Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos
Departamento de Física e Informática

EXPANSÃO PERTURBATIVA REGULARIZADA
PARA O
EFEITO KONDO

Necernias Alves de Lima

*Dissertação apresentada ao Instituto de Física de São Carlos,
Universidade de São Paulo, para a obtenção do Título de
Mestre em Física Básica.*

OK

Orientador: Prof. Dr. Valter Luiz Líbero

São Carlos
1998

IFSC-USP **SERVIÇO DE BIBLIOTECA™**
INFORMAÇÃO

Lima, Neemias Alves de
Expansão perturbativa regularizada para o efeito Kondo
/Neemias A. de Lima - São Carlos, 1998.
71 p.

Dissertação (Mestrado) - Instituto de Física de São Carlos, 1998.

Orientador: Prof. Dr. Valter Luiz Líbero

1. Regularização de expansão perturbativa. 2. Efeito Kondo.
I. Título

UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO

Instituto de Física de São Carlos

Av. Dr. Carlos botelho, 1465
CEP 13560-250 - São Carlos - SP
Brasil

Fone (016) 274-3444
Fax (016) 272-2218

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE
NEEMIAS ALVES DE LIMA APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO
CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 01 DE ABRIL DE 1998.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Valter Luiz Libero/IFSC-USP

Prof. Dr. Reginaldo de Jesus Napolitano/IFSC-USP

Profa. Dra. Helena Maria Petrilli/IF-USP

Agradecimentos

É um prazer expor meu apreço ao Prof. Valter Luiz Líbero por sua excelente orientação e amizade, aos Profs. Luiz Nunes de Oliveira e Lidério C. Ioriatti Jr. pelas valiosas discussões, e a todos demais docentes do IFSC que contribuíram para a minha formação acadêmica.

Também sou grato aos Pós-graduandos e graduandos que através do diálogo estiveram abertos à socialização do conhecimento. Particularmente aos colegas de grupo Luis Roberto Ramos, Marcelo Ferreira, Vivaldo Leiria Jr. e Cíntia Aguiar pelas proveitosas discussões. Em especial ao João Vítor que muito contribuiu para o melhoramento e impressão deste trabalho.

Aos membros da comissão julgadora, o Prof. Dr. Reginaldo de Jesus Napolitano /IFSC-USP e a Profª. Dra. Helena Maria Petrilli /IF-USP, pelas várias sugestões que tornaram mais didática a exposição deste trabalho.

Finalmente, um “Muito obrigado” à Ester, secretária do grupo de teoria; à Wladerez, Beth e Cristina, da seção de alunos; ao Ítalo, do setor da gráfica; e às bibliotecárias, pela simpatia e prestatividade com que servem os estudantes deste Instituto de Física.

Ao Prof. Janey A. Daccach do ICMSC

Este trabalho foi financiado pela **FAPESP**

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA •
INFORMAÇÃO

Índice

Lista de Figuras	iii
Resumo	v
Abstract	vi
1 Introdução	
1.1 Breve introdução histórica	1
1.2 Objetivo e organização deste trabalho	4
2 O Efeito Kondo	
2.1 O mínimo na resistividade	10
2.2 A explicação de Kondo	11
3 A Abordagem do Grupo de Renormalização Numérico (GRN) para o Modelo de Kondo	
3.1 O Hamiltoniano de Kondo	14
3.2 Transformação para a representação de energia	16
3.3 Discretização logarítmica	19
3.4 Tridiagonalização do Hamiltoniano da banda de condução e seu truncamento	22
3.5 Transformação do GRN e pontos fixos	24
3.6 Diagonalização do Hamiltoniano da banda de condução	27

4 Expansão Perturbativa Regularizada da Susceptibilidade - Método de Wilson	
4.1 O procedimento de Wilson para regularizar a expansão perturbativa da susceptibilidade	32
5 O Método Generalizado do Grupo de Renormalização Numérico e um Procedimento Alternativo para Regularizar a Expansão Perturbativa da Susceptibilidade	
5.1 O parâmetro z de discretização	43
5.2 Procedimento alternativo para regularizar a susceptibilidade	48
5.3 O resultado de Kondo para a susceptibilidade a partir da expansão perturbativa regularizada	54
6 Conclusão e Sugestões	56
Apêndices	
A Expansão perturbativa para a susceptibilidade até segunda ordem em J	58
B Obtenção do Hamiltoniano de Kondo	63
C Expansão perturbativa da energia do primeiro estado excitado de H_N	66
Bibliografia	70

Lista de Figuras

1.1 Discretização logarítmica da banda de condução	6
1.2 Resultados de $k_B T \chi(T)$ versus T / T_K para o modelo de Kondo	8
1.3 Discretização logarítmica da banda de condução envolvendo o parâmetro adicional z definido no intervalo $0 < z \leq 1$	8
2.1 Resistividade como função da temperatura para Cu com 0.05, 0.1 e 0.2% de Fe como impureza	11
2.2 A resistividade de $AuFe$, $AuCr$ e $AuMn$ em baixa temperatura	12
3.1 Processos de espalhamento de um elétron de condução com momento inicial $\vec{k}$ e spin $\mu = \uparrow$ ou $\downarrow$, devido a uma impureza magnética localizada	15
3.2 Definição do versor $\hat{k}$	16
3.3 Modelo de banda de condução	18
3.4 Discretização logarítmica da banda de condução	20
3.5 Invariância da banda de condução por mudança de escala	20
3.6 Estágios sucessivos na diagonalização iterativa	25
3.7 Exemplos de estados de muitos corpos construídos a partir dos estados de partícula independente de H_N^{BC}	29

3.8 Etapas da abordagem do grupo de renormalização numérico (GRN) para modelos de impurezas	30
4.1 Ilustração do acoplamento de uma impureza localizada (spin $\vec{S}$) com a banda de condução (spin $\vec{s}$) para o estado de partícula independente de menor energia . .	33
4.2 Ilustração da dependência implícita do parâmetro de regularização $E(N)$ com a temperatura T	35
4.3 Dependência dos coeficientes A e B com o parâmetro de truncamento N . . .	36
5.1 Discretização logarítmica da banda de condução envolvendo o parâmetro adicional z definido no intervalo $0 < z \leq 1$	43
5.2 Cadeia linear Tight-Binding equivalente para o modelo de Kondo	47
5.3 $k_B T \chi(T)$ vs T / T_K para o Hamiltoniano de Kondo de spin $1/2$	53

Resumo

Nas últimas duas décadas a teoria dos sistemas eletrônicos correlacionados teve enorme progresso, que sustentou o paralelo desenvolvimento da pesquisa experimental dos sistemas de férmions pesados. Dada a complexidade do problema proposto pelas correlações fortes, diversas técnicas complementares de cálculo foram desenvolvidas no período. O presente plano se propõe a explorar uma extensão de uma das mais antigas, a técnica do grupo de renormalização numérico (GRN), tratando perturbativamente o modelo de Kondo para uma impureza magnética em um hospedeiro metálico. É bem conhecido que a expansão perturbativa de propriedades físicas, como a susceptibilidade, em termos do acoplamento de troca diverge logarithmicamente próxima da temperatura de Kondo. A abordagem do GRN para isto considera a transformação *discreta*,

$$T[H_N] = H_{N+1},$$

onde $\{H_N\}$ é uma sequência de Hamiltonianos. Neste trabalho, para regularizar a expansão da susceptibilidade, usamos um procedimento alternativo considerando a transformação *contínua* análoga,

$$T_{\delta z}[H_N(z)] = H_N(z + \delta z),$$

onde z é um parâmetro arbitrário que generaliza a discretização logarítmica do GRN. Ao contrário do procedimento de Wilson, nós esperamos que este novo procedimento possa ser mais facilmente aplicável a Hamiltonianos mais complexos, complementando a diagonalização numérica.

Abstract

In the last two decades the theory of electronic correlated systems has had an enormous progress, which has sustained the parallel development of the experimental research in heavy fermion systems. Given the complexity imposed by the strong correlations, several techniques appeared. The present work explores an extension of one of the oldest, the Numerical Renormalization Group (NRG), treating perturbatively the Kondo model for a magnetic impurity in a metallic host. It is well known that perturbative expansion of physical properties, like susceptibility, in terms of the exchange coupling diverges logarithmically near the Kondo temperature. The NRG approach for this consider the *discrete* transformation,

$$T[H_N] = H_{N+1},$$

where H_N is a sequence of Hamiltonians. In this work we use an alternative procedure to regularize the expansion, using an analogous *continuum* transformation

$$T_{\delta z}[H_N(z)] = H_N(z + \delta z),$$

where z is an arbitrary parameter which generalizes the NRG logarithmic discretization. Unlike Wilson's procedure, we hope this new one can be easily applicable to more complex Hamiltonians, complementing the numerical diagonalization.

1

Introdução

1.1 Breve introdução histórica⁽¹⁾

Nos últimos trinta e cinco anos tem ocorrido um desenvolvimento significativo na teoria de impurezas magnéticas em metais. Por impurezas magnéticas nós nos referimos àquelas impurezas que contribuem com o termo Curie-Weiss para a susceptibilidade em altas temperaturas,

$$\chi \approx \frac{C}{T + \theta} \quad \text{para } T > \theta,$$

onde C e θ são constantes e T é a temperatura. Impurezas que apresentam esta dependência com a temperatura são oriundas das séries de elementos de transição 3d ou das séries de terras raras 4f na tabela periódica. Exemplos bem estudados são Fe em Cu , e Ce em $LaAl_2$ e LaB_6 . As questões básicas são: como tal momento magnético sobrevive na vizinhança metálica? Como ele afeta os elétrons de condução do metal hospedeiro? Experimentalmente é observado que tais impurezas dão contribuições anômalas para várias propriedades metálicas.

Uma dessas contribuições anômalas tem sido conhecida desde o começo dos anos 30: é a observação de um mínimo na resistividade de alguns metais (na maioria dos metais a resistividade diminui monotonicamente com a diminuição da temperatura). A razão para este mínimo não era conhecida naquele tempo. Só mais

tarde reconheceu-se que era um efeito de impureza magnética, dependendo da concentração da mesma. O mais significativo avanço na teoria de impurezas magnéticas só veio em 1964 com a explicação deste efeito por J. Kondo.⁽²⁾

Nos anos 50, do trabalho de J. Friedel e colaboradores surgiu o importante conceito de “estados virtuais ligados”. Uma formulação diferente dessa idéia foi colocada mais avante por P. W. Anderson (1963), numa versão agora conhecida como modelo de Anderson, que contém, além de outros termos, uma correlação U de curto alcance entre os elétrons localizados. Ela é necessária para explicar a observação de momentos magnéticos localizados. O cálculo de Kondo para a resistividade, que visava explicar o mínimo, foi baseado num modelo onde é suposto que já existe momento magnético local, associado a um spin S , que está acoplado com os elétrons de condução via uma interação de troca J . Este modelo é conhecido como modelo s-d, e pode ser deduzido a partir do modelo de Anderson num regime apropriado de parâmetros. Kondo (1964) mostrou, usando teoria de perturbação até terceira ordem no acoplamento de troca J antiferromagnético ($J < 0$), que esta interação leva a um espalhamento singular dos elétrons de condução próximos ao nível de Fermi, e a uma contribuição $\ln T$ para a resistividade que, adicionada à contribuição de fônon, é suficiente para explicar o mínimo de resistividade observado em baixa temperatura.

No entanto, existiam dificuldades com a teoria. Como o termo $\ln T$ diverge quando $T \rightarrow 0$, ficou claro que o cálculo perturbativo de Kondo não poderia ser válido em temperaturas baixas. Uma teoria mais abrangente era necessária. A busca por tal teoria tornou-se conhecida como “Problema Kondo” e atraiu grande interesse teórico no fim da década de 60 e início dos anos 70. Uma extensão da abordagem perturbativa para tratar esta divergência logarítmica, empregando técnicas de muitos corpos desenvolvidas nos anos 50 e 60, provou ser inadequada. Ao calcular a resistividade, no caso antiferromagnético, esta extensão levou a uma divergência para certa temperatura finita T_K , rotulada de temperatura Kondo. Embora a teoria perturbativa providenciasse uma boa descrição dos sistemas de impureza magnética para $T \gg T_K$, ela não pode ser estendida para a região $T \ll T_K$. O desafio era, portanto, encontrar uma técnica não-perturbativa para prever o comportamento para $T < T_K$. Os modelos básicos, o modelo s-d e o de Anderson, tinham apenas uma

interação local de dois corpos e se aparentavam simples o bastante para ser possível encontrar soluções exatas. Daí o grande apelo teórico do problema.

Resultados experimentais durante este período providenciaram algumas pistas para a teoria. Devido às interações inter impurezas, não era fácil determinar o comportamento associado a uma única impureza. Eliminação cuidadosa dessas interações revelou que as contribuições da impureza para as propriedades termodinâmicas e de transporte davam leis de potência em T .

A ferramenta teórica para entender este resultado foi introduzida por Anderson no fim dos anos 60. A idéia chave foi a de escalonamento. Anderson e colaboradores mostraram que se as excitações virtuais de maior ordem eram eliminadas perturbativamente para dar um modelo efetivo válido em escalas de baixa energia, o acoplamento efetivo entre o momento local e os elétrons de condução aumentava. Através de analogias com outros sistemas, Anderson conjecturou que se este escalonamento continuasse até às menores escalas de energia, aquelas que determinam o comportamento do sistema no regime $T \ll T_K$, o acoplamento aumentaria indefinidamente, $J \rightarrow -\infty$. Esta forte interação implicaria num estado fundamental em que a impureza estaria ligada a um elétron de condução no estado singlete. Devido à esta blindagem, o sistema teria um comportamento não-magnético e uma susceptibilidade finita em $T \rightarrow 0$. As fracas interações residuais, devido às excitações virtuais para o estado tripleto, que pertenceria à escala de menor energia, poderiam então explicar as leis de potência observada.

A importante contribuição de K.G. Wilson (1974, 1975), que foi reconhecida com o prêmio Nobel em 1982, foi inventar uma maneira não-perturbativa, o *grupo de renormalização numérico (GRN)*, de confirmar essa hipótese. Wilson tomou a idéia de grupo de renormalização da teoria de campo e a idéia de escalonamento da matéria condensada e construiu uma poderosa ferramenta que aplicou inicialmente a problemas de transição de fase, particularmente ao cálculo de expoentes críticos, e então, mais tarde, no problema Kondo.⁽³⁾ Wilson obteve resultados definitivos para o estado fundamental e comportamento em baixa temperatura para o modelo s-d com spin $1/2$. O método foi também aplicado ao modelo de Anderson não degenerado.

Dois desenvolvimentos, um experimental e outro teórico, no fim dos anos 70 e início da década de 80, intensificou o interesse por este campo. O desenvolvimento

experimental estava relacionado ao estudo de ligas diluídas e concentradas com elementos de terras-raras tais como Cério e Itérbio. Estes sistemas dão anomalias similares ao comportamento típico de uma impureza.

O desenvolvimento teórico foi a descoberta da solução exata do modelo s-d com spin $1/2$ por N. Andrei e P. B. Wiegmann usando o *ansatz* de Bethe, uma hipótese primeiramente usada por H. A Bethe em 1931 para resolver o modelo unidimensional de Heisenberg. Esta abordagem deu resultados analíticos para o comportamento em baixa e alta temperatura, e um conjunto de equações integrais em que o comportamento do modelo poderia ser calculado em toda faixa de temperatura. Estes resultados confirmaram os cálculos de Wilson.

1.2 Objetivo e organização deste trabalho

O grupo de renormalização **numérico** é uma técnica poderosa na abordagem de Hamiltonianos de muitos corpos. É desejável, no entanto, que se tenha **fórmulas** para as quantidades de interesse, como calor específico, susceptibilidade, etc, ao menos em alguns regimes de trabalho. Isso é possível analisando-se os dados numéricos em torno dos pontos fixos da transformação do grupo de renormalização e com ajuda de expansões perturbativas das quantidades de interesse em termos dos acoplamentos que definem o modelo. Frequentemente essas expansões são divergentes (daí a necessidade do próprio grupo de renormalização numérico). A regularização das mesmas complementa o estudo numérico.

Esta dissertação, a primeira em nosso grupo a abordar especificamente este ponto, objetiva entender com detalhe o procedimento original de Wilson para a regularização da susceptibilidade e em seguida propor um procedimento alternativo. Com a esperança de que ele seja generalizado a outros modelos, esse novo procedimento nos parece ao menos mais justificável em vários aspectos. A seguir damos um resumo detalhado do procedimento de regularização.

A renormalização de quantidades físicas tem sido conhecida há muitos anos. Conceitos como carga efetiva ou massa efetiva de partículas são conseqüências de renormalizações. Tal conceito provém de acreditarmos que um resultado correto para

uma grandeza física é livre das divergências que uma série perturbativa inadequada introduz.

