$\frac{1}{T_1} = \frac{4\pi}{h} \rho^2 \bar{\beta} k_B T \frac{\sum_{I,F} e^{-\bar{\beta} E_{IN}/D} |\langle I | H_X | F \rangle|^2 \delta[(E_{IN} - E_{FN})/D]}{\sum_I e^{-\bar{\beta} E_{IN}/D}} \quad (4.8)$$

onde usamos $\rho = 1/D$.

Quando calculamos $1/T_1 T$, através da Eq. (4.8), o resultado que obtemos é ou infinito ou zero, dependendo se as energias (discretas) E_{IN} do estado inicial e E_{FN} do estado final são iguais ou diferentes, respectivamente. Esses resultados, porém, não têm significado físico, sendo apenas reflexos da discretização da banda de condução, onde aproximamos o contínuo de energias por uma série discreta de níveis distanciados, um do outro, de $\ln \Lambda$. Assim, para obtermos corretamente os resultados, usando o Hamiltoniano discretizado, devemos trabalhar no limite do contínuo, isto é, $\Lambda \rightarrow 1$. Como já observamos em outras partes desta dissertação, é impossível na prática, por questões de custos computacionais, trabalharmos com valores de Λ menores do que dois. Portanto, teremos que

introduzir um processo alternativo que convirja rapidamente, para $\Lambda \rightarrow 1$. Na próxima seção, discutiremos esse método.

4.2 - Método da Convolução

Vimos na seção anterior, a necessidade de se introduzir um processo limite para obtermos resultados que possam ser comparados experimentalmente. Nesta seção, definiremos um método que está baseado na convolução de uma função ω obtida a partir da Eq. (4.8) com uma função regular f , definida convenientemente. Esse procedimento foi empregado, com bastante sucesso, no problema de absorção de raio-x⁶, onde uma situação semelhante é encontrada no cálculo da taxa de absorção.

Inicialmente definimos a função ω da variável contínua ξ como

$$\omega(\xi) = \frac{4\pi}{h} \rho^2 \bar{\beta} k_B T \frac{\sum_I e^{-\bar{\beta} E_{IN}/D} |\langle I | H_X^N | \xi \rangle|^2 \delta[(E_{IN} - \xi)/D]}{\sum_I e^{-\bar{\beta} E_{IN}/D}} \quad (4.9)$$

Seja, por exemplo, o procedimento de obtenção da Eq. (4.8) a partir de (4.9). De acordo com essas equações temos

$$\frac{1}{T_1} = \sum_F \omega(E_{FN}) \quad (4.10)$$

com

$$\omega(E_{FN}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \omega(\xi) f_O(\xi, E_{FN}) d\xi \quad (4.11)$$

onde

$$f_O(\xi, E_{FN}) = \delta(\xi - E_{FN}) \quad (4.12)$$

O método que vamos definir difere muito pouco desse que descrevemos nas Eqs. (4.9) - (4.12); em particular não estamos interessados (a menos que seja no limite $\Lambda \rightarrow 1$) em reobter exatamente a Eq. (4.8) por esse processo, e assim algumas alterações terão que ser introduzidas, principalmente na definição da função f . Uma maneira para atingirmos nossos objetivos é tomar uma função f cuja largura seja muito maior do que a diferença entre as energias dos diversos estados finais. Com isto, objetiva-se tratar esses estados tal qual fizessem parte de um contínuo. No caso do problema de raio-x, bons resultados são obtidos mesmo para uma função f com largura da ordem de espaçamento entre as energias. Maiores detalhes e justificativas desse procedimento, podem ser encontrados na seção 2C.6 e Apêndice A da ref. 6.

Convém usarmos uma escala logarítmica para introduzirmos este processo, como sugerida pela discretização da banda de condução. Assim sendo, vamos substituir a Eq. (4.11) por

$$\omega(E_{FN}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \omega(\xi) f(\xi, E_{FN}) d \ln \xi \quad (4.13)$$

onde f é agora uma "caixa retangular" de área unitária:

$$f(\xi, E_{FN}) = \begin{cases} 1/\ln \Lambda, & \text{para } |\ln \xi - \ln E_{FN}| < \frac{1}{2} \ln \Lambda \\ 0, & \text{fora desse intervalo} \end{cases}$$

Notar que no limite $\Lambda \rightarrow 1$ $f(\xi, E_{FN})$ é uma função delta do argumento.

As Eqs. (4.9), (4.10) e (4.13), (4.14) definem o que chamamos de método da convolução para calcular o tempo de relaxação. Dessas equações, chega-se facilmente à forma convoluta de T_1 :

$$\frac{1}{T_1} = \frac{4\pi}{h} \rho^2 \bar{\beta} k_B T \frac{\sum_{I,F} \left(e^{-\bar{\beta} E_{IN}/D} \frac{D}{E_{IN}} \ln \Lambda \right) | \langle I | H_X^N | F \rangle |^2}{\sum_I e^{-\bar{\beta} E_{IN}/D}} \quad (4.14)$$

Do ponto de vista prático, o que se obtém por esse procedimento é, basicamente, substituir a condição de conservação de energia, dada pela função delta na Eq. (4.8), por uma outra condição

$$|\ln E_{IN} - \ln E_{FN}| < \frac{1}{2} \ln \Lambda \quad (4.15)$$

após a convolução. Podemos ver desta equação que para $\Lambda \rightarrow 1$, o espaçamento entre as energias aproximam-se de zero e o processo de convolução torna-se exato neste caso.

Na fig. 4.1, representamos esquematicamente o método descrito nesta seção.

No Capítulo V discutiremos os resultados obtidos para o tempo de relaxação através da Eq. (4.15). Adiantamos, porém, que a contribuição principal desta dissertação está no fato de termos desenvolvido, pela primeira vez, um formalismo, baseado na aproximação do grupo de renormalização, capaz de resolver um problema que até agora não foi resolvido satisfatoriamente. Assim sendo, preocupamo-nos somente em ilustrar o método, aplicando-o a uma situação particular que pode ser resolvida diretamente no limite do contínuo, $\Lambda \rightarrow 1$, para o qual a Eq. (4.1) se aplica (ver seção 5.2).

FIG. 4.1 - (a) Exemplos de configurações para um estado inicial e quatro estados finais, estes com energias a menos de $\bar{\eta}_3$ do estado inicial, construídos a partir dos níveis de energia de $\bar{H}_O^N$. Esses estados são usados para calcular os elementos de matriz da Eq. (4.15). Para esses elementos de matriz só contribuem os estados finais que tiverem spin total aumentado (diminuído), de uma unidade em relação ao spin do estado inicial uma vez que no estado final a componente-z do spin nuclear diminui (aumenta). (b) Os estados finais construídos em (a) são representados por linhas rotuladas pelos símbolos correspondentes a estes estados. A "caixa" pontilhada representa a função definida pela Eq. (4.14) e ilustra o procedimento de convolução definido pelas Eqs. (4.9), (4.10), (4.13) e (4.14). Notar que as linhas F_2, F_3 e F_4 estando fora da "caixa" não contribuem para a taxa de relaxação convoluta e assim não precisam ser calculadas.