O modelo de Kondo, definido mais detalhadamente no Cap. 2, é descrito pelo Hamiltoniano⁽³⁾

$$H_K = \sum_{\vec{k}, \mu} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\mu}^+ c_{\vec{k}\mu} - 2J\vec{S} \cdot \vec{S}, \quad (1.1)$$

onde o primeiro termo é a energia cinética total da banda de condução, de relação de dispersão $\varepsilon_{\vec{k}}$, e o segundo termo representa a interação de um elétron de condução de spin $\vec{s}$ com uma impureza localizada de spin $\vec{S}$. A expansão perturbativa das propriedades físicas deste modelo em função da constante de troca J conduz à divergências logarítmicas. Por exemplo, a expansão perturbativa de $k_B T\chi(T)$, onde $\chi(T)$ é a susceptibilidade magnética de uma impureza (ver Apêndice A),

$$k_B T\chi(T) = \frac{1}{4} \{1 + 2\rho J + 4\rho^2 J^2 \ln(k_B T / D) + O((2\rho J)^3)\}, \quad (1.2)$$

diverge quando a temperatura $T \rightarrow 0$ devido ao termo $\ln(k_B T / D)$. Nessa expressão ρ é a densidade de estados no nível de Fermi e D a meia largura da banda de condução.

Essa expansão foi regularizada em 1975 por K. G. Wilson. Para isto ele abordou o Hamiltoniano (1.1) com a técnica do grupo de renormalização numérico. Nesta abordagem o Hamiltoniano de Kondo é conduzido a uma seqüência de Hamiltonianos truncados e redimensionados $\{H_N\}$, escrito numa base ortonormal de operadores discretos $\{f_{n\mu}\}$ definidos em termos de um parâmetro Λ que discretiza logaritmicamente a banda de condução, conforme ilustrado na Fig. 1.1. As transformações detalhadas no Cap. 3 levam ao seguinte Hamiltoniano H_N :

$$H_N = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \left[\sum_{n=0}^{N-1} \tilde{\varepsilon}_n (f_{n\mu}^+ f_{n+1\mu} + f_{n+1\mu}^+ f_{n\mu}) - \tilde{J} f_{0\mu}^+ \vec{\sigma}_{\mu\mu'} f_{0\mu'} \cdot \vec{S} \right], \quad (1.3)$$

onde os elementos de matriz $\tilde{\varepsilon}_n$ são definidas na Sec. 3.4 e $\tilde{J} = \tilde{J}(J)$. É importante salientar que todas as transformações que levaram H_K em H_N foram feitas de forma à *preservar toda a física relevante do modelo* referente à impureza. O parâmetro N não apenas serve de índice para a sequência de $\{H_N\}$, mas aparece explicitamente em cada Hamiltoniano H_N ; ele desempenha um papel muito importante no procedimento do GRN, permitindo que se defina a transformação do grupo de renormalização, necessária para se diagonalizar Hamiltonianos não quadráticos.

Figura 1.1 Discretização logarítmica da banda de condução. O parâmetro Λ deve ser maior que a unidade. Em cálculos numéricos, uma escolha típica é $\Lambda = 3$.

Utilizando o Hamiltoniano H_N , Wilson expandiu perturbativamente a susceptibilidade em função de $\tilde{J} = \tilde{J}(J)$, obtendo a série

$$k_B T \chi(T) = \frac{1}{4} + Y_1(N) \tilde{J} + Y_2(N) \tilde{J}^2 + Y_3(N) \tilde{J}^3 + O(\tilde{J}^4), \quad (1.4)$$

onde a temperatura no procedimento do grupo de renormalização numérico é definida em termos do parâmetro de truncamento discreto N como $T \sim \Lambda^{-N/2}$, ver Eqs. (3.14) e (3.15). Os coeficientes $Y_2(N)$ e $Y_3(N)$ divergem a baixas temperaturas, ou seja, quando $N \rightarrow \infty$.

Em seguida, Wilson, considerou o primeiro estado excitado do Hamiltoniano (1.3) e calculou a sua energia E_1 em função de $\tilde{J} = \tilde{J}(J)$,

$$E_1(N) = \eta_1 + R_1 \tilde{J} + R_2(N) \tilde{J}^2 + R_3(N) \tilde{J}^3 + R_4(N) \tilde{J}^4 + O(\tilde{J}^4), \quad (1.5)$$

cujos coeficientes R_i , com exceção de R_1 , também são divergentes quando $N \rightarrow \infty$. Aqui η_1 é o valor de $E_1(N)$ para $J = 0$. Daí, Wilson (i) inverteu esta série, expressando $\tilde{J}$ em função de $E \equiv \eta_1 - E_1$, e (ii) escreveu $E(N+2)$ em função de $E(N)$ obtendo uma equação de diferenças bem comportada (ou seja, seus coeficientes não divergem, mesmo no limite $N \rightarrow \infty$),

$$E(N+2) = E(N) + AE^2(N) + BE^3(N) + CE^4(N). \quad (1.6)$$

Transformando numa equação diferencial, Wilson obteve uma equação implícita para $E(N)$. Finalmente, ele aproveitou a expressão de $\tilde{J}$ em função de $E(N)$, obtida no passo (i), para escrever χ em função de $E(N)$

$$k_B T \chi(T) = \frac{1}{4} \{1 + F E(N) + G E^2(N) + H E^3(N) + O(E^4(N))\}, \quad (1.7)$$

que é a expansão regularizada para a susceptibilidade: os coeficientes F , G , e H não divergem com N . A partir desta equação e da solução da equação diferencial obteve uma expressão (implícita) para χ em função da temperatura. Combinado com os resultados numéricos da diagonalização do Hamiltoniano H_N , esse procedimento resolveu o modelo Kondo de uma impureza (Fig. 1.2).

Infelizmente, a solução da equação de diferenças finitas é uma passagem de difícil reprodução quando se estudam Hamiltonianos mais complexos. Porém, com a generalização do grupo de renormalização numérico (GRN) feita por Yoshida⁽⁴⁾ e colaboradores, em 1990, surgiu a possibilidade de se estender este tratamento aos casos mais complicados. Esta dissertação tem como objetivo fundamentar tal possibilidade.

Figura 1.2 Resultados de $k_B T \chi(T)$ versus T / T_K para o modelo de Kondo.

No GRN generalizado (ou método z) a sequência de Hamiltonianos truncados e redimensionados equivalentes à Eq. (1.3) é

$$H_N(z) = \Lambda^{\frac{N-1}{2}+z-1} \left[\sum_{n=0}^{N-1} \tilde{\varepsilon}_n(z) (f_{n\mu}^+ f_{n+1\mu} + f_{n+1\mu}^+ f_{n\mu}) - \tilde{J} f_{0\mu}^+ \vec{\sigma}_{\mu\mu'} f_{0\mu'} \cdot \vec{S} \right], \quad (1.8)$$

onde o parâmetro de generalização, z , é uma variável contínua definida no intervalo $0 < z \leq 1$, e que redefine a discretização logarítmica da banda de acordo com a Fig. 1.3.

Figura 1.3 Discretização logarítmica da banda de condução envolvendo o parâmetro adicional z definido no intervalo $0 < z \leq 1$. A discretização original proposta por Wilson é recuperada fazendo $z = 1$.

Nesta dissertação mostraremos que, devido a sua natureza contínua, o parâmetro z gera um procedimento alternativo mais elegante para regularizar (1.4), curva 2 da Fig. 1.2. De fato, em lugar de escrever $E(N+2)$ em função de $E(N)$, como expressa a Eq. 1.6, e então obter uma equação de diferenças finitas para $E(N)$ (que Wilson escreve como derivada em N , apesar de N ser discreto), obtemos diretamente uma equação diferencial na variável z para $E(N, z)$. A solução dessa equação leva a uma expressão que determina χ em função de T , que coincide com os resultados de Wilson.

A fim de mostrar com detalhe o que acabamos de descrever, dividimos esse trabalho em seis capítulos e três apêndices. O primeiro capítulo, no qual estamos agora, fornece uma breve introdução histórica do “problema Kondo”, além de discorrer sobre o objetivo dessa dissertação. O capítulo 2 é uma continuação desse capítulo, porém ele situa melhor o leitor no contexto do problema que queremos estudar.

No capítulo 3 apresentamos a abordagem do grupo de renormalização numérico para o Hamiltoniano de Kondo, que culmina na diagonalização numérica desse Hamiltoniano. Com os resultados do capítulo 3, o capítulo 4 descreve a prescrição de Wilson para regularizar a expansão perturbativa da susceptibilidade magnética de uma impureza. No capítulo 5, baseando-se na generalização do grupo de renormalização numérico e seguindo a prescrição de Wilson, desenvolvemos uma maneira alternativa de regularizar esta mesma expansão. No capítulo 6 temos a conclusão desse trabalho.

Quanto aos apêndices, no A calculamos a expansão perturbativa para a susceptibilidade até segunda ordem em J , Eq. (1.2), no B obtemos o Hamiltoniano de Kondo e no apêndice C temos o cálculo da expansão perturbativa, até segunda ordem em $\tilde{J}$, do primeiro estado excitado do Hamiltoniano H_N , Eq.(1.3).

2

O Efeito Kondo

2.1 O mínimo na resistividade

A resistividade dos metais em geral decresce monotonicamente com a diminuição da temperatura. Porém, em 1930, Meissner e Voigt⁽⁵⁾ observaram que a resistividade do ouro aumentava quando a temperatura, abaixo de $10^{\circ}K$, diminuía. Uma vez que a resistividade em temperaturas elevadas diminui com o decréscimo da temperatura, ocorre um mínimo na curva resistividade *versus* temperatura. Desde então este fenômeno tem sido observado em muitas substâncias, principalmente em ligas, na região de $10^{\circ} \sim 20^{\circ}K$. A Figura 2.1 ilustra este efeito para ligas diluídas de ferro (Fe), a impureza, em cobre (Cu).

Resultados experimentais posteriores estabeleceram que o mínimo na resistividade está intimamente relacionado com o fato da impureza ser magnética. Impurezas que mostram este comportamento são oriundas das séries de elementos de transição 3d ou das séries de terras-raras 4f na tabela periódica. Ainda, outros resultados^{(7),(8)} indicaram que este efeito é uma propriedade da interação da banda de condução com impurezas isoladas, ou seja, o efeito não tem origem em interações impureza-impureza.

Figura 2.1 Resistividade como função da temperatura para Cu com 0.05, 0.1 e 0.2% de Fe como impureza. O fenômeno do mínimo na resistividade é claramente evidente.⁽⁶⁾

Além da resistividade, outras quantidades físicas também apresentam comportamento inesperado. O calor específico de uma liga 0.1% Fe em Cu, por exemplo, é maior do que o de Cu puro, sendo que a diferença apresenta um máximo na vizinhança de $5^\circ K$. Uma susceptibilidade magnética maior é também observada em baixa temperatura.

2.2 A explicação de Kondo

Utilizando o modelo s-d isotrópico,⁽²⁾ definido pela interação

$$H' = -2J \vec{s} \cdot \vec{S}, \quad (2.1)$$

onde $\vec{s}$ é o spin da banda de condução e $\vec{S}$ o spin da impureza, Kondo deu o primeiro passo importante na direção de entender o mínimo na resistividade. Através de um cálculo perturbativo ele mostrou que a contribuição magnética à resistividade é

$$\Delta\rho = c\rho_m[1 + 2\rho J \ln(k_B T / D) + \dots],$$

onde c é a concentração da impureza, ρ_m o primeiro termo de espalhamento de Born, J a constante de acoplamento do modelo s-d, ρ a densidade de estados na superfície de Fermi e D a meia largura da banda de condução.

Adicionando este resultado à contribuição da rede para a resistividade e providenciando que a interação do spin do elétron da banda com o spin da impureza fosse antiferromagnética, $J < 0$, Kondo mostrou que a resistividade tinha um mínimo.

Os resultados experimentais para ligas suficientemente diluídas, tal que as interações entre as impurezas sejam desprezíveis, estão em boa concordância com a teoria de Kondo sobre uma extensa faixa de temperatura. A dependência logarítmica tem sido verificada para uma ampla variedade de sistemas e é aceita como um fato experimental. Como um típico exemplo apresentamos na Figura 2.2 dados para os sistemas $AuFe$, $AuCr$ e $AuMn$. Cálculos de outras propriedades físicas fornecem resultados com uma dependência logarítmica similar. ^{(10),(11)}

Figura 2.2 A resistividade de $AuFe$, $AuCr$ e $AuMn$ em baixa temperatura. As curvas são lineares como função de $\ln T$, de acordo com a dependência logarítmica predita por Kondo. ⁽⁹⁾

Apesar do cálculo perturbativo para este modelo explicar o efeito Kondo, como passou a ser chamado o fenômeno do mínimo na resistividade, a teoria perturbativa sucumbiu devido à presença de divergências em propriedades termodinâmicas e de transporte em temperatura finita. Por exemplo, a susceptibilidade magnética da impureza é ⁽¹²⁾

$$k_B T \chi(T) = \frac{1}{4} \left\{ 1 + \frac{2\rho J}{1 - 2\rho J \ln(k_B T / D)} + O((2\rho J)^3) \right\}. \quad (2.2)$$

Quando $T \rightarrow 0$ no caso ferromagnético, $J > 0$, caímos na lei de Curie. Porém, para o caso antiferromagnético, $J < 0$, ocorre divergência a uma temperatura T_K ,

$$k_B T_K \sim D \exp(-1/|2\rho J|) \quad (2.3)$$

conhecida como *temperatura de Kondo*. Também a entropia e o calor específico de uma impureza apresentam forte divergência em $T = T_K$ no caso antiferromagnético.

Claramente a teoria perturbativa falha para este caso. O desafio de encontrar uma solução satisfatória para este problema estimulou uma enorme quantidade de pesquisa nos anos 60 e 70. O objetivo teórico era encontrar uma técnica não-perturbativa para regularizar estas divergências. Este objetivo foi alcançado com a técnica do *grupo de renormalização numérico* concebida por K. G. Wilson.⁽³⁾ Este método será descrito no próximo capítulo no contexto do modelo de Kondo.

3

A Abordagem do Grupo de Renormalização Numérico para o Modelo de Kondo

A técnica do grupo de renormalização numérico (GRN), através de várias etapas, transforma o Hamiltoniano do modelo em um Hamiltoniano numericamente tratável. Neste capítulo discutiremos com detalhe cada uma dessas etapas. No final do capítulo há um fluxograma que resume todo este procedimento. O leitor familiarizado com a técnica do GRN poderá ir direto a esse fluxograma.

3.1 O Hamiltoniano de Kondo

Como sabemos do capítulo anterior, o modelo de Kondo para explicar o mínimo na resistividade de ligas magnéticas diluídas é o modelo s-d isotrópico⁽²⁾ (ver Apêndice B),

$$H' = -J \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \{ (c_{\vec{k}\uparrow}^+ c_{\vec{k}'\uparrow} - c_{\vec{k}\downarrow}^+ c_{\vec{k}'\downarrow}) S_z + c_{\vec{k}\uparrow}^+ c_{\vec{k}'\downarrow} S_- + c_{\vec{k}\downarrow}^+ c_{\vec{k}'\uparrow} S_+ \},$$

onde $c_{\vec{k}\mu}$ aniquila um elétron de condução com momento $\vec{k}$ e componente z de spin $\mu = \uparrow (+1/2)$ ou $\downarrow (-1/2)$, e $\vec{S}$ representa o spin localizado ($S = 1/2$), com $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$.

Esse Hamiltoniano descreve um processo de espalhamento entre os elétrons de condução e a impureza magnética localizada. A figura abaixo mostra os quatro possíveis tipos de espalhamento aos quais um elétron de condução está sujeito ao interagir com a impureza. Se o elétron de condução e a impureza estiverem com spins iguais, Figura 3.1-a e b, no espalhamento não haverá troca de spin, já que o spin total se conserva. Porém, se os spins forem diferentes, Figura 3.1-c e d, poderá haver espalhamento com troca de spin.

Suponhamos agora que dois elétrons, ambos com spin $\uparrow$, irão interagir com a impureza inicialmente de spin $\downarrow$. O primeiro elétron ao ser espalhado pode inverter o spin da impureza, que então passaria a ser $\uparrow$. Caso isto aconteça o segundo elétron, entretanto, não pode reinverter o spin da impureza, pois isto violaria a conservação de spin. A moral da história é que os elétrons de condução não são independentes e, portanto, a banda de condução deve ser tratada como um sistema de muitos elétrons.⁽²⁾

Figura 3.1 Processos de espalhamento de um elétron de condução com momento inicial $\vec{k}$ e spin $\mu = \uparrow$ ou $\downarrow$ devido a uma impureza magnética localizada. O pontilhado (- - -) representa a interação do spin localizado ($\times$) com o elétron de condução ($\rightarrow$).

Utilizando matrizes de Pauli $\vec{\sigma}$ para compactar H' , e adicionando o Hamiltoniano H^{BC} da banda de condução, podemos escrever o Hamiltoniano de Kondo como

$$H_K = \sum_{\vec{k}, \mu} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\mu}^{\dagger} c_{\vec{k}\mu} - J \sum_{\mu, \mu'} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} c_{\vec{k}\mu}^{\dagger} \vec{\sigma}_{\mu\mu'} c_{\vec{k}'\mu'} \cdot \vec{S}, \quad (3.1)$$

onde $\varepsilon_{\vec{k}}$ é a energia cinética de um elétron de condução com momento $\vec{k}$.

3.2 Transformação para a representação de energia

Para pôr em prática a técnica do GRN precisamos transformar o Hamiltoniano de Kondo, que está na representação de momento, para a representação de energia. O primeiro passo é levar o Hamiltoniano H_K para o espaço $\vec{k}$ contínuo. Se $a_{\vec{k}\mu}$ denota o operador no contínuo, então

$$\sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\mu}^+ c_{\vec{k}\mu} \rightarrow \int \varepsilon_{\vec{k}} a_{\vec{k}\mu}^+ a_{\vec{k}\mu} d^3k ;$$

$$\sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}\mu}^+ \rightarrow \left(\frac{V}{8\pi^3} \right)^{1/2} \int a_{\vec{k}\mu}^+ d^3k ,$$

onde V é o volume do sistema. Supondo que a superfície de Fermi tenha simetria esférica, isto é, $\varepsilon_{\vec{k}}$ dependa apenas de $|\vec{k}|$, estendida em energia de $-D$ a D , expandiremos $a_{\vec{k}\mu}$ numa série de harmônicos esféricos,

$$a_{\vec{k}\mu} = \frac{1}{k} \sum_{lm} a_{klm\mu} Y_{lm}(\theta, \varphi) ,$$

Figura 3.2 Definição do versor $\hat{k}$. A sua direção é a do momento $\vec{k}$ de um elétron da banda de condução que está interagindo com a impureza situada na origem do sistema de coordenadas esféricas.

sendo θ e φ definidos na Figura 3.2.

Os operadores $a_{klm\mu}$ são obtidos invertendo-se essa equação, resultando

$$a_{klm\mu} = k \int Y_{lm}^*(\theta, \varphi) a_{\vec{k}\mu} d\Omega_{\vec{k}} .$$

É fácil ver que eles obedecem à relação de anticomutação de férmions

$$\{a_{klm\mu}, a_{k'l'm'\mu'}^+\} = \delta(k - k') \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta_{\mu\mu'} .$$

Em termos desses operadores, e desde que $\varepsilon_{\vec{k}} = \varepsilon_k$, temos

$$\int \varepsilon_{\vec{k}} a_{\vec{k}\mu}^+ a_{\vec{k}\mu} d^3k = \sum_{lm} \int \varepsilon_k a_{klm\mu}^+ a_{klm\mu} dk \quad (3.2)$$

e

$$\left(\frac{V}{8\pi^3}\right)^{1/2} \int a_{\vec{k}\mu}^+ d^3k = \left(\frac{V}{2\pi^2}\right)^{1/2} \int k a_{k00\mu}^+ dk . \quad (3.3)$$

A Eq. (3.3) mostra que, como consequência da simetria esférica do acoplamento banda-impureza, apenas o estado $l = 0$ se acoplará à impureza. Os demais estados são livres e desde que estamos interessados em calcular apenas a contribuição da impureza às propriedades do sistema, podemos ignorá-los.

Nós introduziremos a representação de energia definindo o operador $a_{\varepsilon\mu} = (d\varepsilon / dk)^{-1/2} a_{k00\mu}$ que aniquila um elétron no estado $l = 0$ com energia ε ($= \varepsilon_k$) e spin μ . Assim

$$\{a_{\varepsilon\mu}, a_{\varepsilon'\mu'}^+\} = (d\varepsilon / dk)^{-1} \delta(k - k') \delta_{\mu\mu'} = \delta(\varepsilon - \varepsilon') \delta_{\mu\mu'} , \quad (3.4)$$

e portanto,

$$\int \varepsilon_k a_{k00}^+ a_{k00} dk = \int_{-D}^D \varepsilon a_{\varepsilon\mu}^+ a_{\varepsilon\mu} d\varepsilon, \quad (3.5)$$

e

$$\left(\frac{V}{2\pi^2} \right)^{1/2} \int k a_{k00} dk = \int_{-D}^D \sqrt{\rho(\varepsilon)} a_{\varepsilon} d\varepsilon, \quad (3.6)$$

onde $-D$ e D são os limites de energia da banda de condução, suposta aqui simétrica em relação ao nível de Fermi, Fig. 3.3, $\rho(\varepsilon)$ é a densidade de estados por spin, dada por $\rho(\varepsilon) = \frac{V}{2\pi^2} k^2 (dk / d\varepsilon)$. Assim, o Hamiltoniano H_K na representação de energia é

$$H_K = \sum_{\mu} \int_{-D}^D \varepsilon a_{\varepsilon\mu}^+ a_{\varepsilon\mu} d\varepsilon - J \sum_{\mu, \mu'} \int_{-D}^D \int_{-D}^D d\varepsilon d\varepsilon' \sqrt{\rho(\varepsilon)\rho(\varepsilon')} a_{\varepsilon\mu}^+ \vec{\sigma}_{\mu\mu'} a_{\varepsilon'\mu'} \cdot \vec{S}.$$

Figura 3.3 Modelo de banda de condução. $-D$ e D são os limites de energia da banda, suposta simétrica em relação ao nível de Fermi $\varepsilon_F \equiv 0$.

Como desejamos estudar propriedades próximas à energia de Fermi tomaremos $\rho(\varepsilon) \equiv \rho(\varepsilon_F)$. A versão final do Hamiltoniano de Kondo, escrito em termos da variável adimensional $q \equiv \varepsilon / D$ e dos operadores fermiônicos $a_{q\mu} = \sqrt{D} a_{\varepsilon\mu}$, é

$$\frac{H_K}{D} = \sum_{\mu} \int_{-1}^1 k a_{q\mu}^+ a_{q\mu} dk - \frac{\rho J}{D} \sum_{\mu, \mu'} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 dq dq' a_{q\mu}^+ \vec{\sigma}_{\mu\mu'} a_{q'\mu'} \cdot \vec{S}, \quad (3.7)$$

sendo $\rho J / D$ o único parâmetro (adimensional) a entrar na teoria.

3.3 Discretização logarítmica

Para que o Hamiltoniano acima seja numericamente tratável devemos discretizar a banda de condução. Esta discretização deve (i) privilegiar as energias próximas do nível de Fermi, Figura 3.4, e (ii) preservar a invariância de escala da banda em torno de ε_F , Figura 3.5, já que temos um contínuo de energia. A discretização logarítmica preenche esses requisitos. Como é mostrado na Figura 3.4, introduzimos um parâmetro Λ (> 1) e dividimos o domínio $-1 < q < 1$, $q = \varepsilon / D$, em uma seqüência de intervalos onde o n -ésimo intervalo (para q positivo) é estendido de Λ^{-n-1} a Λ^{-n} .

Dentro de cada intervalo podemos construir um conjunto de funções de onda

$$\psi_{nl}(q) = \begin{cases} \frac{\Lambda^{n/2}}{(1 - \Lambda^{-1})^{1/2}} \exp(i\omega_n l q), & \text{se } \Lambda^{-n-1} < q < \Lambda^{-n}, \\ 0 & , \text{ fora do intervalo acima,} \end{cases} \quad (3.8)$$

com $\omega_n = 2\pi\Lambda^n / (1 - \Lambda^{-1})$ e l tomando todos valores inteiros de $-\infty$ a $+\infty$. As funções $\psi_{nl}(q)$ juntamente com $\psi_{nl}(-q)$ formam um conjunto completo, ortogonal e discreto de funções de onda para o domínio $-1 < q < 1$, para qualquer valor de $\Lambda > 1$. Podemos, portanto, expandir $a_{q\mu}$ nesta base:

$$a_{q\mu} = \sum_{n,l} \{a_{nl\mu} \psi_{nl}(q) + b_{nl\mu} \psi_{nl}(-q)\}.$$

Figura 3.4 Discretização logarítmica da banda de condução. O parâmetro Λ deve ser maior que a unidade. Em cálculos numéricos, uma escolha típica é $\Lambda = 3$. Note que esta discretização considera uma densidade maior de estados na vizinhança do nível de Fermi ε_F , dessa forma representando melhor o contínuo de energia nas proximidades de ε_F .

Figura 3.5 Invariância da banda de condução por mudança de escala. Ampliando a escala (a) dos níveis de energia próximos ao nível de Fermi ε_F por um certo fator (por exemplo, Λ^5), observamos que na nova escala (b) obtemos a mesma estrutura de níveis de energia próximos a ε_F . No topo da banda essa invariância não é preservada.

Os coeficientes $a_{nl\mu}$ e $b_{nl\mu}$ desta expansão formam um conjunto completo discreto de operadores de elétrons independentes que obedecem às regras padrão de anticomutação,⁽¹³⁾

$$\{a_{np\mu}, a_{n'p'\mu'}^+\} = \delta_{nn'} \delta_{pp'} \delta_{\mu\mu'}, \text{ etc.}$$

O Hamiltoniano da Eq. (3.7) pode agora ser expresso em termos dos operadores discretos $a_{nl\mu}$ e $b_{nl\mu}$ ao invés dos operadores $a_{q\mu}$ do contínuo. Podemos verificar os seguintes resultados:

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 q a_{q\mu}^+ a_{q\mu} dq &= \frac{(1 + \Lambda^{-1})}{2} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \sum_{n=0}^{+\infty} \Lambda^{-n} (a_{nl\mu}^+ a_{nl\mu} - b_{nl\mu}^+ b_{nl\mu}) \\ &+ \frac{1 - \Lambda^{-1}}{2\pi i} \sum_{l \neq l'=-\infty}^{+\infty} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\Lambda^{-n}}{l - l'} (a_{nl\mu}^+ a_{nl'\mu} - b_{nl\mu}^+ b_{nl'\mu}) \exp\left(\frac{2\pi i(l - l')}{1 - \Lambda^{-1}}\right), \end{aligned} \quad (3.9)$$

e

$$\int_{-1}^1 a_{q\mu} dq = (1 - \Lambda^{-1})^{1/2} \sum_{n=0}^{+\infty} \Lambda^{-n/2} (a_{n0\mu} + b_{n0\mu}). \quad (3.10)$$

Das equações (3.10) e (3.7) é claro que a impureza se acopla diretamente apenas aos operadores $a_{n0\mu}$ e $b_{n0\mu}$. Os operadores $a_{nl\mu}$ e $b_{nl\mu}$ com $l \neq 0$ devem ser considerados apenas porque o segundo termo na Eq. (3.9) os acopla aos operadores $a_{n0\mu}$ e $b_{n0\mu}$. Todavia, devido ao fator $(1 - \Lambda^{-1})/2\pi$, este acoplamento será pequeno se Λ for próximo de 1. Por isso, em primeira aproximação, desprezaremos estes acoplamentos. Para $\Lambda = 3$ não é óbvio que $a_{nl\mu}$ e $b_{nl\mu}$ (com $l \neq 0$) possam ser desprezados. Porém, é mostrado *a posteriori* que esta é realmente uma boa aproximação⁽³⁾. *

* Desconsiderar os termos proporcionais a $a_{nl\mu}$ e $b_{nl\mu}$, com $l \neq 0$, faz parte do procedimento do GRN.

Portanto, o Hamiltoniano de Kondo H_K na base $(a_{n\mu}, b_{n\mu})$, onde suprimimos o índice $l = 0$ dos operadores $a_{n0\mu}$, é dado por:

$$\frac{H_K}{D} \cong \frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1}) \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^{-n} (a_{n\mu}^+ a_{n\mu} - b_{n\mu}^+ b_{n\mu}) - \frac{2\rho J}{D} f_{0\mu}^+ \vec{\sigma}_{\mu\mu'} f_{0\mu'} \cdot \vec{S},$$

sendo a soma em μ subtendida. O operador $f_{0\mu}$ é definido como

$$f_{0\mu} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-1}^1 a_{q\mu} dk = [\frac{1}{2}(1 - \Lambda^{-1})]^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^{-n/2} (a_{n\mu} + b_{n\mu}). \quad (3.11)$$

Esses operadores obedecem à relação $\{f_{0\mu}, f_{0\mu'}^+\} = \delta_{\mu\mu'}$.⁽¹³⁾

3.4 Tridiagonalização do Hamiltoniano da banda de condução e seu truncamento

Por ser uma série infinita o Hamiltoniano da banda de condução projetado na base discreta $\{a_{n\mu}, b_{n\mu}\}$ é ainda inadequado para se trabalhar numericamente; precisamos truncar o Hamiltoniano. Para que o truncamento não afete o acoplamento da impureza com a banda de condução faremos uma transformação de base que preserve este acoplamento. A melhor transformação é aquela na qual na nova base $\{f_{n\mu}\}$ os operadores $f_{n\mu}$, definidos pela construção de Lanczos⁽³⁾, só se acoplam com seus vizinhos mais próximos. Nessa base, a banda de condução toma a forma tridiagonal

$$\frac{H_{BC}}{D} = \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n (f_{n\mu}^+ f_{n+1\mu} + f_{n+1\mu}^+ f_{n\mu}), \quad (3.12)$$

onde os coeficientes ε_n dependem de Λ e foram calculados analiticamente por Wilson⁽³⁾:

$$\varepsilon_n = \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} (1 - \Lambda^{-n-1}) (1 - \Lambda^{-2n-1})^{-1/2} (1 - \Lambda^{-2n-3})^{-1/2} \Lambda^{-n/2}.$$

Para grandes valores de n esse elemento de matriz se aproxima da forma assintótica

$$\varepsilon_n = \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} \Lambda^{-n/2} \quad (n \gg 1). \quad (3.13)$$

De acordo com a Eq. (3.13), ε_n diminui exponencialmente com n . Se estamos interessados em uma propriedade termodinâmica na temperatura T , então as energias muito menores do que $k_B T$ são irrelevantes. Segue-se que o Hamiltoniano da Eq. (3.12) pode ser truncado em $n = N - 1$, onde N é um inteiro tal que $\varepsilon_N \ll k_B T / D$. Como o erro introduzido pelo truncamento é independente do parâmetro J diz-se que a abordagem do GRN é não-perturbativa.

Para ser mais específico, para dado N definimos a energia

$$D_N = \frac{1}{2} (1 + \Lambda^{-1}) \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} D, \quad (3.14)$$

que é aproximadamente igual a $D\varepsilon_{N-1}$ (o símbolo D_N é um lembrete de que, para $N = 1$, esta energia é comparável à meia largura da banda, D), e escolhemos a temperatura T tal que

$$k_B T = D_N / \bar{\beta}, \quad (3.15)$$

onde $\bar{\beta}$ é uma constante pequena, igual a 0.1 por exemplo. Isso garante que ε_N é muito menor do que $k_B T / D$.

Enfim, o Hamiltoniano truncado é dividido pelo fator $\varepsilon_{N-1} = \Lambda^{-(N-1)/2} (1 + \Lambda^{-1}) / 2$, o qual define o Hamiltoniano escalonado e adimensional

$$H_N = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \left[\sum_{n=0}^{N-1} \tilde{\varepsilon}_n (f_{n\mu}^+ f_{n+1\mu} + f_{n+1\mu}^+ f_{n\mu}) - \tilde{J} f_{0\mu}^+ \tilde{\sigma}_{\mu\mu'} f_{0\mu'} \cdot \tilde{S} \right], \quad (3.16)$$

onde $\tilde{\varepsilon}_n = \frac{2}{1+\Lambda^{-1}} \varepsilon_n$ e $\tilde{J} = \frac{2}{1+\Lambda^{-1}} \frac{2\rho J}{D}$. Nesta forma, o menor coeficiente de Lanczos, $\Lambda^{\frac{N-1}{2}} \tilde{\varepsilon}_{N-1}$, é aproximadamente igual a 1. Quando N cresce, novos termos de condução são adicionados ao Hamiltoniano truncado, mas o escalamento assegura que cada novo termo é sempre da ordem da unidade. Desse modo, se não existisse impureza, as menores energias do Hamiltoniano truncado seriam independentes de N , isto é, invariantes por escala. Uma vez que o acoplamento efetivo $\Lambda^{\frac{N-1}{2}} \tilde{J}$ da impureza com a banda de condução aumenta com N , a impureza quebra essa invariância. Discutiremos isto na próxima seção.

3.5 Transformação do GRN e pontos fixos

É fácil ver que a sequência de Hamiltonianos H_N , Eq. (3.16), define a transformação T do grupo de renormalização dada por

$$H_{N+1} = T[H_N] = \Lambda^{1/2} H_N + \tilde{\varepsilon}_N (f_{N\mu}^+ f_{N+1\mu} + f_{N+1\mu}^+ f_{N\mu}) - E_{G,N+1}, \quad (3.17)$$

onde $E_{G,N+1}$ é escolhido tal que a energia do estado fundamental de H_{N+1} seja nula. Esta relação recursiva é o centro do GRN. Ela permite que partindo-se do Hamiltoniano H_0 , que em geral é simples, recursivamente possamos obter os auto-estados e níveis de energia de H_N , para qualquer N . Esse procedimento, ilustrado pela Figura 3.6, é vital quando H_N não for quadrático.