CAPÍTULO V

RESULTADOS

5.1 - Recapitulação da Metodologia para o cálculo de T_1

Antes de discutirmos os resultados para T_1 convoluto (Eq. (4.15)) resultante dos cálculos desenvolvidos nos Capítulos III e IV, convém recapitularmos os vários passos envolvidos no processo. Inicialmente aproximamos a banda de condução através de um processo de discretização na seção 3.1, substituindo o contínuo de energias por um conjunto infinito de níveis discretos, cujas energias estão logaritmicamente distribuídas no intervalo $0 \leq \epsilon \leq D$, onde o zero é obtido apenas assintoticamente. Como resultado dessa discretização transformamos o Hamiltoniano de Relaxação da forma contínua (Eq. (3.19)) para a forma discretizada (Eq. (3.21)).

Uma vez que essa forma discretizada do Hamiltoniano contém um número infinito de termos, nenhum cálculo numérico seria possível, levando em conta todos esses termos. Assim, o próximo passo foi, então, procurar uma versão truncada desse Hamiltoniano que pudesse ser utilizada em substituição à original. Disto resultou a definição de H_N (Eq. (3.24)), com

$$H = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} \right) \Lambda^{-(N-1)/2} H_N \quad (5.1)$$

sendo o Hamiltoniano original, não perturbado. O limite $N \rightarrow \infty$ é substituído aqui por valores de N suficientemente grandes (mas finitos), satisfazendo a condição:

$$\left(\frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} \right) D \Lambda^{-(N-1)/2} = \bar{\beta}_N k_B T \quad (5.2)$$

onde $k_B T$ é uma escala de energia associada com a temperatura (na qual estamos interessados em calcular o tempo de relaxação) e $\bar{\beta}_N$ é um número muito menor do que a unidade tal que termos H_M , para $M > N$, podem ser desprezados em virtude de não alterarem significativamente os fatores de Boltzman associados com os estados de H_N .

O Hamiltoniano H_N , com N satisfazendo a condição (5.2), foi diagonalizado numericamente através de um processo iterativo, processo esse que consiste em definir uma sequência de Hamiltonianos $H_0, H_1, \dots, H_N$, da qual H_0 é inicialmente diagonalizado, seguindo-se H_1, H_2 , etc. (ver seção 3.4).

Tratando N como uma variável, definimos uma transformação do grupo de renormalização, que consiste numa dilatação de escalas de energia por um fator Λ que representamos simbolicamente por

$$T[H_N] = H_{N+2} \quad (5.3)$$

A importância dessa transformação está na análise de uma forma particular de $H_N = H_N^*$, para a qual

$$T[H_N^*] = H_N^* \quad (5.4)$$

isto é, quando H_N é invariante por uma dilatação de escala de energia. Neste caso, dizemos que H_N^* é um ponto fixo de T . Na seção 3.6 desenvolvemos a análise dos pontos fixos de T , chegando-se aos seguintes resultados:

a) para N pequeno (isto é, $k_B T \approx D$) $T[H_N]$ tem um ponto fixo que denominamos de ponto fixo de impureza livre. Nesta situação, H_N pode ser substituído por um Hamiltoniano efetivo

$$H_{N,IL}^* = \bar{H}_0^N + H_{J=0}^N \quad (5.5)$$

onde $\bar{H}_0^N$ é um Hamiltoniano de eletrons livres e $H_{J=0}^N$ é o Hamiltoniano de eletrons livres mais uma impureza livre. Os estados de

muitos corpos de $H_{N,IL}^*$ são obtidos, dependendo das configurações dos sistemas representados por $\bar{H}_0^N$ e $H_{j=0}^N$. Por exemplo, o estado $\bar{g}_1^+ g_1^+ h_2^+$ que corresponde a um elétron no nível $\bar{\eta}_1^*$ de $\bar{H}_0^N$, e um elétron e um buraco nos níveis η_1^* e $-\eta_2^*$ de $H_{j=0}^N$, respectivamente, tem energia $\bar{\eta}_1^* + \eta_1^* + \eta_2^*$, onde $\bar{\eta}_j^*$ e η_j^* estão mostrados na Tabela I.

b) para N grande (isto é, $K_B T \ll D$) $T[H_N]$ tem um ponto fixo que denominamos de ponto fixo de impureza congelada. Neste caso o Hamiltoniano efetivo que representa H_N é dado por

$$H_{N,IC}^* = \bar{H}_0^N + H_{J=-\infty}^N \quad (5.6)$$

onde $\bar{H}_0^N$ é um Hamiltoniano de elétrons livres, definido na Eq. (3.26), e $H_{J=-\infty}^N$ (Eq. (3.27)) contém estados de elétrons livres mais um estado singlete (formado por um elétron de condução com a impureza) que estão desacoplados entre si. Os estados de muitos corpos de $H_{N,IC}^*$ são construídos de maneira similar ao caso anterior. (Ver Capítulo III para maiores detalhes).

No Capítulo IV, introduzimos uma expressão perturbativa (Eq. (4.8)) para o cálculo do tempo de relaxação, baseada na regra de ouro de Fermi. Entretanto, essa equação não pôde ser aplicada diretamente ao cálculo de T_1 , devido à discretização da banda de condução. Um cálculo complementar seria ainda necessário para obtermos os resultados corretamente. Sendo assim, introduzimos um método de convolução, e mostramos que este converge para o limite do contínuo quando $\Lambda \rightarrow 1$, tornando-se neste limite um procedimento exato.

Nas seções seguintes, discutiremos os resultados numéricos obtidos neste trabalho. Antes disso, porém, apresentaremos uma solução analítica para o caso $T = 0$.

5.2 - Cálculo analítico de T_1 para $T = 0$

Uma situação de particular interesse no cálculo de T_1 é tratarmos o problema na temperatura rigorosamente nula. A principal motivação disto é que nenhuma aproximação numérica necessita ser feita para calcularmos o tempo de relaxação, como mostraremos a seguir.

Como vimos na seção 3.6, no limite $T \rightarrow 0$ (isto é, $N \rightarrow \infty$) a parte não perturbada do Hamiltoniano de Relaxação (H_N) pode ser substituída exatamente pelo Hamiltoniano ponto fixo de impureza congelada $H_{N,IC}^*$, uma vez que neste limite, os auto-valores desses Hamiltonianos são exatamente os mesmos. O importante, aqui, é lembrarmos que $H_{N,IC}^*$ tem seu estado de condução mais localizado, $f_{0\mu}$ - da cadeia de operadores $f_{n\mu}$, centrados em torno da impureza - totalmente desacoplado dos demais estados, devido seu forte acoplamento com a impureza na formação do estado singleto, podendo o operador $f_{0\mu}$, portanto, ser desconsiderado.

Como resultado da exclusão desse operador, o Hamiltoniano de interação H_X (Eq. (3.20)) toma a forma simplificada:

$$H_X = -2A \left[\left(1 - \frac{\sin^2 k_F R}{k_F^2 R^2} \right) \bar{f}_{0\uparrow}^\dagger \bar{f}_{0\downarrow} I_- + h.c. \right] \quad (5.7)$$

Consequentemente, dos dois termos (independentes) que compõem H_N - $\bar{H}_0^N$ e H_J^N , respectivamente - apenas $\bar{H}_0^N$ contribui para o cálculo de T_1 , em virtude de H_J^N estar completamente desacoplado de H_N . $\bar{H}_0^N$ é um Hamiltoniano de elétrons livres que, de acordo com a Eq. (3.36), é dado por

$$\bar{H}_0^N = \sum_{j=1}^{(N+1)/2} \bar{\eta}_j (\bar{g}_{j\mu}^\dagger \bar{g}_{j\mu} + \bar{h}_{j\mu}^\dagger \bar{h}_{j\mu}) \quad (5.8)$$

diagonalizado exatamente nos $(N+1)$ níveis de uma partícula; $\bar{\eta}_j$ é a energia de uma partícula dada por $\bar{\eta}_j = \Lambda^{j-1}$ (para N grande e $j \gg 1$). A forma simples deste Hamiltoniano, permite um cálculo analítico para T_1 .