Um conceito fundamental do grupo de renormalização, muito importante na análise de resultados numéricos da diagonalização de H_N , é o do ponto fixo. Um ponto fixo H^* é um Hamiltoniano que permanece invariante sob a transformação $T: T[H^*] = H^*$. Embora, na prática, T não tenha quaisquer pontos fixos, a

transformação T^2 que leva H_N a H_{N+2} tem dois pontos fixos que podem ser obtidos pelo estudo dos casos limites $\tilde{J} = 0$ e $\tilde{J} = -\infty$. Para $\tilde{J} = 0$ o ponto fixo é o Hamiltoniano H_N^{BC} de elétrons livres

$$H_N^*(\tilde{J} = 0) = H_N^{BC} = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \sum_{n=0}^{N-1} \tilde{\epsilon}_n (f_{n\mu}^+ f_{n+1\mu} + f_{n+1\mu}^+ f_{n\mu}). \tag{3.18}$$

Por ser quadrático este Hamiltoniano pode ser diagonalizado exatamente.

Figura 3.6 Estágios sucessivos na diagonalização iterativa: (i) Os níveis de energia obtidos da diagonalização numérica de H_N . (ii) A aplicação dos operadores I_{N+1} (operador identidade), $f_{N+1\uparrow}^+$, $f_{N+1\downarrow}^+$ e $f_{N+1\uparrow}^+ f_{N+1\downarrow}^+$ a cada autovalor de H_N gera uma base de estados para diagonalizar H_{N+1} . (iii) Obtidos os autovalores de H_{N+1} o processo todo é repetido. Observe que o número de estados cresce geometricamente a cada iteração. Isso é contornado descartando-se os estados com energia acima de um corte pré-estabelecido.

Agora para $\tilde{J} = -\infty$, ou mais precisamente $\tilde{J} \ll -1$, a magnitude do termo proporcional a $\tilde{J}$ em H_N , Eq. (3.16), é muito maior que o restante do Hamiltoniano. Diagonalizando este termo e tratando o restante como perturbação obteremos que o estado de menor energia é um singlete (spin total 0). Ou seja, para $\tilde{J} = -\infty$, a impureza está totalmente acoplada em um estado singlete com um elétron do “orbital” $f_{0\mu}$ da banda de condução. Devido a esta blindagem a impureza e o “orbital” $f_{0\mu}$ estão efetivamente desacoplados do sistema e isso equivale, no nosso formalismo matemático, a tirar para fora de H_N os termos $f_{0\mu}^+ f_{1\mu}$ e $f_{1\mu}^+ f_{0\mu}$, como também substituir o termo proporcional a $\tilde{J}$ pelo valor de seu estado singlete. Então, o ponto fixo para $\tilde{J} = -\infty$ é

$$H_N^*(\tilde{J} \rightarrow -\infty) = \text{constante} + \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \sum_{n=1}^{N-1} \tilde{\epsilon}_n (f_{n\mu}^+ f_{n+1\mu} + f_{n+1\mu}^+ f_{n\mu}). \quad (3.19)$$

Novamente temos uma forma quadrática para diagonalizar, com apenas uma diferença do caso $\tilde{J} = 0$: existem N operadores $f_{n\mu}$ ao invés de $N+1$. De fato, a Eq. (3.19) é precisamente a mesma forma quadrática de $H_{N-1}(\tilde{J} = 0)$, a menos dos rótulos dos f . Como resultado, os autovalores do ponto fixo $H_N^*(\tilde{J} \rightarrow -\infty)$ são os mesmos do Hamiltoniano H_{N-1}^{BC} .

Quando $|\tilde{J}|$ é muito pequeno, o Hamiltoniano H_N não é ponto fixo de T^2 . Entretanto, quando N aumenta de $N_0(\tilde{J})$ até um certo $N_1(\tilde{J})$, os resultados numéricos mostram que os seus autovalores permanecem praticamente constantes e próximos dos autovalores do ponto fixo $H_N^*(\tilde{J} = 0)$; a partir daí eles começam a depender fortemente de N até que por fim, para grandes valores de N ($> N_2(\tilde{J})$), convergem para os autovalores do ponto fixo $H_N^*(\tilde{J} \rightarrow -\infty)$. Lembrando que a temperatura é proporcional a $\Lambda^{-N/2}$, Eqs. (3.14) e (3.15), estes resultados mostram que a termodinâmica em temperatura muito baixa (ou zero) para acoplamento fraco é muito similar à termodinâmica do acoplamento forte ($\tilde{J} = -\infty$) para alta temperatura.

No intervalo em que H_N é próximo de $H_N^*(\tilde{J}=0)$, por exemplo⁽³⁾ $39 < N < 51$ para $\tilde{J} = -0.024$, podemos tratar as propriedades termodinâmicas perturbativamente. Para $\tilde{J}$ suficientemente pequeno, este intervalo corresponde à temperaturas $T \gg T_K$ e $k_B T / D \ll 1$. Quando implementarmos os procedimentos de regularização vamos precisar dos autovalores e autovetores da banda livre, $H_N^*(\tilde{J}=0)$, que são obtidos na próxima seção.

3.6 Diagonalização do Hamiltoniano da banda de condução

Por ser quadrático, a diagonalização do Hamiltoniano da banda de condução não requer processos intrincados como o método iterativo que citamos na seção anterior. A forma quadrática pode ser escrita na forma matricial. Se f é o vetor $(f_{0\mu}, f_{1\mu}, \dots, f_{N\mu})$, então $H_N^{BC} = f^+ \overline{H}_N^{BC} f$, onde $\overline{H}_N^{BC}$ é a matriz

$$\overline{H}_N^{BC} = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \begin{pmatrix} 0 & \tilde{\varepsilon}_0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \tilde{\varepsilon}_0 & 0 & \tilde{\varepsilon}_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{\varepsilon}_1 & 0 & \tilde{\varepsilon}_2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{\varepsilon}_2 & 0 & \tilde{\varepsilon}_3 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \tilde{\varepsilon}_{N-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \tilde{\varepsilon}_{N-1} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

onde os elementos de matriz $\tilde{\varepsilon}_n$ foram apresentados na seção 3-4. Esta matriz é facilmente diagonalizada. Os resultados numéricos mostram que para N ímpar (> 9) e Λ genérico, os autovalores η_ℓ seguem a fórmula:⁽³⁾

$$\eta_\ell = \pm \Lambda^{|\ell|-1}, \ell = \pm 3, \pm 4, \dots, \pm L, \quad (3.20)$$

onde $L = (N + 1) / 2$. Para $|\ell| = 1$ e 2 não existe uma expressão simples.* Para N par existe também uma fórmula similar, mas como as propriedades físicas não dependem da escolha da paridade de N , trabalharemos apenas com a paridade ímpar.

O autovetor $g_{\ell\mu}$ correspondente ao autovalor η_ℓ é uma combinação linear dos operadores $\{f_{n\mu}\}$:

$$g_{\ell\mu} = \Lambda^{\frac{N-1}{4}} \sum_{n=0}^{N-1} \alpha_{n\ell} f_{n\mu},$$

onde $\ell = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm L$. Os coeficientes $\alpha_{n\ell}$ são obtidos numericamente.

Na base de seus autovetores, o Hamiltoniano da banda de condução é escrito como

$$H_N^{BC} = \sum_{\ell=-L}^L \eta_\ell g_{\ell\mu}^+ g_{\ell\mu}, \quad (3.21)$$

e a perturbação como

$$H'_N = -\tilde{J} \sum_{k=-L}^L \sum_{j=-L}^L \alpha_{0k} \alpha_{0j} g_{k\mu}^+ \tilde{\sigma}_{\mu\mu'} g_{j\mu'} \cdot \tilde{S}, \quad (3.22)$$

onde usamos a expansão de $f_{0\mu}$ em termos dos operadores $g_{\ell\mu}$:

$$f_{0\mu} = \Lambda^{-\frac{N-1}{4}} \sum_{\ell=-L}^L \alpha_{0\ell} g_{\ell\mu}.$$

Semelhantemente aos autovalores η_ℓ , os coeficientes $\alpha_{0\ell}$ também obedecem a uma fórmula empírica,⁽³⁾

* Para $\Lambda \geq 2$ e $N > 5$ as fórmulas $\eta_{\pm 1} = \pm \sqrt{(1 - \Lambda^{-1})(1 - \Lambda^{-3})(1 - \Lambda^{-6})(1 - \Lambda^{-9}) \dots}$ e $\eta_{\pm 2} = \pm \Lambda \sqrt{(1 - \Lambda^{-6.125})(1 - \Lambda^{-7.125})(1 - \Lambda^{-8.625})}$ reproduzem os resultados numéricos respectivamente com erro inferior a 0.1% e 0.002%.

$$\alpha_{0\ell} = [\tfrac{1}{2}(1 - \Lambda^{-1})]^{1/2} \Lambda^{(\ell-1)/2}, \quad (3.23)$$

que é tanto melhor quanto maiores forem N , ℓ e Λ .^{*}

Com os autovalores η_ℓ e os coeficientes $\alpha_{0\ell}$ em mãos, estamos equipados para calcular a susceptibilidade magnética do modelo de Kondo pelo método do GRN. Os estados de muitos corpos necessários são facilmente obtidos dos estados de partícula independente η_ℓ . A Figura 3.7 ilustra isso dando como exemplo alguns desses estados.

Figura 3.7 Exemplos de estados de muitos corpos construídos a partir dos estados de partícula independente η_ℓ de H_N^{BC} : (a) estado fundamental, $|\Omega\rangle = \prod_{k=-L}^{-1} g_{k\uparrow}^+ g_{k\downarrow}^+ |0\rangle$, todos níveis de energia abaixo de ε_F estão preenchidos, (b) excitação com carga acima do estado fundamental, $g_{m\uparrow}^+ |\Omega\rangle$, (c) excitação elétron-buraco, $g_{m\downarrow}^+ g_{-n\downarrow} |\Omega\rangle$, e (d) excitações múltiplas, $g_{m\downarrow}^+ g_{-1\uparrow} g_{k\uparrow}^+ g_{-n\downarrow} |\Omega\rangle$.

^{*} As fórmulas $\alpha_{01} = \sqrt{\frac{(1 - \Lambda^{-4})}{2}}$ e $\alpha_{02} = (1 + \Lambda^{-6})(1 + \Lambda^{-7})\sqrt{\frac{(\Lambda - 1)}{2}(1 + \Lambda^{-6.5})(1 + \Lambda^{-7.5})(1 + \Lambda^{-8.5})}$, para $\Lambda \geq 2$ e $N > 5$, reproduzem os resultados numéricos respectivamente com erro inferior a 0.2% e 0.05%.

Para finalizar esse capítulo apresentamos na Figura 3.8 um fluxograma que resume a abordagem do grupo de renormalização numérico (GRN) aplicado aos modelos de impureza. Nele vemos que para colocar em prática a técnica do GRN precisamos transformar o Hamiltoniano de Kondo, que está na representação de momento, para a representação de energia. O passo seguinte é substituir o contínuo de níveis da banda de condução por um conjunto de níveis discretizados logaritmicamente. Nesse passo o Hamiltoniano do modelo torna-se uma série infinita, sendo ainda inadequado para cálculos numéricos. Esse contratempo é contornado tridiagonalizando a banda de condução de tal maneira que, ao truncarmos o Hamiltoniano resultante, toda propriedade física ligada à impureza é conservada. Feito isto, obtemos como presente uma relação de recorrência, que é uma transformação do grupo de renormalização, que permite, se necessário, diagonalizar iterativamente o Hamiltoniano truncado e renormalizado $H_N(\Lambda)$.

Figura 3.8 Etapas da abordagem do grupo de renormalização numérico (GRN) para modelos de impurezas. Nesta abordagem todas as aproximações dizem respeito apenas ao Hamiltoniano da banda de condução, os termos que descrevem as interações da impureza com os elétrons de condução permanecem exatos.

4

Expansão Perturbativa Regularizada da Susceptibilidade - Método de Wilson

A contribuição de uma impureza magnética em um meio metálico à susceptibilidade é definida como ⁽¹⁾

$$\chi(T) = \left. \frac{\partial M(h)}{\partial h} \right|_{h=0}, \quad (4.1)$$

onde

$$M(h) = g\mu_B (\langle S_z + s_z \rangle - \langle s_z \rangle_0)$$

é a magnetização, devida à impureza, calculada num campo magnético externo h . Nesta expressão, $\langle \rangle$ indica uma média termodinâmica com respeito ao Hamiltoniano de Kondo H_K , Eq. (3.1), e $\langle \rangle_0$ ao Hamiltoniano da banda de condução. s_z e S_z são as componentes z respectivamente do spin total $\vec{s}$ dos elétrons de condução e do spin $\vec{S}$ da impureza. O cálculo perturbativo de (4.1) até segunda ordem em J resulta em ⁽¹⁴⁾ (ver Ap. A)

$$k_B T \chi(T) = \frac{1}{4} \{1 + 2\rho J + 4\rho^2 J^2 \ln(k_B T / D) + O((2\rho J)^3)\}, \quad (4.2)$$

que diverge quando $T \rightarrow 0$ devido ao termo logarítmico, como já foi mencionado no Capítulo 2.

Nas páginas seguintes descreveremos com detalhe o procedimento de Wilson para regularizar esta divergência. Antecipamos que não refaremos todos os cálculos, no que diz respeito às expansões perturbativas e resultados numéricos. Por outro lado, obteremos expressões algébricas para várias quantidades que no artigo de Wilson aparecem apenas numericamente e ainda assim para casos específicos. Portanto, além de dar base para o próximo capítulo, este capítulo, de certo modo, vem complementar o trabalho de Wilson.

4.1 O Procedimento de Wilson para regularizar a expansão perturbativa da susceptibilidade

O procedimento de Wilson⁽³⁾ para regularizar a divergência logarítmica na expansão perturbativa da equação (4.1) tem como ponto de partida o Hamiltoniano H_N discreto e truncado em N , definido no capítulo anterior pela Eq. (3.16). A expansão perturbativa de $\chi(T)$ até terceira ordem em $\tilde{J} = 4\rho J / D(1 + \Lambda^{-1})$, análoga à Eq.(4.2), é

$$k_B T \chi(T) = \frac{1}{4} \{1 + Y_1(N)\tilde{J} + Y_2(N)\tilde{J}^2 + Y_3(N)\tilde{J}^3 + O(\tilde{J}^4)\}, \quad (4.3)$$

que diverge com $N \rightarrow \infty$ através dos coeficientes Y_2 e Y_3 . Os coeficientes Y_i são dados pelas equações A12-A18 que estão na Referência 3. Eles envolvem somas sobre todos os autovalores η_i do ponto fixo $H_N^*(\tilde{J} = 0)$ (ver Sec. 3.6).

O “pulo do gato” para regularizar esta divergência é obter uma expansão auxiliar. Wilson escolheu a da energia do primeiro estado excitado $E_1(N)$ de H_N , Fig. 4.1, e

calculou perturbativamente sua expansão em $\tilde{J}$ até quarta ordem. Definindo $E(N) \equiv \eta_1 - E_1(N)$, sendo η_1 a menor energia de partícula independente do Hamiltoniano $H_N^*(\tilde{J} = 0)$, obteve

$$E(N) = R_1 \tilde{J} + R_2(N) \tilde{J}^2 + R_3(N) \tilde{J}^3 + R_4(N) \tilde{J}^4 + O(\tilde{J}^5), \quad (4.4)$$

onde os coeficientes R_i estão na Referência 3, equações A7-A10, e também no Ap. C desta dissertação. Tal qual os coeficientes Y_i , os R_i ($i > 1$) também envolvem somas sobre todos os autovalores η_i de $H_N^*(\tilde{J} = 0)$ e divergem quando $N \rightarrow \infty$. Para $\tilde{J} \ll 1$ (e N não muito grande) a energia η_1 não difere muito de $E_1(N)$, garantindo que a energia $E(N)$ é muito pequena. Em princípio Wilson poderia ter escolhido um

Figura 4.1 Ilustração do acoplamento de uma impureza localizada (spin $\tilde{S}$) com a banda de condução (spin $\tilde{s}$) para o estado de partícula independente de menor energia. Sem a interação $\tilde{J}$ esse estado é quadruplamente degenerado e tem energia η_1 . Quando adicionamos o termo H'_N de acoplamento banda-impureza esta degenerescência é parcialmente quebrada em um estado singleto, com energia $E_1(N)$, e um estado tripleto, com energia $E_2(N) > E_1(N)$. Essas energias são calculadas perturbativamente no Ap. C.

outro estado qualquer, porém o cálculo da expansão em $\tilde{J}$ seria mais difícil. Além disto, esta escolha resulta num estado fundamental singleto, já em primeira ordem em $\tilde{J}$ (ver Ap. C), o que leva a crer que esta tenha sido a verdadeira motivação de Wilson

para escolhê-lo, já que em baixas temperaturas a impureza se acopla com a banda em um estado singleto.