Considerando, agora, o cálculo de T_1 . Usaremos para isso a Eq. (4.1), supondo que as variáveis de energia tenham sido anteriormente reescalados; após algumas transformações naquela equação, obtemos

$$\frac{1}{T_1} = \lim_{\Lambda \rightarrow 1} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{4\pi}{h^2} \left[2A \left(1 - \frac{\sin^2 k_F^2 R}{k_F^2 R^2} \right) \right]^2 \left(\frac{2}{1+\Lambda^{-1}} \right) \Lambda^{(N-1)/2} \times$$

$$\times \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle S_+(\vec{R}_n, t) S_-(\vec{R}_n, 0) \rangle \quad (5.9)$$

onde

$$S_+(\vec{R}_n, t) = \bar{f}_{0\uparrow}^\dagger(t) \bar{f}_{0\downarrow}(t) = S_-^\dagger(\vec{R}_n, t) \quad (5.10)$$

é o operador abaixamento de spin eletrônico na posição do núcleo $\vec{R}_n$ e o tempo t . No Apêndice A, uma análise detalhada mostra que:

$$\frac{1}{T_1 T} = \frac{4\pi}{h} k_B \rho^2 A^2 \left(1 - \frac{\sin^2 k_F R}{k_F^2 R^2} \right)^2 \quad (5.11)$$

onde ρ é a densidade de estados do metal puro. Salientamos aqui, que este resultado é exato para $T = 0$.

No caso em que o núcleo e a impureza estão muito distantes, isto é, $k_F R \gg 1$, a Eq. (5.11) resulta em

$$\frac{1}{T_1 T} = \frac{4\pi}{h} k_B \rho^2 A^2 \quad (5.12)$$

que é exatamente a relação de Korringa¹⁵, para metais puros. De fato, quando estamos precisamente no ponto fixo $T = 0$ (como é o caso) o spin da impureza é "congelado", uma vez que se encontra fortemente acoplado ao elétron de condução f_0 , elétron esse que se desacopla dos demais na cadeia f_n em torno da impureza. A participação da impureza no processo de relaxação restringe-se a defasar as funções de onda dos elétrons dessa cadeia que estão espacialmente próximos a ela. Na linguagem do Capítulo II isso é equivalente a dizer que o mecanismo de relaxação nuclear provém apenas dos elétrons da cadeia $\bar{f}_n$ em torno do núcleo, uma vez que essas duas cadeias (f_n e $\bar{f}_n$) desacoplam-se, neste caso. Por outro lado, se tomarmos R suficientemente pequeno, a Eq. (5.11) nos mostra que a taxa de relaxação T_1^{-1} se anula ou, o que é o mesmo, o tempo de relaxação T_1 torna-se infinito. Nesta situação, o núcleo interage somente com o elétron f_0 (cf. Eq. (2.29)); uma vez que esse elétron encontra-se impedido de participar de qualquer processo em que seu spin seja virado, devido seu forte acoplamento com o spin da impureza, conclui-se então que a taxa de relaxação nuclear deva se anular.

Este mesmo problema foi originalmente tratado por Roshen e Saam¹⁰, que usaram diretamente os resultados de uma aproximação de líquido de Fermi, derivada por Nozières¹¹ para o problema Kondo, cujo Hamiltoniano admite de partida uma simetria esférica em torno da impureza. Infelizmente, o problema que eles tentaram resolver não possui essa simetria e sim uma simetria de dois centros em torno da impureza e do núcleo, respectivamente, o que implica numa deficiência do formalismo por eles utilizado. De fato, os resultados por eles obtidos concordam com aqueles aqui derivados num tratamento mais rigoroso, apenas no caso em que impureza e núcleo estão infinitamente distantes, como podemos ver, comparando a Eq. (9) da ref. 10 com a Eq. (5.11) desta seção. Além disso, uma vez que a aproximação de Nozières é válida apenas para tempe-

raturas muito próximas de zero, os resultados da ref. 10 estão também restritos a essa faixa de temperatura. Embora a análise que aqui derivamos tenha se concentrado para temperatura $T=0$, noso formalismo é válido para todas as faixas de temperatura de $T \gg T_K$ até $T \ll T_K$.

Na seção 5.4 discutiremos brevemente o caso de temperaturas que estão na faixa $0 < T \ll T_K$. Antes disso, na seção 5.3 descreveremos o método numérico, com a aplicação da Eq. (4.15) e veremos que o resultado $1/T_1 T$ obtido por esse método converge rapidamente para o resultado exato desta seção para $\Lambda \rightarrow 1$.

5.3 - Cálculo numérico de T_1 para $T=0$

Nesta seção, aplicaremos o método numérico desenvolvido no Capítulo IV, para o caso de temperatura $T=0$. Com isso objetivava-se mostrar que esse método fornece bons resultados para $\Lambda \rightarrow 1$, quando comparados com aqueles obtidos analiticamente na seção anterior. Uma vez que a determinação da taxa de relaxação para temperaturas finitas envolverá cálculos numéricos muito mais complexos do que os envolvidos no caso $T=0$, restringir-nos-emos apenas a este caso, deixando aquele para trabalhos futuros (ver seção 5.4).

A finalidade do método é resolver numericamente a Eq. (4.15); uma vez que vamos aplicá-lo a uma situação já conhecida, convém reescrevermos essa equação numa forma mais apropriada para compararmos os resultados numéricos com o resultado exato. Assim sendo, temos

$$W_N(\Lambda, \bar{\beta}) \equiv \frac{1}{T_1 T} \frac{A_\Lambda^2}{4\pi k_B \rho^2 A^2} = \left[\frac{1+\Lambda^{-1}}{1-\Lambda^{-1}} \frac{\ln \Lambda}{2} \right]^2 \cdot \frac{\bar{\beta}}{A^2} \frac{\sum_{I,F} e^{-\bar{\beta} E_{IN}/D} (E_{IN} \ln \Lambda)^{-1} |\langle I | H_X^N | F \rangle|^2}{\sum_I e^{-\bar{\beta} E_{IN}/D}} \quad (5.13)$$

onde

$$A_\Lambda = \frac{1+\Lambda^{-1}}{1-\Lambda^{-1}} \frac{\ln \Lambda}{2} \quad (5.14)$$

é um parâmetro que converge rapidamente para a unidade, quando $\Lambda \rightarrow 1$ (ver Apêndice A). O termo H_X é dado pela Eq. (5.7) a A é a constante hiperfina.

Os somatórios que figuram no lado direito dessa equação são calculados da seguinte maneira. Inicialmente geramos, através de um programa de computador, todos os estados de muitos eletrons de H_N - que, neste caso particular, é substituído por $\bar{H}_0^N$, conforme seção 5.2 - a partir dos $(N+1)$ níveis de energia de $\bar{H}_0^N$, onde N é um número finito, satisfazendo a condição da Eq. (5.2); esses estados correspondem aos estados iniciais $|I\rangle$ do sistema. Para cada $|I\rangle$, obtido anteriormente, geramos todos os estados eletrônicos possíveis, para os quais o spin eletrônico total tenha aumentado (diminuído) de uma unidade em relação ao estado inicial correspondente, uma vez que no estado final a componente-z do spin nuclear diminui (aumenta); os estados assim obtidos, constituem os estados finais $|F\rangle$ do sistema. Entretanto, só contribuem para o somatório em F aqueles estados cujas energias estejam dentro da "caixa retangular" centrada na energia do estado inicial considerado (ver Capítulo IV e Fig. 4.1). Repetindo esse processo para todos os estados $|I\rangle$, teremos computado a eq. (5.13).

A seguir, daremos os detalhes desse cálculo para o caso

de $T = 0$.

5.3.1 - Detalhes do cálculo numérico

Os estados $|I\rangle$ e $|F\rangle$ da Eq. (5.14) foram computados a partir dos níveis $\pm\bar{\eta}_1, \pm\bar{\eta}_2, \pm\bar{\eta}_3$ e $\pm\bar{\eta}_4$ ($\bar{\eta}_j = \Lambda^{j-1}$) de $\bar{H}_0^N$, o que nos dá um total da ordem de 2^{16} estados iniciais. Repetimos o cálculo para cada um dos valores $\Lambda = 2,5; 3,0; 5,0$ e $9,0$ com o objetivo de estudarmos as variações de $1/T_1T$ devido aos efeitos da discretização da banda de condução; fixado um desses valores para Λ , variamos o parâmetro $\bar{\beta}$ por um fator $\Lambda^{-1/4}$ entre os valores do intervalo de $0,10$ a $1,00$ de maneira que pudessemos observar as oscilações em $1/T_1T$ decorrentes dos efeitos de truncamento. O resultado destes cálculos estão mostrados nos gráficos da Fig. 5.1, onde representamos $W_N(\Lambda, \bar{\beta})$ em função de $\ln \bar{\beta}$. A seguir faremos alguns comentários sobre os resultados assim obtidos e das aproximações usadas nesses cálculos.

5.3.2 - Comentários sobre as aproximações numéricas

De um modo geral, podemos dizer que os resultados do cálculo numérico de $W_N(\Lambda, \bar{\beta})$ obtidos na subseção anterior e mostrados na Fig. 5.1 estão em boa concordância com o resultado analítico da seção 5.2; em particular, essa concordância é excelente para pequenos valores de Λ ($2,5$ e $3,0$) como seria de se esperar, pois neste caso, estamos muito próximos do limite do contínuo $\Lambda \rightarrow 1$ (seção 3.1).

Uma vez que um dos objetivos do presente trabalho é estabelecer um formalismo, que possa ser utilizado no futuro, para cálculos numéricos do tempo de relaxação nuclear em ligas magnéticas diluídas em toda a faixa de temperatura ($0 < K_B T < D$), convém

FIG. 5.1 - Resultados do cálculo numérico da taxa de relaxação $W_N(\Lambda, \bar{\beta})$ (Eq. (5.14)). Para $\Lambda = 3$ e $\bar{\beta}$ indicados na figura, os valores de W calculados numericamente são indistinguíveis (nesta escala) do valor $W=1$; esse resultado está em excelente concordância com o resultado analítico da Eq. (5.11). As inserções nesta figura mostram (numa escala ampliada) as variações de W com os parâmetros Λ e $\bar{\beta}$ (ver discussão no texto).

discutirmos os aspectos práticos de um tal cálculo. Para se calcular $1/T_1$ a temperaturas finitas é necessário diagonalizar-se o Hamiltoniano de muitos corpos H_R^N , diagonalização esta cujos custos computacionais crescem com o número de estados que compõem a base discreta em que H_R^N é expresso. Por outro lado, o número desses estados depende da escolha dos valores de Λ e $\bar{\beta}$ que utilizaremos no cálculo. De fato, quanto menor for o valor de Λ maior será o número de estados que devemos considerar e da mesma forma, quanto menor for o valor de $\bar{\beta}$ maior será o número desses estados. Assim, sob o ponto de vista prático, desejamos maximizar os valores de Λ e $\bar{\beta}$ dentro de uma precisão de cálculo previamente estabelecida, digamos, de 5%, precisão esta que aumenta à medida que $\Lambda \rightarrow 1$ e $\bar{\beta} \rightarrow 0$.

Como podemos obter resultados analíticos para $T = 0$, este caso é um excelente protótipo para se estudar as variações de Λ e $\bar{\beta}$ que sejam compatíveis com essa precisão pré-fixada. Com esse objetivo se destinam as inserções na Fig. 5.1, onde mostramos os resultados obtidos para $W_N(\Lambda, \bar{\beta})$ com diversos valores de Λ e $\bar{\beta}$, resultados esses que apresentam pequenos desvios do valor obtido analiticamente e que são mostrados nessa figura numa escala ampliada.

Esses desvios são devidos às aproximações usadas no cálculo, ou seja, a discretização da banda de condução e o truncamento do Hamiltoniano discretizado. Como mostrado por Wilson⁴, o erro introduzido com a primeira aproximação, isto é, quando usados valores de Λ maiores do que a unidade, é proporcional a $e^{-\pi^2/\ln\Lambda}$ e portanto decresce rapidamente à medida que Λ diminui. Nos resultados que apresentamos, esse erro corresponde à amplitude das oscilações nas inserções da Fig. 5.1; como podemos notar essa amplitude que é relativamente grande para $\Lambda = 9$, decresce rapidamente quando diminuimos o valor de Λ , tornando-se insignifi-

cante para $\Lambda \leq 3$.

Pode-se mostrar que a taxa de relaxação, normalizada pela constante de Korringa, calculada para um dado valor de Λ , de N e $\bar{\beta}$ $[\bar{W}_N(\Lambda, \bar{\beta})]$ é idêntica à taxa para o mesmo Λ , N aumentado de dois e $\bar{\beta}$ diminuído de um fator Λ (isto é, $\bar{W}_{N+2}(\Lambda, \bar{\beta}/\Lambda)$). De fato, uma vez que essas transformações não implicam numa mudança de temperatura, como podemos verificar da Eq. (5.2), conclui-se que os valores de W assim obtidos devem ser o mesmo. Em particular, quando estamos num ponto fixo, isso implica em que as oscilações tenham um período Λ , pois neste caso os auto-valores de H_R^N são idênticos aos de H_R^{N+2} e portanto a taxa de relaxação W deve obedecer a condição $\bar{W}_N(\Lambda, \bar{\beta}) = \bar{W}_N(\Lambda, \bar{\beta}/\Lambda)$. Os gráficos referentes a $\Lambda = 5,0$ e $9,0$ apresentam muito bem essa propriedade; no entanto, isso não acontece para $\Lambda = 2,5$ e $3,0$.