Invertendo (4.4) para dar $\tilde{J}$ em função de $E(N)$ obtemos

$$\begin{aligned} \tilde{J} = & \frac{1}{R_1} E(N) + \frac{-R_2}{R_1^3} E^2(N) + \frac{2R_2^2 - R_1 R_3}{R_1^5} E^3(N) \\ & + \frac{-5R_2^3 + 5R_1 R_2 R_3 - R_1^2 R_4}{R_1^7} E^4(N) + O(E^5(N)). \end{aligned} \quad (4.5)$$

Levando este produto em $E(N+2)$, obtida da equação (4.4) substituindo N por $N+2$, o resultado é a equação de diferenças finitas

$$E(N+2) = E(N) + AE^2(N) + BE^3(N) + CE^4(N), \quad (4.6)$$

onde

$$\begin{aligned} A &= \frac{R_2(N+2) - R_2(N)}{R_1^2}, \\ B &= \frac{R_3(N+2) - R_3(N)}{R_1^3} - 2 \frac{R_2(N)}{R_1^2} A, \\ C &= \frac{R_4(N+2) - R_4(N)}{R_1^4} - 3 \frac{R_2(N)}{R_1^2} B - \frac{R_2^2(N) + 2R_1 R_3(N)}{R_1^4} A \end{aligned} \quad (4.7)$$

Esta fórmula permite obter $E(N)$ recursivamente a partir de um $E(N_0)$ inicial, calculado por (4.4) para um $\tilde{J}$. A diferença entre os resultados dados pela fórmula teórica (4.6) e o cálculo numérico de (4.4) são desprezíveis.⁽³⁾

Substituindo agora (4.5) em (4.3) temos,

$$k_B T \chi(T) = \frac{1}{4} \{1 + F E(N) + G E^2(N) + H E^3(N) + O(E^4(N))\}, \quad (4.8)$$

onde

$$\begin{aligned} F &= \frac{Y_1(N)}{R_1}, \\ G &= \frac{Y_2(N)}{R_1^2} - \frac{R_2(N)}{R_1^2} F, \\ H &= \frac{Y_3(N)}{R_1^3} - \frac{R_2(N)}{R_1^2} G - \frac{R_3(N)}{R_1^3} F. \end{aligned}$$

Para $N \rightarrow \infty$, R_1 e Y_1 não divergem e portanto F também não diverge. Entretanto, como R_2, R_3, Y_2 e Y_3 divergem, não é imediato que os coeficientes G e H não divirjam. Nesse ponto Wilson diz que para $\Lambda = 2$ e $k_B T / D = 2^{-\frac{N-1}{2}}$, no limite de grande N , tem-se

$$k_B T \chi(T) = 0.25 - 0.25766 E(N) + 0.31472 E(N)^2 - 1.13000 E(N)^3 + \dots.$$

Isto é verdade para qualquer N grande para o qual $k_B T / D = 2^{-\frac{N-1}{2}}$. Neste caso, $k_B T / D$ é muito pequeno. Porém, não existe nenhum termo $\ln(k_B T / D)$ nesta fórmula, que poderia ser detectado se algum dos coeficientes dessa expansão variasse com potência em N . Uma vez que as Eqs. (3.14) e (3.15) relacionam cada N com uma temperatura T , Figura 4.2,

Figura 4.2 Ilustração da dependência implícita do parâmetro de regularização $E(N)$ com a temperatura T .

o par de equações (4.6) e (4.8) determinam (implicitamente) a dependência de $\chi(T)$ com a temperatura (por meio do parâmetro $E(N)$).

Podemos obter, porém, a partir da expansão (4.8), uma dependência funcional para a susceptibilidade $\chi(T)$ na temperatura T e no acoplamento antiferromagnético ρJ , válida para temperaturas $T \gg T_K$ e $k_B T / D \ll 1$. Para isso, voltemos nossa atenção à Eq. (4.6). De posse dos coeficientes R_i (ver Ap. C) podemos verificar a dependência de A , B e C com N . A Fig. 4.3 mostra que, tal qual Wilson afirma, A e B são praticamente independentes de N , para N grande.

Figura 4.3 Dependência dos coeficientes A e B com o parâmetro de truncamento N .

Os valores assintóticos, para $\Lambda = 2$, são $A = 0.714358$ e $B = 0.142156$, enquanto Wilson reporta $A = 0.71436$ e $B = 0.14220$ (Tab. A. II, Ref. 3). Wilson calcula $C = -2.9214$; nós não verificamos esse resultado por ser extremamente tedioso fazê-lo (ver o tamanho da Eq. (A10) e da Tab. A.1 da Ref. 3).

Como $E(N)$ é pequeno e a variação dos coeficientes A , B e C com N é desprezível, $E(N+2)$ não é muito diferente de $E(N)$, isto é, $E(N)$ é uma função que depende fracamente de N . Isso permite converter a fórmula recursiva (4.6) numa

equação diferencial. Esta é obtida como segue. Assumindo que $E(N)$ é uma função diferenciável em N , escrevamos

$$E(N+2) = E(N) + \frac{dE(N)}{dN} \frac{2}{1!} + \frac{d^2E(N)}{dN^2} \frac{2^2}{2!} + \frac{d^3E(N)}{dN^3} \frac{2^3}{3!} + \dots$$

Igualando esta série de Taylor à Eq. (4.6) e isolando a primeira derivada, obtemos

$$\frac{dE(N)}{dN} = \frac{1}{2}AE(N)^2 + \frac{1}{2}BE(N)^3 + \frac{1}{2}CE(N)^4 + \dots - \frac{d^2E(N)}{dN^2} - \frac{2}{3} \frac{d^3E(N)}{dN^3} - \dots \quad (4.9)$$

As derivadas no lado direito da equação acima podem ser removidas sucessivamente.

Para isso derivamos ambos os lados dessa equação, obtendo

$$\frac{d^2E(N)}{dN^2} = \left\{ AE(N) + \frac{3}{2}BE(N)^2 + 2CE(N)^3 + \dots \right\} \frac{dE(N)}{dN} - \frac{d^3E(N)}{dN^3} - \dots$$

De (4.9) vê-se que $d^nE(N)/dN^n$ é de ordem $E(N)^{n+1}$. Então, até ordem $E(N)^4$,

$$\frac{d^2E(N)}{dN^2} = \frac{1}{2}A^2E(N)^3 + \left(\frac{5}{4}AB - \frac{1}{2}A^3\right)E(N)^4 + \dots - \frac{d^3E(N)}{dN^3} - \dots \quad (4.10)$$

Por sua vez, diferenciando esse resultado e mantendo apenas o termo $E(N)^4$, concluímos que

$$\frac{d^3E(N)}{dN^3} = \frac{3}{4}A^3E(N)^4. \quad (4.11)$$

Por fim, substituindo (4.10) e (4.11) em (4.9), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{dE(N)}{dN} = \frac{1}{2} [& AE(N)^2 + (B - A^2)E(N)^3 \\ & + (C - \frac{5}{2}AB + \frac{3}{2}A^3)E(N)^4 + O(E(N)^5)]. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Esta equação diferencial é facilmente integrável, uma vez que a variação de A , B e C com N é desprezível e a energia $E(N)$, Eq.(4.4), é pequena. Então,

$$\int_{E(N')}^{E(N)} \frac{1}{AE^2 + (B - A^2)E^3 + (C - \frac{5}{2}AB + \frac{3}{2}A^3)E^4 + O(E^5)} dE = \frac{N - N'}{2},$$

resulta em

$$\psi(E(N')) - \psi(E(N)) = -\frac{N' - N}{2}, \quad (4.13)$$

onde

$$\psi(E) = \frac{1}{AE} + \left(\frac{B}{A^2} - 1\right) \ln(AE) + \frac{2CA - BA^2 + A^4 - 2B^2}{2A^3} E + O(E^2). \quad (4.14)$$

A Eq. (4.13) pode ser resolvida implicitamente para dar $E(N)$ como função de N e portanto de T . Esta propriedade é importantíssima, como veremos a seguir.

Invertendo $\chi(T)$ dado pela equação (4.8), para expressar $E(N)$ como uma série de $y(N) = k_B T \chi(T) - 1/4$, e substituindo esse resultado em (4.13), obtemos, escolhendo $N' = N + 2L$,

$$\phi(y(L)) - \phi(y(0)) = \ln(T / T_0),$$

com $T \sim \Lambda^{-(N+2L)/2}$, $T_0 \sim \Lambda^{-N/2}$, Eq.(3.15), e

$$\phi(y) = \ln(\Lambda)\psi(E) + \delta = \frac{1}{\alpha y} + \beta \ln|4y| + \gamma y + O(y^2), \quad (4.15)$$

onde a constante δ foi adicionada para que $\phi(y)$ não tenha termo constante. α , β , γ e δ são dados pelas seguintes expressões:

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{4A}{F \ln(\Lambda)}, \\ \beta &= \left(\frac{B}{A^2} - 1\right) \ln(\Lambda), \\ \gamma &= \frac{16}{\alpha} \left[\frac{H}{F^3} - \frac{G^2}{F^4} - \frac{B^2}{A^2 F^2} - \alpha \beta \frac{2G + AF}{8F^2} + \frac{C}{AF^2} \right], \\ \delta &= -(\beta \ln|\frac{1}{2} \alpha \ln(\Lambda)| + \frac{4G}{\alpha F^2}). \end{aligned} \quad (4.16)$$

Os coeficientes α , β e γ , quando $\Lambda \rightarrow 1$, convergem rapidamente para o resultado⁽³⁾

$$\phi(y) = \ln(2)\psi(E) + 1.3484 = -\frac{1}{4y} - \frac{1}{2} \ln|4y| + 6.3296 y + O(y^2). \quad (4.17)$$

e variam muito pouco com $\bar{\beta}$, Eq. (3.15).

Usando a definição de y em termos de $\chi(T)$, temos

$$\phi(k_B T \chi(T) - 1/4) - \ln(k_B T) = \phi(k_B T_0 \chi(T_0) - 1/4) - \ln(k_B T_0),$$

que mostra que $\phi(y)$ é uma *função universal* de seu argumento y (isto é, sua forma funcional é independente de ρJ , efeitos de banda, etc.), e sugere a definição de uma temperatura T_K chamada de temperatura de Kondo, tal que

$$\phi(k_B T_0 \chi(T_0) - 1/4) - \ln(k_B T_0) \equiv -\ln(k_B T_K), \quad (4.18)$$

e portanto,

$$\phi(k_B T \chi(T) - 1/4) = \ln[T/T_K(J)] . \quad (4.19)$$

Veja que a grandeza $k_B T \chi(T)$ é uma função universal de T/T_K . Nisso reside toda a importância de T_K .⁽¹⁵⁾

A fim de relacionar (4.18) com a equação (2.3), escreveremos (4.2) como:

$$k_B T \chi(T) = \frac{1}{4} \{1 + 2\rho J + 4\rho^2 J^2 \ln(k_B T / \tilde{D}) + O((2\rho J)^3)\} , \quad (4.20)$$

onde todos os termos não logarítmicos, exceto o termo $2\rho J$ mantido acima, são incluídos na definição de uma nova largura de banda efetiva $\tilde{D}(2\rho J)$, que é da ordem de D . A razão $\tilde{D}/D$ tem uma expansão regular (mas não universal) em série de potências de ρJ .

Colocando $k_B T_0 = \tilde{D}$ na Eq. (4.20) encontramos

$$k_B T_0 \chi(T_0) - 1/4 = \rho J / 2 .$$

Substituindo esse resultado em (4.18) e resolvendo para $k_B T_K$ temos

$$k_B T_K(J) = \tilde{D} \exp[-\phi(\rho J / 2)] . \quad (4.21)$$

Esta equação define a temperatura de Kondo sem ambigüidade, e, servindo-se da Eq. (4.17), mostra que, para $\rho J \ll 1$,

$$k_B T_K \cong D |2\rho J|^{1/2} \exp(-1/|2\rho J|) . \quad (4.23)$$

Nada em princípio mudou aqui em relação à Eq. (2.3), exceto que obtivemos uma melhor estimativa da temperatura de Kondo T_K . Esta forma para T_K , com o prefator

$|2\rho J|^{1/2}$, pode ser obtida pela teoria perturbativa ao se levar em conta maior número de termos divergentes.

Este procedimento, que acabamos de reproduzir, combinado com os resultados numéricos da diagonalização do Hamiltoniano H_N , Eq. (3.16), complementou a solução do modelo de Kondo de uma impureza. As fórmulas (4.6), (4.8), (4.12), (4.14) e (4.16) que deduzimos não foram escritas na Ref. 3. Elas, particularmente (4.6) e (4.12), serão importantes quando buscarmos relacionar o procedimento alternativo de regularização, que desenvolveremos no próximo capítulo, com o procedimento de Wilson.

5

Método Generalizado do Grupo de Renormalização Numérico e um Procedimento Alternativo para Regularizar a Expansão Perturbativa da Susceptibilidade

Infelizmente, apesar do procedimento de Wilson ter resolvido o modelo de Kondo de uma impureza, a solução da equação de diferenças finitas (4.6) é uma passagem de difícil reprodução quando se estudam Hamiltonianos mais complexos, como por exemplo o do modelo de Anderson. O parâmetro z proposto por Yoshida e colaboradores⁽⁴⁾ (ver Sec. 1.2) promete simplificar essa passagem e abrir as portas para que se estenda o tratamento perturbativo aos casos mais complicados.

De fato, em lugar de escrever $E(N+2)$ em função de $E(N)$, Eq. (4.6), e daí obter a equação diferencial (4.12), podemos agora escrever diretamente uma equação diferencial dE/dz em função de $E(N, z)$. Veja que, contrário ao parâmetro N , z é contínuo e portanto mais apropriado para se diferenciar. A solução dessa equação levará a uma expressão que determina χ em função de T que coincidirá com os resultados do capítulo anterior.

5.1 O parâmetro z de discretização

No método generalizado do grupo de renormalização numérico a discretização da banda de condução é feita de acordo com a Figura 5.1 e envolve dois parâmetros de discretização, Λ e z . O primeiro parâmetro é nosso conhecido desde o Capítulo 3, foi introduzido por Wilson e pode, em princípio, tomar qualquer valor maior que a unidade. O valor do outro parâmetro está no intervalo $0 < z \leq 1$. A introdução da variável z foi inicialmente desenvolvida por Yoshida e colaboradores e possibilitou usar o GRN no cálculo de propriedades dinâmicas, como a densidade espectral, e foi aplicado com sucesso a vários modelos.⁽¹⁶⁾ Posteriormente, o procedimento foi adaptado para eliminar oscilações, originárias da discretização, em propriedades termodinâmicas⁽¹⁷⁾ – a característica limitante do método original.

Figura 5.1 Discretização logarítmica da banda de condução envolvendo o parâmetro adicional z definido no intervalo $0 < z \leq 1$. A discretização original proposta por Wilson é recuperada fazendo $z = 1$.

Comparando a figura acima com a Figura 3.3, notaremos que a extensão proposta por Yoshida se resume, de um *ponto de vista técnico*, em redefinir

$$\Lambda^{-n-1} \rightarrow \Lambda^{-n-z}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.1)$$

A partir disto, por redefinição do conjunto completo de funções ortonormais originalmente proposto por Wilson, Eq. (3.8), temos

$$\psi_{0l}(q) = \begin{cases} \frac{1}{(1 - \Lambda^{-z})^{1/2}} \exp(i\omega_0 l q), & \text{se } \Lambda^{-z} < q < 1, \\ 0 & , \text{ fora desse intervalo,} \end{cases} \quad (5.2)$$

$$\psi_{n>0,l}(q) = \begin{cases} \frac{\Lambda^{(n+z)/2}}{(1-\Lambda^{-1})^{1/2}} \exp(i\omega_n l q), & \text{se } \Lambda^{-n-z} < q < \Lambda^{1-n-z}, \\ 0 & , \text{ fora desse intervalo,} \end{cases}$$

com l tomando todos valores inteiros de $-\infty$ a $+\infty$ e

$$\omega_n = \begin{cases} 2\pi / (1 - \Lambda^{-z}) & \text{se } n = 0, \\ 2\pi \Lambda^{n+z} / (1 - \Lambda^{-1}) & \text{para } n > 0. \end{cases}$$

As funções $\psi_{nl}(q)$ juntamente com $\psi_{nl}(-q)$ formam um conjunto completo, ortogonal e discreto de funções de onda para o domínio $-1 < q < 1$, para qualquer valor de $\Lambda > 1$ ⁽³⁾. Podemos, portanto, expandir $a_{k\mu}$ nesta base:

$$a_{q\mu} = \sum_{n,l} \{a_{nl\mu} \psi_{nl}(q) + b_{nl\mu} \psi_{nl}(-q)\}. \quad (5.3)$$

Os coeficientes $a_{nl\mu}$ e $b_{nl\mu}$ desta expansão formam um conjunto completo discreto de operadores de elétrons independentes que obedecem às regras padrão de anticomutação.