A razão para esses desvios do regime oscilatório (para $\Lambda = 2,5$ e $3,0$) são os valores grandes de $\bar{\beta}$ (próximos da unidade) que usamos nesses cálculos. A escolha desses valores se prende a considerações de custos computacionais. De fato, para um dado valor de $\bar{\beta}$, estados iniciais com energia E_I^N maior que uma energia E_{lim} escolhida de tal forma que o fator de Boltzmann e $e^{-\bar{\beta}E_{lim}}$ seja muito menor que a unidade não precisam ser levados em conta na soma (4.15), o que reduz consideravelmente o número de estados iniciais que devem ser analisados e portanto restringe o custo do cálculo de $\bar{W}_N(\Lambda, \bar{\beta})$. No entanto, se $\bar{\beta}$ for muito pequeno (isto é, $\bar{\beta} < 0,1$) E_{lim} se torna muito grande e portanto esse custo sobe astronômicamente. Na prática, somos então obrigados a usar $\bar{\beta} \gtrsim 0,1$.

Por outro lado, tomando-se valores de $\bar{\beta}$ muito grandes as energias pequenas (próximas ao nível de Fermi), que somos forçados a desprezar devido ao truncamento do Hamiltoniano (seção 3.1), passam a contribuir significativamente uma vez que neste caso E_{lim} torna-se muito pequena.

Em resumo, com relação aos cálculos derivados neste tra

balho podemos dizer que o caso $\Lambda = 3,0$ com os valores de $\bar{\beta}$ indicados na Fig. 5.1 é o que melhor se comporta, na prática, em termos do compromisso entre os custos computacionais e a precisão de cálculo desejada.

5.4 - Análise do tempo de relaxação para $T > 0$

Nas seções anteriores, discutimos o problema de relaxação quando H_N é exatamente o ponto fixo de impureza congelada $H_{N,IC}$ (isto é, $J = -\infty$ e $T = 0$). Nesta seção analisaremos o caso $|J| < 1$ para N grande mas finito, isto é, $T > 0$. Da análise dos pontos fixos, (seção 3.6), vimos que H_N , nesta situação, será muito próximo de $H_{N,IC}$, no sentido de que seus autovalores estão muito próximos dos correspondentes autovalores do ponto fixo. Um método sistemático para descrever os desvios entre esses autovalores pode então ser empregado - como no caso do problema Kondo⁴ - analisando-se as transformações T do grupo de renormalização na vizinhança desse ponto fixo. Adiantamos porém, que devido a limitações de tempo, nenhum resultado quantitativo será aqui obtido para o caso de temperaturas finitas.

Como resultado básico da análise de T em torno de um ponto fixo (ver, por exemplo, seção 8 da ref. 4) temos que, quando H_N está próximo desse ponto fixo, seus auto-estados e autovalores podem ser calculados, usando-se um Hamiltoniano efetivo que é dado por H_N^* mais termos de correção. Assim temos

$$H_{ef}^N = H_N^* + \omega_1 \Lambda^{(N-1)/2} \delta H_1 + \omega_2 \Lambda^{(N-1)/2} \delta H_2 + \dots \quad (5.15)$$

No caso particular do ponto fixo de impureza congelada ($H_N^* = H_{N,IC}^*$), δH_1 , δH_2 , etc., representam todos os possíveis operadores que possam ser construídos a partir dos operadores f_1 , f_2 , etc., $\bar{f}_0$, $\bar{f}_1$, etc., I_+ e I_- (disponíveis neste ponto fixo) consis

tentes com a simetria do Hamiltoniano completo $H_R^N (= H_N + H_X^N)$, ou seja, deva conservar carga, spin total e S_z e ter simetria partícula-buraco, esta última sendo equivalente à invariância de H_N^R sob as transformações

$$\begin{aligned} f_{n\mu} &\leftrightarrow (-1)^n f_{n\mu}^\dagger \\ \vec{\tau} &\leftrightarrow -\vec{\tau}^* \end{aligned} \quad (5.16)$$

e similares para os operadores $\bar{f}_n$ e $\bar{I}$. As constantes ω_1, ω_2 , etc, que dependem dos parâmetros do problema (J e A), são determinadas comparando-se os resultados do cálculo perturbativo da Eq. (5.15) com os resultados numéricos para os autovalores de H_R^N . Convém ressaltar que a Eq. (5.15) só é válida para valores de N tais que os termos de correção sejam muito pequenos de maneira que possam ser calculados perturbativamente.

Evidentemente, a Eq. (5.15) não limita o número de operadores δH , que devem ser levados em conta na análise. Como regra geral, consideram-se apenas aqueles δH_i^N cujos elementos de matriz entre os auto-estados de $H_{N,IC}^*$ (que em geral dependem de N) dêem uma contribuição importante. Em particular, se essa contribuição diminui quando N aumenta, é claro que o ponto fixo de impureza congelada $H_{N,IC}^*$ é uma boa aproximação para H_N ; por outro lado, se ela aumenta com N , uma análise mais cuidadosa deve ser feita, uma vez que H_N se afasta desse ponto fixo. A propósito, classificam-se os operadores $\delta H_i^N = \Lambda^{(N-1)/2} \delta H_i$ como relevantes, irrelevantes e marginais se suas contribuições crescem, diminuem ou são independentes de N , respectivamente.

A seguir, daremos exemplos de alguns operadores δH_i que são os mais importantes dentre os que são consistentes com a simetria do problema.

$$\delta H_1 = f_{1\mu}^\dagger f_{2\mu} + f_{2\mu}^\dagger f_{1\mu} \quad (5.17)$$

$$\delta H_2 = (f_{1\mu}^\dagger f_{1\mu} - 1)^2 \quad (5.18)$$

$$\delta H_3 = \bar{f}_{0\mu}^\dagger \bar{f}_{1\mu} + \bar{f}_{1\mu}^\dagger \bar{f}_{0\mu} \quad (5.19)$$

$$\delta H_4 = (\bar{f}_{0\mu}^\dagger \bar{f}_{0\mu} - 1)^2 \quad (5.20)$$

$$\delta H_5 = \bar{f}_{0\uparrow} f_{2\downarrow} I_- + f_{2\downarrow} \bar{f}_{0\uparrow} I_+ \quad (5.21)$$

Esses operadores são todos irrelevantes, pois todos os δH_i^N comportam-se como $\Lambda^{-(N-1)/2}$, em função de N . Para provarmos isto, devemos representar δH_i na base de operadores que diagonaliza $H_{N,IC}^*$, isto é, $g_{j\mu}$ e $h_{j\mu}$. Da tabela I, temos que

$$f_{1\mu} = \Lambda^{-(N-1)/4} \sum_j \alpha_{0j} (g_{j\mu} + h_{j\mu}^\dagger) \quad (5.22)$$

$$f_{2\mu} = \Lambda^{-3(N-1)/4} \sum_j \alpha_{1j} (g_{j\mu} - h_{j\mu}^\dagger) \quad (5.23)$$

$$\bar{f}_{0\mu} = \Lambda^{-(N-1)/4} \sum_j \alpha_{0j} (\bar{g}_{j\mu} + \bar{h}_{j\mu}^\dagger) \quad (5.24)$$

$$\bar{f}_{1\mu} = \Lambda^{-3(N-1)/4} \sum_j \alpha_{1j} (\bar{g}_{j\mu} - \bar{h}_{j\mu}^\dagger) \quad (5.25)$$

Substituindo-se, agora, essas expansões nos correspondentes δH_i chega-se facilmente ao resultado desejado. Outros operadores podem ser construídos mas decaem muito mais rapidamente com N . Por outro lado, o operador δH_4 possui somente termos quárticos em g_j e h_j ⁽²⁸⁾; como H_0^N tem a forma quadrática nestes operadores, conclui-se que a constante $\omega_4 = 0$.