O Hamiltoniano da Eq. (3.7) pode agora ser expresso em termos dos operadores $a_{nl\mu}$ e $b_{nl\mu}$ ao invés dos operadores $a_{q\mu}$. É fácil verificar os seguintes resultados, aplicando a Eq. (5.1) às Eqs. (3.10) e (3.9) ou diretamente pela substituição da Eq. (5.3) nas integrais:

$$\int_{-1}^1 a_{q\mu} dq = (1 - \Lambda^{-z})^{1/2} (a_{00\mu} + b_{00\mu}) + (1 - \Lambda^{-1})^{1/2} \sum_{n=1}^{+\infty} \Lambda^{-(n+z-1)/2} (a_{n0\mu} + b_{n0\mu}). \quad (5.4)$$

e

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^1 q a_{q\mu}^+ a_{q\mu} dq &= \frac{(1 + \Lambda^{-z})}{2} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} (a_{0l\mu}^+ a_{0l\mu} - b_{0l\mu}^+ b_{0l\mu}) \\
&+ \frac{(1 + \Lambda^{-1})}{2} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \sum_{n=1}^{+\infty} \Lambda^{-n-z} (a_{nl\mu}^+ a_{nl\mu} - b_{nl\mu}^+ b_{nl\mu}) \\
&+ \frac{1 - \Lambda^{-z}}{2\pi i} \sum_{l \neq l'=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{l - l'} (a_{0l\mu}^+ a_{0l'\mu} - b_{0l\mu}^+ b_{0l'\mu}) \exp\left(\frac{2\pi i(l - l')}{1 - \Lambda^{-z}}\right) \\
&+ \frac{1 - \Lambda^{-1}}{2\pi i} \sum_{l \neq l'=-\infty}^{+\infty} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{\Lambda^{-n-z-1}}{l - l'} (a_{nl\mu}^+ a_{nl'\mu} - b_{nl\mu}^+ b_{nl'\mu}) \exp\left(\frac{2\pi i(l - l')}{1 - \Lambda^{-1}}\right).
\end{aligned} \tag{5.5}$$

Desprezando os termos proporcionais a $a_{nl\mu}$ e $b_{nl\mu}$, com $l \neq 0$, e suprimindo o índice $l = 0$ dos operadores $a_{m0\mu}$, o Hamiltoniano de Kondo H_K , Eq. (3.7), na base $(a_{n\mu}, b_{n\mu})$, é escrito como

$$\begin{aligned}
\frac{H_K}{D} &\cong \frac{1}{2} (1 + \Lambda^{-z}) (a_{0\mu}^+ a_{0\mu} - b_{0\mu}^+ b_{0\mu}) \\
&+ \frac{1}{2} (1 + \Lambda^{-1}) \sum_{n=1}^{\infty} \Lambda^{1-n-z} (a_{n\mu}^+ a_{n\mu} - b_{n\mu}^+ b_{n\mu}) - \tilde{J} f_{0\mu}^+ \vec{\sigma}_{\mu\mu'} f_{0\mu'} \cdot \vec{S},
\end{aligned}$$

sendo que a soma em μ é subtendida e definimos o operador $f_{0\mu}$ como

$$\begin{aligned}
f_{0\mu} &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-1}^1 a_{q\mu} dq \\
&= [\tfrac{1}{2}(1 - \Lambda^{-z})]^{1/2} (a_{0\mu} + b_{0\mu}) + [\tfrac{1}{2}(1 - \Lambda^{-1})]^{1/2} \sum_{n=1}^{\infty} \Lambda^{-(n+z-1)/2} (a_{n\mu} + b_{n\mu}).
\end{aligned} \tag{5.6}$$

Esses operadores obedecem à relação $\{f_{0\mu}, f_{0\mu'}^+\} = \delta_{\mu\mu'}$.⁽⁴⁾

Fazendo a transformação de Lanczos^(3,4) da base discreta $\{a_{n\mu}, b_{n\mu}\}$ para a nova base $\{f_{n\mu}\}$, onde os operadores $f_{n\mu}$ só se acoplam com seus vizinhos mais próximos, obtemos a forma tridiagonal da banda de condução,

$$\frac{H_{BC}}{D} = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n(z) (f_{n\mu}^+ f_{n+1\mu} + f_{n+1\mu}^+ f_{n\mu}), \quad (5.7)$$

onde os coeficientes $\varepsilon_n(z)$ são determinados resolvendo-se a equação⁽⁴⁾:

$$\varepsilon_n(z) = \begin{cases} \sqrt{F_0(z, \Lambda)} & \text{para } n = 0, \\ \sqrt{\frac{F_n(z, \Lambda) - [(H_{n+1})^{2n+2}]_{11}}{F_{n-1}(z, \Lambda) - [(H_n)^{2n}]_{11}}} & \text{para } n = 1, 2, 3, \dots, \end{cases} \quad (5.8)$$

onde H_n é a matriz cujos elementos são

$$(H_n)_{ij} = \varepsilon_{i-1}(z) \delta_{i,j-1} + \varepsilon_{j-1}(z) \delta_{i-1,j} \quad (i, j = 1, 2, \dots, n), \quad (5.9)$$

e

$$F_n(z, \Lambda) = (1 - \Lambda^{-z}) \left(\frac{1 + \Lambda^{-z}}{2} \right)^{2n+2} + (1 - \Lambda^{-1}) \left(\frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} \right)^{2n+2} \frac{\Lambda^{-(2n+3)z}}{1 - \Lambda^{-(2n+3)}}. \quad (5.10)$$

O fato de podermos calcular $\varepsilon_n(z)$ numericamente por meio das Eqs. (5.8), (5.9) e (5.10) é uma importante conveniência desta abordagem, desde que o cálculo analítico envolvido na solução dessas equações torna-se muito tedioso para $N > 3$.

Para grandes valores de n , $\varepsilon_n(z)$ se aproxima da forma assintótica

$$\varepsilon_n(z) = \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} \Lambda^{1-z-n/2} \quad (n \gg 1). \quad (5.11)$$

Truncaremos (5.7) em $n = N - 1$, Figura 5.2, onde N é um inteiro tal que $\varepsilon_n(z) \ll k_B T / D$. Similarmente ao desenvolvimento do Capítulo 3, para dado N definimos a energia

$$D_N(z) = \frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1})\Lambda^{-\frac{N-1}{2}+1-z}D, \quad (5.12)$$

que é aproximadamente igual a $D\varepsilon_{N-1}(z)$ e escolhemos a temperatura T tal que

$$k_B T = D_N(z) / \bar{\beta}, \quad (5.13)$$

onde $\bar{\beta}$ é uma constante pequena para garantir que $\varepsilon_N(z)$ seja muito menor do que $k_B T / D$.

Figura 5.2 Cadeia linear Tight-Binding equivalente para o modelo de Kondo. $\vec{S}$ é o spin da impureza, que se acopla ao 1^o estado de condução $f_{0\mu}$. Os acoplamentos entre os demais estados são de 1^{os} vizinhos (ver Eq. (5.7)). A cadeia é truncada de modo que as energias $\varepsilon < \varepsilon_{N-1}(z)$ ignoradas são muito menores que a razão $k_B T / D$, onde $k_B T$ é a energia térmica de interesse e D a meia largura da banda de condução.

Enfim, o Hamiltoniano é dividido pelo fator $\varepsilon_{N-1}(z) = \Lambda^{-(N-1)/2+1-z}(1 + \Lambda^{-1})/2$, o qual define o Hamiltoniano escalado e adimensional

$$H_N(z) = \Lambda^{\frac{N-1}{2}+z-1} \left[\sum_{n=0}^{N-1} \tilde{\varepsilon}_n(z) (f_{n\mu}^+ f_{n+1\mu} + f_{n+1\mu}^+ f_{n\mu}) - \tilde{J} f_{0\mu}^+ \vec{\sigma}_{\mu\mu'} f_{0\mu'} \cdot \vec{S} \right], \quad (5.14)$$

onde $\tilde{\varepsilon}_n(z) = \frac{2}{1+\Lambda^{-1}} \varepsilon_n(z)$ e $\tilde{J} = \frac{2}{1+\Lambda^{-1}} \frac{2\rho J}{D}$. Nesta forma, o menor coeficiente de Lanczos, $\Lambda^{\frac{N-1}{2}+z-1} \tilde{\varepsilon}_{N-1}(z)$, é aproximadamente igual a 1.

Como no Capítulo 3, uma vez que estamos interessados em como os autovalores η_ℓ e os coeficientes $\alpha_{0\ell}$ do ponto fixo $H_N^*(z, \tilde{J} = 0)$ são modificados pela introdução do parâmetro z , diagonalizamos o Hamiltoniano H_N^{BC} da banda de condução,

$$H_N^{BC}(z) = \Lambda^{\frac{N-1}{2}+z-1} \sum_{n=0}^{N-1} \tilde{\varepsilon}_n(z) (f_{n\mu}^+ f_{n+1\mu} + f_{n+1\mu}^+ f_{n\mu}). \quad (5.15)$$

A diagonalização de (5.15) é idêntica à diagonalização descrita na Seção 3.6. Os resultados numéricos mostram que para N ímpar (> 9) e Λ genérico, os autovalores $\eta_\ell(z)$ e os coeficientes $\alpha_{0\ell}(z)$ obedecem, até a quarta casa decimal, às fórmulas

$$\eta_\ell(z) = \eta_\ell \quad \ell = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm(L-1), \quad (5.16a)$$

$$\eta_{\pm L}(z) = \frac{\Lambda^z + 1}{\Lambda + 1} \eta_{\pm L}, \quad (5.16b)$$

$$\alpha_{0\ell}(z) = \alpha_{0\ell} \quad \ell = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm(L-1), \quad (5.16c)$$

$$\alpha_{0\pm L}(z) = \sqrt{\frac{\Lambda^z - 1}{\Lambda - 1}} \alpha_{0\pm L}, \quad (5.16d)$$

onde η_ℓ e $\alpha_{0\ell}$ seguem, respectivamente, as Eqs. (3.20) e (3.23). Essas fórmulas, (5.16), são mais precisas quanto maiores forem N , Λ e ℓ .

5.2 Procedimento alternativo para regularizar a susceptibilidade

Com exceção das alterações acima, a expansão perturbativa da susceptibilidade magnética para $z \neq 1$ tem exatamente a mesma forma da expressão obtida por Wilson,

$$k_B T \chi(T) = \frac{1}{4} \{1 + Y_1(N, z) \tilde{J} + Y_2(N, z) \tilde{J}^2 + Y_3(N, z) \tilde{J}^3 + O(\tilde{J}^4)\}, \quad (5.17)$$

com Y_i sendo ainda os do artigo de Wilson⁽³⁾, porém com η_ℓ e $\alpha_{0\ell}$ dados por (5.16). Como antes, Y_2 e Y_3 divergem em baixa temperatura. Para regularizar esta divergência consideramos o primeiro estado excitado $E_1(N, z)$ do Hamiltoniano $H_N(z)$ expandido em $\tilde{J}$:

$$E(N, z) = R_1 \tilde{J} + R_2(N, z) \tilde{J}^2 + R_3(N, z) \tilde{J}^3 + R_4(N, z) \tilde{J}^4 + O(\tilde{J}^5), \quad (5.18)$$

onde $E(N, z) = \eta_1 - E_1(N, z)$ e os coeficientes R_i são dados pela Referência [3], p.838, nos quais colocamos $\alpha_{0\ell}(z)$ no lugar de $\alpha_{0\ell}$ e $\eta_\ell(z)$ no lugar de η_ℓ . Como α_{01} não depende de z , Eq. (5.16c), pela Eq. (C.2) (Ap. C) concluímos que R_1 também independe de z . Derivando (5.18) em relação a z e substituindo neste resultado $\tilde{J}$ expresso em potências de $E(N, z)$,

$$\begin{aligned} \tilde{J} = & \frac{1}{R_1} E(N, z) + \frac{-R_2}{R_1^3} E^2(N, z) + \frac{2R_2^2 - R_1 R_3}{R_1^5} E^3(N, z) \\ & + \frac{-5R_2^3 + 5R_1 R_2 R_3 - R_1^2 R_4}{R_1^7} E^4(N, z) + O(E^5(N, z)), \end{aligned} \quad (5.19)$$

obtemos

$$\frac{dE(N, z)}{dz} = a(z) E^2(N, z) + b(z) E^3(N, z) + c(z) E^4(N, z) + O(E^5(N, z)), \quad (5.20)$$

onde

$$\begin{aligned}
a(z) &= \frac{1}{R_1^2} \frac{dR_2}{dz}, \\
b(z) &= \frac{1}{R_1^3} \frac{dR_3}{dz} - 2 \frac{R_2}{R_1^2} a(z), \\
c(z) &= \frac{1}{R_1^4} \frac{dR_4}{dz} - 3 \frac{R_2}{R_1^2} b(z) - \frac{R_2^2 + 2R_1 R_3}{R_1^4} a(z).
\end{aligned}$$

Pela prescrição de Wilson o próximo passo é integrar a equação diferencial (5.20). Como se vê, esta é uma tarefa complicadíssima, se não impossível, uma vez que os coeficientes $a(z)$, $b(z)$ e $c(z)$ dependem de z . Compare esta equação com a (4.12). Um estudo cuidadoso mostrará que a equação diferencial (4.12) obtida por Wilson é um caso particular de (5.20). Para demonstrar isto lembremos que a equação de diferenças finitas (4.6) foi o ponto de partida para se chegar a (4.12). Para isto tivemos que considerar N muito grande tal que a menor variação discreta de N , 2, pudesse ser tomada como infinitesimal. Da definição de temperatura

$$k_B T_N(z) = \frac{1}{2} (1 + \Lambda^{-1}) \Lambda^{-\frac{N-1}{2} + 1-z} \frac{D}{\beta},$$

obtida pela substituição da Eq. (5.12) em (5.13), é

fácil mostrar que $T_N(z=0) = T_{N-2}(z=1)$, ou seja, a variação da temperatura em z , desde $z=0$ até $z=1$, para um certo N , equivale à variação em N desde $N-2$ até N para $z=1$. Isto sugere que se substituirmos $a(z)$, $b(z)$ e $c(z)$ por suas respectivas médias, definidas por

$$\bar{f} = \int_0^1 f(z) dz, \quad (5.21)$$

obteremos o resultado de Wilson. De fato, temos

$$\begin{aligned}
(i) \quad \bar{a} &= \int_0^1 a(z) dz = \frac{1}{R_1^2} \int_0^1 \frac{dR_2}{dz} dz = \frac{R_2(N,1) - R_2(N-2,0)}{R_1^2} \\
&= \frac{R_2(N) - R_2(N-2)}{R_1^2},
\end{aligned}$$

onde $R_i(N) = R_i(N,1)$. Lembrando que A , B e C , Eq. (4.7), variam muito pouco com N , é imediato que

$$\bar{a} = A$$

$$\begin{aligned} \text{(ii)} \quad \bar{b} &= \int_0^1 b(z) dz = \frac{1}{R_1^3} \int_0^1 \frac{dR_3}{dz} dz - \frac{1}{R_1^4} \int_0^1 2R_2 \frac{dR_2}{dz} dz \\ &= \frac{R_3(N,1) - R_3(N,0)}{R_1^3} - \frac{R_2^2(N,1) - R_2^2(N,0)}{R_1^4} \\ &= \frac{R_3(N) - R_3(N-2)}{R_1^3} - \frac{R_2^2(N) - R_2^2(N-2)}{R_1^4}. \end{aligned}$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned} B - A^2 &= \frac{R_3(N+2) - R_3(N)}{R_1^3} - 2 \frac{R_2(N)}{R_1^2} \frac{R_2(N+2) - R_2(N)}{R_1^2} - \left[\frac{R_2(N+2) - R_2(N)}{R_1^2} \right]^2 \\ &= \frac{R_3(N+2) - R_3(N)}{R_1^3} - \frac{R_2^2(N+2) - R_2^2(N)}{R_1^4}, \end{aligned}$$

ou seja,

$$\bar{b} = B - A^2.$$

Similar aos cálculos acima, porém com maior trabalho algébrico, podemos demonstrar que

$$(iii) \quad \bar{c} = C - \frac{5}{2}AB + \frac{3}{2}A^3.$$

Resumindo,

$$\begin{aligned} \bar{a} &= A, \\ \bar{b} &= B - A^2, \\ \bar{c} &= C - \frac{5}{2}AB + \frac{3}{2}A^3. \end{aligned} \tag{5.22}$$

Portanto, com esse procedimento,

$$\begin{aligned} \frac{dE(N,z)}{dz} &= AE(N,z)^2 + (B - A^2)E(N,z)^3 \\ &\quad + (C - \frac{5}{2}AB + \frac{3}{2}A^3)E(N,z)^4 + O(E(N,z)^5). \end{aligned} \tag{5.23}$$

Esta equação é idêntica à Eq. (4.12) e o resultado de sua integração é

$$\psi(E(N,z')) - \psi(E(N,z)) = -(z' - z), \tag{5.24}$$

com

$$\psi(E) = \frac{1}{AE} + \left(\frac{B}{A^2} - 1\right)\ln(AE) + \frac{2CA - BA^2 + A^4 - 2B^2}{2A^3}E + O(E^2).$$

Substituindo (5.19) em (5.17) expressamos a susceptibilidade $\chi(T)$ como uma série de potências em $E(N,z)$. Esta série pode ser invertida, como fizemos para obter (5.19) de (5.18), para escrever $E(N,z)$ como uma série de $y(N,z) = k_B T \chi(T) - 1/4$. Substituindo este resultado em (5.24) e usando $T \sim \Lambda^{-N/2-z'}$ e $T_0 \sim \Lambda^{-N/2-z}$ para introduzir a temperatura, temos

$$\phi(y(N, z')) - \phi(y(N, z)) = \ln(T / T_0), \quad (5.25)$$

onde $\phi(y)$ é dado pela Eq. (4.17). Seguindo mais alguns passos da prescrição de Wilson, compreendidos entre as Equações (4.15) e (4.19), concluímos que

$$\phi(k_B T \chi(T) - 1/4) = \ln[T / T_K(J)], \quad (5.26)$$

que é o mesmo resultado de Wilson, Eq. (4.19).