Nenhum operador relevante ou marginal que satisfaça os requisitos de simetria pode ser construído a partir dos f_n e $\bar{f}_n$ disponíveis. Chamamos a atenção para o operador $\delta H = \bar{f}_{0\uparrow}^\dagger \bar{f}_{0\downarrow} I_- + \bar{f}_{0\downarrow}^\dagger \bar{f}_{0\uparrow} I_+$

que é um operador marginal, mas que já foi tratado no termo H_x (cf. Eq. (5.7)). Outro operador, $\delta H = \bar{f}_{0\uparrow}^\dagger f_{1\downarrow} I_- + f_{1\downarrow}^\dagger \bar{f}_{0\uparrow} I_+$ (marginal) não satisfaz a simetria partícula-buraco, isto é, não é invariante sob as transformações (5.16). Por outro lado, o operador $\delta H = \bar{f}_{0\mu}^\dagger f_{1\mu} + f_{1\mu}^\dagger \bar{f}_{0\mu}$ não contribui para a Eq. (5.15), uma vez que a cadeia $f_{n\mu}$ só acopla à cadeia $\bar{f}_{n\mu}$ através de uma inversão do spin nuclear, conforme podemos observar no Hamiltoniano total H_R^N .

Desta maneira, tem-se que a Eq. (5.15) pode ser substituída por

$$\begin{aligned}
 H_{ef}^N = & H_{N,IC}^* + \omega_1 \Lambda^{-(N-1)/2} (f_{1\mu}^\dagger f_{2\mu} + f_{2\mu}^\dagger f_{1\mu}) + \omega_2 \Lambda^{-(N-1)/2} (f_{1\mu}^\dagger f_{1\mu} - 1)^2 \\
 & + \omega_3 \Lambda^{-(N-1)/2} (\bar{f}_{0\mu}^\dagger \bar{f}_{1\mu} + \bar{f}_{1\mu}^\dagger \bar{f}_{0\mu}) + \omega_5 \Lambda^{-(N-2)/2} (\bar{f}_{0\uparrow}^\dagger f_{2\downarrow} I_- + \\
 & + f_{2\downarrow}^\dagger \bar{f}_{0\uparrow} I_+)
 \end{aligned} \tag{5.26}$$

Para se determinar o tempo de relaxação nuclear à temperaturas baixas é necessário, portanto, determinar-se as constantes $\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_5$, etc.; limitações de tempo, impediram que nos aprofundássemos na análise numérica do Hamiltoniano H_R^N , de cujos auto-estados se podem extrair as citadas constantes e assim, deixamos para uma análise posterior o cálculo da relaxação nuclear a temperaturas finitas.

CAPÍTULO VI

CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Nesta dissertação, as técnicas do grupo de renormalização desenvolvidas por Wilson⁴ para o problema Kondo, foram aplicadas ao problema de relaxação de spins nucleares por eletrons de condução em ligas magnéticas diluídas. Como se sabe^{1,2}, mesmo para o Hamiltoniano de Kondo que é a forma mais simples para se descrever essas ligas, métodos perturbativos falham para temperaturas da ordem ou menores do que a temperatura de Kondo T_K . Uma vez que nos propusemos a desenvolver um formalismo que seja válido para todas as faixas de temperaturas, isto é, desde $T \gg T_K$ até $T \ll T_K$, um método especial (não perturbativo) foi então usado para tratar o sistema eletrôn-impureza.

Roshen e Saam¹⁰, em 1980, analisaram (recentemente) este problema, usando a teoria de líquido de Fermi introduzido por Nozières¹¹, teoria essa que é somente válida para temperaturas muito próximas de zero; além disto, os resultados derivados na Ref. 11 (em que se admite que o Hamiltoniano tem simetria esférica com relação ao sítio da impureza) somente podem ser aplicados ao problema de relaxação nuclear (que possui uma simetria de dois centros definida com relação aos sítios da impureza e do núcleo) no caso em que esses dois centros se desacoplam, isto é, no limite $k_F R \rightarrow \infty$.

Essa noção intuitiva é ratificada pela análise conduzida neste trabalho, em que desenvolvemos um formalismo considerando os dois centros de simetria, em torno dos quais descrevemos os estados eletrônicos de condução, como mostramos no Capítulo II.

Como observamos anteriormente, uma vez que este problema apresenta singularidades a temperaturas muito baixas, um trata

mento não perturbativo se fez necessário, tratamento esse em que utilizamos as técnicas do grupo de renormalização de Wilson, convenientemente adaptadas no Capítulo III para o caso de dois centros de simetria.

No Capítulo IV, desenvolvemos um método para obter os resultados do cálculo numérico da taxa de relaxação, no limite do contínuo. Esta etapa do formalismo é necessária uma vez que, com a aplicação das técnicas de Wilson, é feita uma transformação do Hamiltoniano, originalmente na forma contínua, para a forma discretizada.

Os resultados do cálculo da taxa de relaxação foram relatados no Capítulo V, onde apresentamos também alguns comentários sobre as aproximações usadas. Esses resultados vêm da aplicação do formalismo desenvolvidos em capítulos anteriores para o caso (relativamente simples) $T \rightarrow 0$. Para esse caso derivamos uma solução analítica, cujo resultado concorda com aquele obtido por Roshen et al no limite $k_F R \rightarrow \infty$, confirmando nossa expectativa de que a análise conduzida na Ref. 10 é inadequada para o caso de $k_F R$ finito.

Uma extensão imediata deste trabalho será calcular a taxa de relaxação em todas as faixas de temperatura às quais o formalismo aqui desenvolvido pode ser aplicado; isso permitirá uma melhor comparação entre os dados experimentais e os resultados teóricos. Esse projeto envolverá cálculos numéricos bem mais complexos do que os desenvolvidos nesta dissertação, uma vez que exige uma diagonalização do Hamiltoniano completo (e não só da forma restrita a que o Hamiltoniano se reduz no ponto fixo $T_F = 0$).

Uma vez que o Hamiltoniano de Kondo, usado neste trabalho, é um modelo muito simplista para se descrever uma liga magnética, será interessante então calcular a taxa de relaxação usando um modelo mais realista para tratar o sistema eletron-impureza

como, por exemplo, o modelo de Anderson.

Um projeto ainda mais ambicioso é o cálculo do tempo de relaxação de um núcleo do metal hospedeiro nas proximidades de duas impurezas magnéticas que interagem mutuamente.

APÊNDICE A

DERIVAÇÃO DA EXPRESSÃO ANALÍTICA DE T_1 PARA $T=0$

Consideremos o cálculo de T_1 através da Eq. (5.9),

$$\begin{aligned} \frac{1}{T_1} = & \lim_{\Lambda \rightarrow 1} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{4\pi}{h^2} \left[2A \left(1 - \frac{\sin^2 k_F R}{k_F^2 R^2} \right) \right]^2 \left(\frac{2}{1+\Lambda^{-1}} \right)^{\Lambda(N-1)/2} \times \\ & \times \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \bar{f}_{O\uparrow}^{\dagger}(t) \bar{f}_{O\downarrow}(t) \bar{f}_{O\downarrow}^{\dagger} \bar{f}_{O\uparrow} \rangle \end{aligned} \quad (A.1)$$

onde os limites $\Lambda \rightarrow 1$ e $N \rightarrow \infty$ anulam os efeitos da discretização e do truncamento do Hamiltoniano, tornando-se assim um cálculo exato.

Para efetuarmos esse cálculo, vamos usar a expansão do operador $\bar{f}_{O\mu}$ (que aniquila um elétron na posição do núcleo) em termos dos operadores $\bar{g}_{j\mu}$ e $\bar{h}_{j\mu}$, de uma partícula, que diagonalizam o Hamiltoniano ponto fixo de impureza congelada (cf. Eq. (5.8)), expansão essa que é dada na Tabela I por

$$\bar{f}_{O\mu} = \alpha_O \Lambda^{-(N-1)/4} \sum_j \Lambda^{(j-1)/2} (\bar{g}_{j\mu} + \bar{h}_{j\mu}^{\dagger}) \quad (A.2)$$

Substituindo esta expansão em (A.1) e lembrando que apenas contribuem para a média o produto dos operadores que conservem o número de partículas (e de buracos), temos

$$\begin{aligned} \frac{1}{T_1} = & \lim_{\Lambda \rightarrow 1} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{4\pi}{h^2} \left| 2A \left(1 - \frac{\sin^2 k_F R}{k_F^2 R^2} \right) \right|^2 \left(\frac{2}{1+\Lambda^{-1}} \right)^{\Lambda(N-1)/2} \alpha_O^4 \\ & \times \sum_{j,k=1}^{(N+1)/2} \Lambda^{-(N-1)} \Lambda^{(j-1)} \Lambda^{(k-1)} \left[2 \left(\frac{2}{1+\Lambda^{-1}} \right)^{(N-1)/2} \frac{1}{D} k_B T \delta(\bar{n}_j - \bar{n}_O) \right] \times \end{aligned}$$

$$\times \frac{1}{D} \delta(\bar{\eta}_j - \bar{\eta}_k) \quad (\text{A.3})$$

onde $\bar{\eta}_j = \Lambda^{j-1}$ é a energia de uma partícula (em unidades de D) no nível j e $\bar{\eta}_0$ é a energia de Fermi. Na passagem para a Eq. (A.3) usamos o resultado²⁹

$$f(\bar{\eta}_j) [1 - f(\bar{\eta}_j)] = \left[\left(\frac{2}{1 + \Lambda^{-1}} \right) \frac{\Lambda^{(N-1)/2}}{D} \right] k_B T \delta(\bar{\eta}_j - \bar{\eta}_0) \quad (\text{A.4})$$

onde $f(\bar{\eta}_j)$ é a distribuição de Fermi para partículas com energia $\bar{\eta}_j$ (*); o prefator em (A.4) aparece uma vez que estamos considerando energias escaladas pelo fator $(2/1 + \Lambda^{-1}) \Lambda^{(N-1)/2}$ (cf. Eq.(4.3)). Reescrevendo a Eq. (A.3) temos

$$\begin{aligned} \frac{1}{T, T} = & \frac{4\pi}{h} \rho^2 A^2 k_B \left(1 - \frac{\sin^2 k_F R}{k_F^2 R^2} \right)^2 \lim_{\Lambda \rightarrow 1} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{4\alpha_0^2}{1 + \Lambda^{-1}} \right)^2 \\ & \times 2 \sum_{j,k=1}^{(N+1)/2} \Lambda^{(j-1)} \Lambda^{(k-1)} \delta(\bar{\eta}_j - \bar{\eta}_0) \delta(\bar{\eta}_j - \bar{\eta}_k) \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

onde usamos $\rho = 1/D$. Seja

$$m = \left(\frac{N-1}{2} \right) - (j-1) \quad (\text{A.6})$$

(*) A rigor, como estamos tratando com energia discretas, a função indicada pelo símbolo $\delta(\bar{\eta}_j - \bar{\eta}_0)$ no lado direito da Eq. (A.4), representa uma função com uma largura finita. Usamos aqui este símbolo apenas por comodidade de notação, uma vez que no limite em que estamos interessados (isto é, $\Lambda \rightarrow 1$) essa função torna-se a função delta de Dirac.

e definimos

$$\epsilon_m = \left(\frac{1+\Lambda^{-1}}{2} \right) \Lambda^{-(N-1)/2} \quad \text{D} \quad \bar{\eta}_j = \frac{1+\Lambda^{-1}}{2} \quad \text{D} \Lambda^{-m} \quad (\text{A.7})$$

substituindo (A.6) e (A.7) em (A.5) obtemos portanto

$$\begin{aligned} \frac{1}{T, T} &= \left[\frac{4\pi}{h} \rho^2 A^2 k_B \left(1 - \frac{\sin^2 k_F R}{k_F^2 R^2} \right)^2 \right] \lim_{\Lambda \rightarrow 1} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{4\alpha_O^2}{1+\Lambda^{-1}} \right)^2 \\ &\quad \times 2 \sum_{m, n=0}^{(N-1)/2} \epsilon_m \epsilon_n \delta(\epsilon_m - \epsilon_O) \delta(\epsilon_m - \epsilon_n) \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Podemos agora tomar o limite $N \rightarrow \infty$, uma vez que para grandes N , ambos ϵ_m e ϵ_n tendem a zero (cf. Eq. (A.7)) e a soma acima converge.

Consideremos agora o limite $\Lambda \rightarrow 1$. Para Λ próximo da unidade de ϵ_m , que é igual a $(1+\Lambda^{-1}/2)\text{D}\Lambda^{-m}$, varia lentamente com $\underline{m}$, de maneira que para uma pequena variação Δm em $\underline{m}$ temos $\Delta \epsilon_m = -\epsilon_m \ln \Lambda \cdot \Delta m$; da mesma forma para ϵ_n . Assim sendo podemos escrever o limite do lado direito de (A.8) como

$$\begin{aligned} \lim_{\Lambda \rightarrow 1} \left(\frac{4\alpha_O^2}{1+\Lambda^{-1}} \right) \times 2 \sum_{m, n=0}^{\infty} \epsilon_m \epsilon_n \delta(\epsilon_m - \epsilon_O) \delta(\epsilon_m - \epsilon_n) &= \\ = \lim_{\Lambda \rightarrow 1} \frac{2}{A_\Lambda^2} \sum_{m, n=0}^{\infty} \Delta \epsilon_m \Delta \epsilon_n \delta(\epsilon_m - \epsilon_O) \delta(\epsilon_m - \epsilon_n) \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

onde definimos

$$A_\Lambda = \left(\frac{1+\Lambda^{-1}}{4\alpha_O^2} \right) \ln \Lambda = \frac{1+\Lambda^{-1}}{1-\Lambda^{-1}} \frac{\ln \Lambda}{2} \quad (\text{A.10})$$