Desta equação, (5.26), decorre que $k_B T \chi(T)$ é uma função universal de T / T_K . Na Figura 5.3, a curva (...) representa esta função universal, exata, obtida pelo ansatz de Bethe⁽¹⁾, enquanto os pontos (+) foram adquiridos numericamente por Wilson. Já os pontos (- -) vieram da resolução da Eq. (5.26) com $\phi(y)$ dado pela Eq. (4.17), que, como se vê, fornece melhores resultados que a expressão de Kondo (- -), Eqs. (2.2) e (2.3).

Figura 5.3 $k_B T \chi(T)$ vs T / T_K para o Hamiltoniano de Kondo de spin 1/2. T_K é a temperatura de Kondo.

Para finalizar reservamos uma última Seção para obter, a partir da expansão de (5.26), no regime de alta temperatura, o resultado perturbativo de Kondo. Em seguida, no Capítulo 6, concluiremos esta dissertação.

5.3 O resultado de Kondo a partir da expansão perturbativa regularizada

O resultado perturbativo da susceptibilidade para alta temperatura ($T \gg T_K$), Eq. (4.20), pode ser obtido da função universal (5.26) se usarmos a forma assintótica de $\phi(x)$ válida para x pequeno,

$$\phi(x) = -\frac{1}{4x} + O(\ln|4x|). \quad (5.27)$$

Substituindo em (5.26) a definição da temperatura de Kondo, Eq. (4.21), temos

$$\phi(k_B T \chi(T) - 1/4) = \phi(\rho J/2) + \ln(k_B T / \tilde{D}). \quad (5.28)$$

De (5.26) e (5.28) obtemos

$$-\frac{1}{4k_B T \chi(T) - 1} = -\frac{1}{2\rho J} + \ln(k_B T / \tilde{D}) + \dots,$$

que pode ser trivialmente resolvida para $k_B T \chi(T)$, fornecendo o resultado de Kondo,⁽¹⁴⁾

$$k_B T \chi(T) = \frac{1}{4} \{1 + 2\rho J + 4\rho^2 J^2 \ln(k_B T / \tilde{D}) + \dots\}. \quad (5.29)$$

Termos de maior ordem em ρJ também podem ser obtidos. Para isso, porém, precisamos considerar os próximos dois termos na expansão da função universal $\phi(x)$, Eq. (4.17),

$$\phi(x) = -\frac{1}{4x} - \frac{1}{2} \ln|4x| + 6.3296 x + O(x^2). \quad (5.30)$$

Usando agora essa expansão para resolver (5.28), obteremos a expansão perturbativa da susceptibilidade até *quarta ordem*,

$$\begin{aligned} k_B T \chi(T) = & \frac{1}{4} \{1 + 2\rho J + 4\rho^2 J^2 \ln(k_B T / \tilde{D}) \\ & + \rho^3 J^3 [8 \ln^2(k_B T / \tilde{D}) + 4 \ln(k_B T / \tilde{D})] \\ & + \rho^4 J^4 [16 \ln^3(k_B T / \tilde{D}) + 20 \ln^2(k_B T / \tilde{D}) - 21.33 \ln(k_B T / \tilde{D})] + \dots\}. \end{aligned}$$

Essa expansão, obtida por Wilson, não tinha sido calculada até então para essa ordem em ρJ pela teoria perturbativa usual. Os coeficientes dominantes dos termos logarítmicos, $(\rho J)^{n+1} \ln^n(k_B T / \tilde{D})$, concordam com os cálculos perturbativos, Eq. (2.2)⁽¹⁴⁾. A obtenção de equação desse tipo justifica todo o empreendimento de Wilson. Elas complementam o cálculo numérico fornecendo a dependência, neste caso, da susceptibilidade magnética com a temperatura.

6

Conclusão e Sugestões

Neste trabalho estudamos a regularização da expansão perturbativa da susceptibilidade magnética de uma impureza em um metal não magnético, obtida através do modelo de Kondo. Numa etapa seguimos a prescrição de Wilson⁽³⁾, familiarizamos com alguns aspectos do grupo de renormalização numérico (GRN), reproduzimos vários de seus resultados e obtivemos outros, não escritos no seu artigo, cruciais para o desenvolvimento desta dissertação.

Posteriormente, seguindo esta prescrição, desenvolvemos um procedimento alternativo para regularizar a expansão da susceptibilidade. Este procedimento, baseado na extensão do GRN proposta por Yoshida e colaboradores,⁽⁴⁾ se mostrou mais adequado do ponto vista formal. Isto é, o *parâmetro contínuo* z , que define a extensão do GRN, usado para obter a equação diferencial para $E(N, z)$, tem maior apelo matemático do que o *parâmetro discreto* N utilizado por Wilson para obter sua equação diferencial equivalente.

O leitor mais cuidadoso deve ter notado que desde que a Eq. (4.8) e conseqüentemente a Eq. (4.19), que dão a dependência de $\chi(T)$ com a temperatura, foram obtidas supondo que $k_B T / D \sim \Lambda^{\frac{N-1}{2}} / \bar{\beta}$ para N inteiro e $\bar{\beta}$ fixo, elas não são válidas para todo T . Para cobrir todo o intervalo contínuo da temperatura, Wilson foi obrigado a calcular $\chi(T)$ para um intervalo contínuo de $\bar{\beta}$. Isto é feito como

segue. Para dois valores de $\bar{\beta}$, digamos $\bar{\beta}$ e $\bar{\beta}'$, e N fixo, calculamos $\chi(T)$ para $k_B T / D \sim \Lambda^{\frac{N-1}{2}} / \bar{\beta}$ e $\chi(T')$ com $k_B T' / D \sim \Lambda^{\frac{N-1}{2}} / \bar{\beta}'$. O resultado, Eq. (4.15), pode ser escrito como

$$\phi(k_B T \chi(T) - 1/4) = \ln(\Lambda) \psi(E(N)) + \delta(\bar{\beta}),$$

$$\phi(k_B T' \chi(T') - 1/4) = \ln(\Lambda) \psi(E(N)) + \delta(\bar{\beta}'),$$

onde $\delta(\bar{\beta})$ é uma constante para cada valor de $\bar{\beta}$. Nesta formulação a pequena variação de ϕ com $\bar{\beta}$ foi ignorada. Os cálculos numéricos⁽³⁾ de $\delta(\bar{\beta})$ mostram que, com uma boa aproximação, temos

$$\delta(\bar{\beta}) = \ln(\bar{\beta}) + \Delta,$$

onde Δ é independente de $\bar{\beta}$. Então, temos, para N fixo,

$$\phi(k_B T \chi(T) - 1/4) - \phi(k_B T' \chi(T') - 1/4) = -\ln(\bar{\beta} / \bar{\beta}') = \ln(k_B T / k_B T'),$$

que é a mesma fórmula, entre as Eqs. (4.17) e (4.18), que obtivemos anteriormente, *mas agora* válida para um intervalo contínuo entre os valores de T e T' .

Este artifício é desnecessário no nosso procedimento. O parâmetro contínuo z ao entrar na definição da temperatura, $k_B T / D \sim \Lambda^{\frac{N-1}{2} + 1-z} / \bar{\beta}$, naturalmente estabelece a validade de $\chi(T)$, Eq. (5.26), para qualquer temperatura $T \gg T_K$. Visto que este procedimento alternativo reproduz o resultado de Wilson, esperamos que a sua extensão para modelos mais complexos resulte em sucesso. De imediato, fica a sugestão de se implementar este novo procedimento para o cálculo do calor específico do modelo de Kondo, ou mesmo sua utilização no modelo de Anderson.⁽¹³⁾

Apêndices

Apêndice A: Expansão perturbativa para a susceptibilidade até segunda ordem em J

A definição mais básica para o cálculo da susceptibilidade magnética de uma impureza é

$$\chi(T) = \left. \frac{\partial M(h)}{\partial h} \right|_{h=0}, \quad (\text{A.1})$$

onde

$$M(h) = g\mu_B (\langle S_z + s_z \rangle - \langle s_z \rangle_0), \quad (\text{A.2})$$

é a contribuição de uma impureza para a magnetização média do sistema metal + impureza, num campo magnético externo h . S_z e s_z que aparecem em (A.2) são, respectivamente, a componente z do spin total $\vec{S}$ da impureza ($S = 1/2$) e a componente z do spin total $\vec{s}$ da banda de condução. As médias são definidas por

$$\langle S_z + s_z \rangle \equiv \frac{\text{Tr} \{ (S_z + s_z) \exp[-\beta(H_K + H_z(h))] \}}{\text{Tr} \{ \exp[-\beta(H_K + H_z(h))] \}}, \quad (\text{A.3})$$

$$\langle s_z \rangle_0 \equiv \frac{\text{Tr} \{ s_z \exp[-\beta(H_0 + H_{0z}(h))] \}}{\text{Tr} \{ \exp[-\beta(H_0 + H_{0z}(h))] \}},$$

onde H_K é o Hamiltoniano de Kondo, Eq. (3.1), e H_0 é o Hamiltoniano da banda de condução, Eq. (3.1), com $J = 0$. Os termos Zeeman são

$$H_z = -g\mu_B(S_z + s_z)h, \quad (\text{A.4})$$

$$H_{0z} = -g\mu_B s_z h.$$

Tratando (A.4) como perturbação, através da expansão ⁽¹⁴⁾

$$e^{\pm\lambda(A+B)} = e^{\pm\lambda A} \left[1 \pm \int_0^\lambda du_1 B(u_1) + \iint_{\lambda > u_1 > u_2 > 0} du_1 du_2 B(u_1) B(u_2) \pm \dots \right], \quad (\text{A.5})$$

onde

$$B(u) = e^{uA} B e^{-uA}, \quad (\text{A.6})$$

podemos demonstrar que

$$\chi(T) = (g\mu_B)^2 \int_0^\beta d\lambda \left\langle e^{\lambda H_K} (S_z + s_z) e^{-\lambda H_K} (S_z + s_z) \right\rangle \quad (\text{A.7})$$

$$- (g\mu_B)^2 \int_0^\beta d\lambda \left\langle e^{\lambda H_0} s_z e^{-\lambda H_0} s_z \right\rangle_0.$$

Usando (A.5) para expandir $e^{-\beta H_K}$ podemos escrever a média $\langle \rangle$ em função da média térmica no sistema não perturbado $\langle \rangle_0$. O resultado é

$$\langle X \rangle = \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=0}^{+\infty} (-1)^l \langle X U_m(\beta) \rangle_0 \left(\sum_{n=1}^{+\infty} \langle U_n(\beta) \rangle_0 \right)^l, \quad (\text{A.8a})$$

onde

$$U_n(\beta) = (-1)^n \iiint_{\beta > u_1 > u_2 > \dots > u_n > 0} du_1 du_2 \dots du_n H'(u_1) H'(u_2) \dots H'(u_n), \quad (\text{A.8b})$$

com

$$H'(u) = -J \sum_{kk'} \exp[u(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'})] \{ (c_{\vec{k}\uparrow}^+ c_{\vec{k}'\uparrow} - c_{\vec{k}\downarrow}^+ c_{\vec{k}'\downarrow}) S_z + c_{\vec{k}\uparrow}^+ c_{\vec{k}'\downarrow} S_- + c_{\vec{k}\downarrow}^+ c_{\vec{k}'\uparrow} S_+ \} \quad (\text{A.8c})$$

Aplicando (A.8a) para cada (A.7) e então tratando o acoplamento J como perturbação, o termo de menor ordem é

$$\chi^{(0)} = (g\mu_B)^2 \int_0^\beta d\lambda \langle e^{\lambda H_0} S_z e^{-\lambda H_0} S_z \rangle_0.$$

Desde que o Hamiltoniano H_0 da banda de condução comuta com S_z , temos

$$\chi^{(0)} = (g\mu_B)^2 \beta \langle S_z^2 \rangle_0 = \frac{(g\mu_B)^2}{k_B T} \frac{1}{4}. \quad (\text{A.10})$$

O termo que contribui para a primeira ordem em J é:

$$\begin{aligned} \chi^{(1)} &= -(g\mu_B)^2 \int_0^\beta d\lambda \int_0^\beta du_1 (2 \langle S_z S_z H'(u_1) \rangle_0) \\ &= 2(g\mu_B)^2 J \int_0^\beta d\lambda \int_0^\beta du_1 \sum_k \sum_{mn} \exp[u_1(\varepsilon_m - \varepsilon_n)] \langle S_z (s_z)_k (s_z)_{mn} S_z \rangle_0, \end{aligned}$$

onde $(s_z)_k = (c_{\vec{k}\uparrow}^+ c_{\vec{k}\uparrow} - c_{\vec{k}\downarrow}^+ c_{\vec{k}\downarrow})/2$ e $(s_z)_{mn} = (c_{\vec{m}\uparrow}^+ c_{\vec{n}\uparrow} - c_{\vec{m}\downarrow}^+ c_{\vec{n}\downarrow})/2$. Desenvolvendo mais esta expressão encontramos

$$\chi^{(1)} = \frac{1}{4} (g\mu_B)^2 \beta^2 2J \sum_k f_k (1 - f_k), \quad (\text{A.11})$$

onde $f_k = 1/[1 + \exp(\beta \varepsilon_k)]$ é a distribuição de Fermi. Se supusermos que a densidade de estado constante, a soma sobre k pode ser feita como segue:

$$\begin{aligned} \sum_k f_k (1 - f_k) &= \int_{-D}^D d\varepsilon \rho f_\varepsilon (1 - f_\varepsilon) = \rho \int_{-D}^D d\varepsilon \frac{\exp(\beta \varepsilon)}{[1 + \exp(\beta \varepsilon)]^2} \\ &= \rho \int_{-D}^D d\varepsilon \frac{-1}{\beta} \frac{df_\varepsilon}{d\varepsilon} = -\frac{\rho}{\beta} \int_{-D}^D d\varepsilon [-\delta(\varepsilon)] = \frac{\rho}{\beta}. \end{aligned}$$

Então, $\chi^{(1)}$ torna-se

$$\chi^{(1)} = \frac{(g\mu_B)^2}{k_B T} \frac{1}{4} 2\rho J. \quad (\text{A.12})$$

O termo de segunda ordem, $\chi^{(2)}$, é obtido pela fórmula compacta: ⁽¹⁴⁾

$$\chi^{(2)} = (g\mu_B)^2 \int_0^\beta d\lambda \int_\lambda^\beta du_1 \int_0^\lambda du_2 \langle [S_z, H'(u_1)] S_z H'(u_2) \rangle_0. \quad (\text{A.13})$$

Desenvolvendo $\langle \rangle_0$, temos

$$\chi^{(2)} = (g\mu_B)^2 J^2 \frac{1}{2} \sum_{kl} \int_0^\beta d\lambda \int_\lambda^\beta du_1 \int_0^\lambda du_2 \exp[u_1(\varepsilon_k - \varepsilon_l)] \exp[-u_2(\varepsilon_k - \varepsilon_l)] f_{\bar{k}} (1 - f_{\bar{l}}).$$

E então, com o cálculo das integrais, ficamos com

$$\chi^{(2)} = (g\mu_B)^2 J^2 \frac{1}{2} \sum_{kl} \left[\beta \frac{1 + \exp[\beta(\varepsilon_k - \varepsilon_l)]}{(\varepsilon_k - \varepsilon_l)^2} f_{\bar{k}} (1 - f_{\bar{l}}) + 2 \frac{1 - \exp[\beta(\varepsilon_k - \varepsilon_l)]}{(\varepsilon_k - \varepsilon_l)^3} f_{\bar{k}} (1 - f_{\bar{l}}) \right],$$

que pode ser escrito, exclusivamente em termos de distribuições de Fermi, como

$$\chi^{(2)} = (g\mu_B)^2 J^2 \sum_{kl} \left[\beta \frac{f_{\bar{k}}(1-f_{\bar{l}})}{(\varepsilon_k - \varepsilon_l)^2} + 2 \frac{f_{\bar{k}}(1-f_{\bar{l}})}{(\varepsilon_k - \varepsilon_l)^3} \right]. \quad (\text{A.14})$$

Similar ao cálculo da somatória (A.11) suporemos a densidade de estados constante, assim

$$\chi^{(2)} = (g\mu_B)^2 (\rho J)^2 \int_{-D}^D \int_{-D}^D d\varepsilon d\varepsilon' \left[\beta \frac{f_{\varepsilon}(1-f_{\varepsilon'})}{(\varepsilon - \varepsilon')^2} + 2 \frac{f_{\varepsilon}(1-f_{\varepsilon'})}{(\varepsilon - \varepsilon')^3} \right].$$

Enfim, resolvendo estas integrais, obtemos

$$\chi^{(2)} = (g\mu_B)^2 \beta \frac{1}{4} 4(\rho J)^2 \ln(k_B T / D).$$

Portanto, o cálculo perturbativo da susceptibilidade de uma impureza magnética em um metal não magnético, para o modelo de Kondo, até segunda ordem no acoplamento de troca J , tem como resultado

$$k_B T \chi(T) = \frac{1}{4} \{1 + 2\rho J + 4\rho^2 J^2 \ln(k_B T / D) + O((2\rho J)^3)\},$$

onde fizemos $g\mu_B = 1$ por conveniência.