No limite $\Lambda \rightarrow 1$, $\Delta \epsilon_m$ ($\Delta \epsilon_n$) $\rightarrow 0$ e as somas tornam-se integrais; nesse limite $A_\Lambda \rightarrow 1$. Mesmo para valores de $\Lambda=2$, e, etc., pode-se mostrar que⁴

$$2 \sum_{m,n=0}^{\infty} \epsilon_m \epsilon_n \delta(\epsilon_m - \epsilon_0) \delta(\epsilon_m - \epsilon_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \delta(\epsilon - \epsilon_0) \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon' \delta(\epsilon - \epsilon') + \theta[\exp(-\pi^2/\ln\Lambda)] \quad (\text{A.11})$$

Como os termos da ordem de $\exp(-\pi^2/\ln\Lambda)$ decrescem rapidamente quando Λ diminui, encontramos nisto a razão para a rápida convergência dos resultados numéricos. Para $\Lambda \rightarrow 1$, a substituição da soma pela integral torna-se então um procedimento exato. (Para maiores detalhes, ver seção 9 da Ref. 4). Assim sendo, da Eq. (A.8) temos

$$\frac{1}{T,T} = \frac{4\pi}{h} \rho^2 A^2 k_B \left(1 - \frac{\sin^2 k_F R}{k_F^2 R^2} \right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \delta(\epsilon - \epsilon_0) \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon' \delta(\epsilon - \epsilon') \quad (\text{A.12})$$

Disto, chega-se finalmente ao resultado mostrado na Eq. (5.11), ou seja:

$$\frac{1}{T,T} = \frac{4\pi}{h} \rho^2 A^2 k_B \left(1 - \frac{\sin^2 k_F R}{k_F^2 R^2} \right)^2 \quad . \quad (\text{A.13})$$

REFERÊNCIAS

1. KONDO, J, em Solid State Physics, F. Seitz, D. Turnbull e H. Ehrenreich, eds. (Academic Press, New York, 1969) , vol. 23, p. 183.
2. HEEGER, A.J., em Solid State Physics, F. Seitz, D. Turnbull e H. Ehrenreich, eds. (Academic Press, New York, 1969), vol. 23, p. 283.
3. KONDO, J., Prog. Theor. Phys. 32, 37 (1964).
4. WILSON, K.G., Rev. Mod. Phys. 47, 773 (1975).
5. KRISHNA-MURTHY, H.R.; WILKINS, J. e WILSON, K.G., Phys. Rev. B 21, 1003 (1980).
6. OLIVEIRA, L.N. de, tese (não publicada), Cornell University, Ithaca, N.Y. (1981); ver também L.N. de OLIVEIRA, J.W. WILKINS, Phys. Rev. B 24, 4863 (1981).
7. JAYAPRAKASH, C.; KRISHNA-MURTHY, H.R. e WILKINS, J.W., Phys. Rev. Lett. 47, 737 (1981).
8. JAYAPRAKASH, C.; KRISHNA-MURTHY e WILKINS, J.W., J. Appl. Phys. 53, 2142 (1982).
9. HANABUSA, M. e KUSHIDA, T., Phys. Rev. B 5, 5751 (1972).
10. ROSHEN, W.A. e SAAM, W.F., Phys. Rev. B 22, 5495 (1980).
11. NOZIÈRES, P., J. Low. Temp. Phys. 17, 31 (1974).
12. Para maiores detalhes, ver: SLICHTER, C.P., em Principles of Magnetic Resonance, F. Seitz, ed. (Harper & Row, New York, 1963) p.4.
13. PAKE, G.E., em Solid State Physics, F. Seitz e D. Turnbull, eds. (Academic Press, New York, 1956), vol. 2, p.1.
14. Ver Ref. 12, p. 18
15. Ver Ref. 12, p. 121. Este resultado foi derivado pela primeira vez por J. Korrying, Physica, 16 601 (1950).
16. PINES, D., Solid State Physics, F. Seitz e D. Turnbull, eds. (Academic Press, New York, 1955), vol. 1, p.367.
17. BENOIT, H.; GENNES P.G. de e SILHOUETTE, D., Comptes Rendus 256, 3841 (1963).

18. KITTEL, C., em Quantum Theory of Solids. (John Wiley & Sons, New York, 1963) p. 360.
- 19 GIOVANNINI, B. e HEEGER, A.J., Solid State Commun. 7. 287 (1969).
20. GIOVANNINI, B.; PINCUS, P.; GLADSTONE, G. e HEEGER, A.J., J. Phys. 32, C1-163 (1971).
21. ALLOUL, H. e BERNIER, P., J. Phys. F4, 870 (1974).
22. COHEN, J. D. e SLICHTER, C.P., J. Appl. Phys, 49, 1537 (1978).
23. GLADSTONE, G., J. Appl. Phys. 41, 1150 (1970).
24. Esta equação está escrita na notação usada por Wilson na Ref. 4. A forma correta de escrevê-la, como usada por Kondo na Ref. 1, é $H_{e-i}^K = -\frac{J}{2N} \{ (\phi_{\uparrow}^{\dagger} \phi_{\uparrow} - \phi_{\downarrow}^{\dagger} \phi_{\downarrow}) \tau_z + (\phi_{\uparrow}^{\dagger} \phi_{\downarrow} \tau_{-} + h.c.) \}$, onde
 $\phi_{\mu}(\vec{R}_i) = \sum_{\underline{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} a_{\underline{k}\mu}$. Os operadores $a_{\underline{k}\mu}$ são operadores de Fermi normalizados, isto é, $\{a_{\underline{k}\mu}, a_{\underline{k}'\mu'}^{\dagger}\} = \delta_{\underline{k}\underline{k}'} \delta_{\mu\mu'}$. Nesta notação de Kondo, os operadores $\psi_{\mu}(\vec{R}_i)$ definidos na Eq. (2-5) podem ser escritos como $\psi_{\mu}(\vec{R}_i) = \sqrt{\frac{2}{N}} \phi_{\mu}(\vec{R}_i)$; isto implica que, nesta notação, as relações de anticomutação para os operadores $c_{\underline{k}\mu}$ sejam da forma $\{c_{\underline{k}\mu}, c_{\underline{k}'\mu'}^{\dagger}\} = \frac{2}{N} \delta_{\underline{k}\underline{k}'} \delta_{\mu\mu'}$. Pode-se, então, mostrar facilmente que os resultados obtidos, usando-se a notação de Kondo e com uma densidade de estados $\rho \equiv \sum_{\underline{k}} \delta(\epsilon - \epsilon_{\underline{k}}) = N/2D$, são os mesmos quando calculados usando-se a notação de Wilson e com uma "densidade de estados" $\rho = 1/D$. Em particular pode-se mostrar que os operadores $c_{\epsilon\mu}$ e $d_{\epsilon\mu}$ definidos nas equações (2-12) e (2-14) preservam as relações de anticomutação, em ambas as notações.
25. As transformações usadas para escrever o Hamiltoniano de relaxação na forma da Eq. (2.28) são similares àquelas da Ref. 7 para tratar o problema Kondo no caso de duas impurezas interagentes.
26. WILSON, K.G., Adv. Math. 16, 170 (1975).

27. WINTER, J., Magnetic Resonance in Metals, W. Marshall e D. H. Wilkinson, eds. (Oxford University Press, London, 1971), p. 48.
28. Ver seção 8 da Ref. 4
29. Ref. 12, p. 124.