Apêndice B : Obtenção do Hamiltoniano de Kondo

Nossa obtenção segue a de Kondo.⁽¹⁴⁾ Descreveremos os elétrons de condução no metal hospedeiro pelo Hamiltoniano

$$H^{BC} = \sum_{\vec{k}, \mu} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\mu}^+ c_{\vec{k}\mu}, \quad (\text{B.1})$$

onde $c_{\vec{k}\mu}^+$ e $c_{\vec{k}\mu}$ são os operadores de criação e destruição do estado de Bloch $\phi_{\vec{k}}(\vec{r})$ de vetor de onda $\vec{k}$ e spin μ , correspondente à auto-energia $\varepsilon_{\vec{k}}$. Estes operadores obedecem às regras padrão de anticomutação de férmions

$$\{c_{\vec{k}'\mu'}, c_{\vec{k}\mu}^+\} = \delta_{\vec{k}', \vec{k}} \delta_{\mu', \mu} \quad \{c_{\vec{k}'\mu'}, c_{\vec{k}\mu}\} = 0.$$

Uma impureza localizada na origem contribui com um orbital eletrônico localizado $\phi_L(\vec{r})$. Em termos destas funções, podemos expandir a função de onda de um elétron como

$$\psi(\vec{r}, \xi) = \sum_{\vec{k}, \mu} \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) \chi_{\mu}(\xi) c_{\vec{k}\mu} + \sum_{\mu} \phi_L(\vec{r}) \chi_{\mu}(\xi) a_{\mu}, \quad (\text{B.2})$$

onde $\chi_{\mu}(\xi)$ é a função de onda do spin, que denota spin $\uparrow$ se $\chi_{\uparrow}(\xi)$, ou spin $\downarrow$ quando $\chi_{\downarrow}(\xi)$. ξ especifica a coordenada de spin e a_{μ} o operador que aniquila o elétron com spin μ localizado no orbital $\phi_L(\vec{r})$.

Consideremos a interação elétron-elétron

$$\int \cdots \int \psi^+(\vec{r}_1, \xi_1) \psi^+(\vec{r}_2, \xi_2) V(r_{12}) \psi(\vec{r}_2, \xi_2) \psi(\vec{r}_1, \xi_1) dv_1 dv_2 d\xi_1 d\xi_2, \quad (\text{B.3})$$

onde $V(r_{12})$ representa uma interação Coulombiana efetiva entre dois corpos. Dentre os termos que devem ocorrer quando a Eq. (B.2) é introduzida em (B.3), manteremos apenas aqueles da forma $c_{\vec{k}\mu}^+ c_{\vec{k}'\mu'} a_{\mu'}^+ a_{\mu''}$. Estes termos são escritos como

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\vec{k}\vec{k}'} \sum_{\mu\mu'} [c_{\vec{k}\mu}^+ c_{\vec{k}'\mu'} a_{\mu'}^+ a_{\mu''} \langle \vec{k}L | \vec{k}'L \rangle - c_{\vec{k}\mu}^+ c_{\vec{k}'\mu'} a_{\mu'}^+ a_{\mu} \langle \vec{k}L | L\vec{k}' \rangle] \\
 &= \sum_{\vec{k}\vec{k}'} (c_{\vec{k}\uparrow}^+ c_{\vec{k}'\uparrow} + c_{\vec{k}\downarrow}^+ c_{\vec{k}'\downarrow}) (a_{\uparrow}^+ a_{\uparrow} + a_{\downarrow}^+ a_{\downarrow}) [\langle \vec{k}L | \vec{k}'L \rangle - \frac{1}{2} \langle \vec{k}L | L\vec{k}' \rangle] \\
 &\quad - \sum_{\vec{k}\vec{k}'} [\frac{1}{2} (c_{\vec{k}\uparrow}^+ c_{\vec{k}'\uparrow} - c_{\vec{k}\downarrow}^+ c_{\vec{k}'\downarrow}) (a_{\uparrow}^+ a_{\uparrow} - a_{\downarrow}^+ a_{\downarrow}) \\
 &\quad + c_{\vec{k}\uparrow}^+ c_{\vec{k}'\downarrow} a_{\downarrow}^+ a_{\uparrow} + c_{\vec{k}\downarrow}^+ c_{\vec{k}'\uparrow} a_{\uparrow}^+ a_{\downarrow}] \langle \vec{k}L | L\vec{k}' \rangle.
 \end{aligned} \tag{B.4}$$

O primeiro termo é do tipo Coulombiano, ou seja, não envolve troca de spin. Já o segundo é do tipo de troca. A integral de troca é definida por

$$\langle \vec{k}L | L\vec{k}' \rangle = \iint \phi_{\vec{k}}^+ (\vec{r}_1) \phi_L^+ (\vec{r}_2) V(r_{12}) \phi_L (\vec{r}_1) \phi_{\vec{k}'} (\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \equiv J(\vec{k}, \vec{k}'), \tag{B.5}$$

e a interação Coulombiana $\langle \vec{k}L | \vec{k}'L \rangle$ é também definida por uma expressão similar. Embora não seja uma suposição essencial, para o problema que nos interessa consideraremos o acoplamento $J(\vec{k}, \vec{k}')$ como constante e igual a J .

Supondo que o orbital localizado $\phi_L(\vec{r})$ está sempre ocupado por um único elétron, ou seja,

$$a_{\uparrow}^+ a_{\uparrow} + a_{\downarrow}^+ a_{\downarrow} = 1, \tag{B.6}$$

podemos escrever

$$\frac{1}{2} (a_{\uparrow}^+ a_{\uparrow} - a_{\downarrow}^+ a_{\downarrow}) \equiv S_z, \quad a_{\uparrow}^+ a_{\downarrow} \equiv S_+, \quad a_{\downarrow}^+ a_{\uparrow} \equiv S_-. \tag{B.7}$$

$\tilde{S}$ denota um operador com álgebra de spin $\frac{1}{2}$, o que é facilmente verificado. Usando as Eqs.(B.5) e (B.7), o termo de troca da Eq.(B.4) é escrito como

$$H' = -J \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} [(c_{\vec{k}\uparrow}^+ c_{\vec{k}'\uparrow} - c_{\vec{k}\downarrow}^+ c_{\vec{k}'\downarrow}) S_z + c_{\vec{k}\uparrow}^+ c_{\vec{k}'\downarrow} S_- + c_{\vec{k}\downarrow}^+ c_{\vec{k}'\uparrow} S_+]. \quad (\text{B.8})$$

Esse Hamiltoniano descreve um processo de espalhamento entre os elétrons de condução e o spin localizado da impureza. Adicionando-o ao Hamiltoniano da banda de condução obtemos o chamado Hamiltoniano de Kondo

$$H_K = \sum_{\vec{k}\mu} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\mu}^+ c_{\vec{k}\mu} - J \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} [(c_{\vec{k}\uparrow}^+ c_{\vec{k}'\uparrow} - c_{\vec{k}\downarrow}^+ c_{\vec{k}'\downarrow}) S_z + c_{\vec{k}\uparrow}^+ c_{\vec{k}'\downarrow} S_- + c_{\vec{k}\downarrow}^+ c_{\vec{k}'\uparrow} S_+]. \quad (\text{B.9})$$

Apesar do nome, este Hamiltoniano não foi primeiramente formulado por Kondo, mas por Zener. A contribuição de Kondo foi reconhecer que o processo de espalhamento descrito por H' dá origem em baixas temperaturas aos comportamentos incomuns nas propriedades de espalhamento, tais como o mínimo na resistividade de ligas de metais não-magnéticos com impurezas magnéticas.

Apêndice C : Expansão perturbativa da energia do primeiro estado excitado de H_N

Denotaremos por E_{1N} a energia do primeiro estado excitado do Hamiltoniano

$$H_N = H_N^{BC} + H'_N,$$

onde

$$H_N^{BC} = \sum_{l=-L}^L \eta_l g_{l\mu}^+ g_{l\mu} - E_{G,N}^0,$$

é o Hamiltoniano da banda de condução com a energia do estado fundamental renormalizada a zero ($E_{G,N}^0 = -\sum_{l=-L}^{-1} \eta_{|l|}$) e

$$H'_N = -\tilde{J} \sum_{k,j=-L}^L \alpha_k \alpha_j [(g_{k\uparrow}^+ g_{j\uparrow} - g_{k\downarrow}^+ g_{j\downarrow}) S_z + g_{k\uparrow}^+ g_{j\downarrow} S_- + g_{k\downarrow}^+ g_{j\uparrow} S_+],$$

é o Hamiltoniano de interação impureza-banda de condução. Para $|\tilde{J}| \ll 1$ a energia E_{1N} pode ser calculada perturbativamente. Então,

$$E_{1N} = \eta_1 + \sum_k (\Delta E_{1N})^{(k)},$$

sendo η_1 a energia do primeiro estado excitado do Hamiltoniano não-perturbado H_N^{BC} , e $(\Delta E_{1N})^{(k)}$ a sua k -ésima correção devido à perturbação H'_N .

(a) Correção de primeira ordem

Por ser quatro vezes degenerado a correção de η_i em primeira ordem é obtida diagonalizando a matriz

$$(H')_{mn} = \langle m | H' | n \rangle, \quad m, n = 1, 2, 3, 4, \quad (C.1)$$

onde

$$\begin{aligned} |1\rangle &= g_{1\uparrow}^+ |\downarrow, \Omega\rangle, & |3\rangle &= g_{1\downarrow}^+ |\uparrow, \Omega\rangle, \\ |2\rangle &= g_{1\uparrow}^+ |\uparrow, \Omega\rangle, & |4\rangle &= g_{1\downarrow}^+ |\downarrow, \Omega\rangle \end{aligned}$$

são os auto-estados de H_N^{BC} com energia η_i e

$$|\mu, \Omega\rangle = \prod_{l=-\infty}^{-1} g_{l\uparrow}^+ g_{l\downarrow}^+ |\mu, 0\rangle$$

denota o estado fundamental de H_N , no qual a impureza tem spin $\mu = \uparrow$ ou $\downarrow$ e todos os níveis de energia abaixo do nível de Fermi ($\varepsilon_F = 0$) estão ocupados.

Desde que $\tilde{J} < 0$, a diagonalização da matriz (C.1) mostra que o primeiro estado excitado do Hamiltoniano H_N é o estado singleto

$$|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (g_{1\uparrow}^+ |\downarrow, \Omega\rangle - g_{1\downarrow}^+ |\uparrow, \Omega\rangle),$$

e a correção em primeira ordem de η_i para este estado é

$$(\Delta E_{1N})^{(1)} = \frac{3}{2} \alpha_{01}^2 \tilde{J}.$$

(b) Correção de segunda ordem

A correção de segunda ordem é obtida desenvolvendo

$$(\Delta E_{1N})^{(2)} = \sum_i \frac{|\langle i|H'|s\rangle|^2}{\eta_l - \varepsilon_i} - \sum_i \frac{|\langle i|H'|\uparrow, \Omega\rangle|^2}{0 - \varepsilon_i}.$$

O primeiro termo desta expressão segue a fórmula padrão do cálculo perturbativo, onde $|i\rangle$ é um estado intermediário com energia ε_i . Porém, a segunda soma é a correção na energia do estado fundamental $|\uparrow, \Omega\rangle$ (ou $|\downarrow, \Omega\rangle$) do Hamiltoniano da banda de condução (a correção de primeira ordem é nula).

Os estados intermediários que contribuem para a primeira somatória em $(\Delta E_{1N})^{(2)}$ são

$$g_{l\uparrow}^+ |\downarrow, \Omega\rangle, \quad g_{m\downarrow}^+ g_{l\uparrow}^+ g_{l\uparrow}^+ |\uparrow, \Omega\rangle, \quad g_{m\downarrow}^+ g_{l\downarrow}^+ g_{l\downarrow}^+ |\uparrow, \Omega\rangle, \quad g_{m\uparrow}^+ g_{l\uparrow}^+ g_{l\uparrow}^+ |\downarrow, \Omega\rangle,$$

$$g_{l\downarrow}^+ |\uparrow, \Omega\rangle, \quad g_{m\uparrow}^+ g_{l\downarrow}^+ g_{l\downarrow}^+ |\downarrow, \Omega\rangle, \quad g_{l\downarrow}^+ g_{m\uparrow}^+ g_{l\uparrow}^+ |\uparrow, \Omega\rangle, \quad g_{l\uparrow}^+ g_{m\downarrow}^+ g_{l\downarrow}^+ |\downarrow, \Omega\rangle$$

e para a segunda somatória,

$$g_{m\uparrow}^+ g_{l\uparrow}^+ |\uparrow, \Omega\rangle, \quad g_{m\downarrow}^+ g_{l\downarrow}^+ |\uparrow, \Omega\rangle, \quad g_{m\uparrow}^+ g_{l\downarrow}^+ |\downarrow, \Omega\rangle.$$

Assim,

$$(\Delta E_{1N})^{(2)} = -\frac{3}{4} \alpha_{01}^2 \sum_{l=1}^L \alpha_{0l}^2 \left\{ \frac{1}{\eta_l + \eta_h} + \frac{3(1 - \delta_{1l})}{\eta_l - \eta_h} \right\} \tilde{J}^2.$$

Definindo o parâmetro de expansão $E(N)$ como $E(N) = \eta_l - E_{1N}$ temos, até segunda ordem na constante de acoplamento $\tilde{J}$, que

$$E(N) = R_1 \tilde{J} + R_2 \tilde{J}^2 + O(\tilde{J}^3),$$

com

$$R_1 = -\frac{3}{2} \alpha_{01}^2, \quad (\text{C.2})$$

$$R_2 = \frac{3}{4} \alpha_{01}^2 \sum_{i=1}^L \alpha_{0i}^2 \left\{ \frac{1}{\eta_l + \eta_i} + \frac{3(1 - \delta_{il})}{\eta_l - \eta_i} \right\}. \quad (\text{C.3})$$

Os coeficientes R_3 e R_4 , respectivamente, de $\tilde{J}^3$ e $\tilde{J}^4$, podem ser obtidos similarmente.⁽³⁾

Bibliografia

- (1) Uma boa referência para consulta é o livro de Hewson, A. C., *The Kondo Problem to Heavy Fermions*, Cambridge University Press (1993).
- (2) Kondo, J., *Progr. Theor. Phys. (Kyoto)* **32**, 37 (1964).
- (3) Wilson, K. G., *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773 (1975).
- (4) Oliveira, L. N.; Whitaker, M. A.; Yoshida, M., *Phys. Rev. B* **41**, 9403 (1990).
- (5) Meissner, W.; Voigt G., *Ann. Physik* **7**, 761, 862 (1930).
- (6) Franck, J. P.; Manchester, F. D.; Martin, D. L., *Proc. Roy. Soc. (London)* **A263**, 494 (1961).
- (7) Knook, B., *Thesis*, Univ. of Leiden (1962).
- (8) Pearson, W. B., *Phil. Mag.* **46**, 920 (1955).
- (9) Heeger, A. J., *Solid State Physics* **23**, 347 (1969).
- (10) Okiji, A.; Yosida, K., *Progr. Theoret. Phys. (Kyoto)* **34**, 505 (1964).
- (11) Scalapino, D. J., *Phys. Rev. Letters* **16**, 937 (1966).
- (12) Abrikosov, A. A., *Physics* **2**, 5, (1965).
- (13) Krishna-murthy, H. R.; Wilkins, J. W.; Wilson, K. G., *Phys. Rev. B* **21**, 1044 (1980).

- (14) Kondo, J., Solid State Physics, **23**, 226-228 (1965).
- (15) Anderson, P. W.; Hamann, D. R.; Yuval, G., *Phys. Rev. B* **1**, 4464 (1970).
- (16) Frota H. O.; Libero V. L.; Oliveira L. N.; Yoshida M., *Physica B*, **171**, 61, (1991).
- (17) Oliveira, W. C.; Oliveira, L. N., Phys. Rev. B **49**, 11986 (1994); Sandra Cristina Costa, dissertação de mestrado, IFSC-USP (1995).