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

“DENSIDADE ESPECTRAL NO MODELO DE KONDO DE TUNELAMENTO”

CK

Silvia Martins dos Santos

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

ORIENTADOR: *Prof. Dr. Valter Luis Líbero*

SÃO CARLOS

1997

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA E
DOCUMENTAÇÃO

Santos, Silvia Martins dos
Densidade Espectral no Modelo de Kondo de Tunelamento
Silvia Martins dos Santos. - - São Carlos, 1997 54 p.

Dissertação (Mestrado) - - Instituto de Física de São Carlos, 1997.

Orientador: Prof. Dr. Valter Luiz Líbero

1. Metais. 2. Modelo de Kondo de Tunelamento.
 3. Propriedade Dinâmicas.
- 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) 272-6222

Fax (016) 272-2218

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE **SILVIA MARTINS DOS SANTOS** APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 20 DE MARÇO DE 1997.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Valter Luis Líbero/IFSC-USP

Prof. Dr. Edson Zacarias da Silva/UNICAMP

Prof. Dr. Roberto Eugênio Lagos Mônico/UNESP

Aos meus pais, Genival e Mileide, e ao Marquinhos.

Agradecimentos

- Aos meus pais, pela força que me deram durante todo o tempo, desde o berço até agora, sem os quais nem mesmo estaria aqui. Também agradeço a meus irmãos, Cássio, Cíntia e Cibele, ao meu primo Reginaldo, à minha tia Rosely e meus avós, pelo carinho e pela força que me deram.
- Ao professor Dr. Valter Luiz Líbero pela sugestão do tema, orientação e discussões, além da amizade e compreensão, durante o decorrer do trabalho.
- Ao Marquinhos, pela mão (literalmente !) na digitação da tese e confecção de Figuras. Pelo carinho e pela compreensão. Por ficar do meu lado sempre que precisei, me apoiando e me dando força pra continuar. Gostaria de dizer mais, mas as palavras não seriam capazes de expressar...
- À Sandra, pela imensa amizade entre nós, desde o momento em que cheguei a São Carlos e pela disposição em ajudar em todos os momentos difíceis, quando mais precisei. Isto é somente uma pequena fração do que gostaria de falar, mas faltam-me palavras...
- Aos amigos Reginaldo, Cristina, Dione, Marcinho, Salviano, Manzoli, João Vítor, Cíntia, pela ajuda e companheirismo, durante o desenrolar dos dois anos em que estive em São Carlos; em especial, pela época que se seguiu logo após o acidente. Sem a ajuda de vocês, teria sido muito mais difícil do que realmente foi.
- E, pra não dizerem que deixei alguém de fora, a todos os colegas, professores e funcionários do IFSC-USP que, de uma forma ou de outra, fizeram que o tempo que passou fosse melhor.

*Este trabalho foi financiado pelo Conselho Nacional
de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).*

Conteúdo

Resumo	i
Abstract	ii
1 Introdução	1
1.1 Densidade Espectral para um Nível Localizado num Metal.	4
1.2 Densidade Espectral para Duas Impurezas Localizadas num Metal.	7
1.3 O Grupo de Renormalização Numérico	11
1.4 O Que Vem Por Aí...	12
2 O Modelo de Kondo de Tunelamento.	13
3 Grupo de Renormalização Numérico para o Modelo de Duas Impurezas.	18
3.1 Adaptação do Hamiltoniano de Duas Impurezas ao Grupo de Renormalização Numérico.	18
3.2 Discretização Logarítmica da Banda de Condução	24
3.3 Leis de Conservação.	31
3.4 Diagonalização	32
4 Resultados	38

4.1	Estudo das defasagens da banda de condução	39
4.2	Estudo do Comportamento das Curvas no Espaço de Parâmetros	44
4.2.1	S e Δ fixos, G variando	44
4.2.2	S e G fixos, Δ variando	45
4.2.3	G e Δ fixos, S variando	46
4.3	Estudo das Curvas Obtidas em Função do Parâmetro $\sqrt{1 - S^2} \sin \delta$	46
4.4	Melhorias nas Curvas	49
5	Discussão	51

Lista de Figuras

1.1	<i>A corrente fotoemitida é proporcional à densidade espectral, $\rho(\varepsilon)$. A excitação ε é dada por $\varepsilon = E_F - E_I = \omega - \omega_T$, sendo ω_T o limiar de fotoemissão e ω a frequência de raio-X.</i>	3
1.2	<i>Representação esquemática do problema de um nível localizado num metal. Se não há interação com a banda de condução, apenas fótons de frequência ω_T são capazes de arrancar elétrons do nível d.</i>	4
1.3	<i>Esquema das curvas de densidade espectral para o problema de nível localizado. (a) Não há interação entre o nível localizado e a banda de condução. Com isto, a densidade espectral é dada por uma função δ. (b) O nível localizado d possui tempo de vida infinito, resultando numa divergência para $\omega = \omega_T$. (c) O nível localizado d possui tempo de vida finito e com isto, há uma suavização da divergência.</i>	6
1.4	<i>Representação esquemática do problema de dois níveis localizados num metal. (a) Os dois níveis degenerados, d_1 e d_2, estão localizados em posições diferentes do metal. (b) Abertura da degenerescência dos níveis localizados em orbitais ligante e anti-ligante, separados pela energia Δ.</i>	7

1.5	<i>Quando não há interação entre os elétrons da banda de condução e o buraco nas impurezas ($G = 0$), as densidades espectrais ρ_+ e ρ_- são deltas de Dirac localizadas em $\varepsilon = 0$ e $\varepsilon = \Delta$, respectivamente.</i>	8
1.6	<i>Representação esquemática de algumas possíveis excitações no problema de dois níveis localizados. (a) Qualquer energia maior que ω_T pode criar um buraco no nível d_-. (b) Qualquer energia maior que $\omega_T + \Delta$ pode criar um buraco no nível d_+. (c) Energias entre ω_T e $\omega_T + \Delta$ podem criar um buraco no nível d_+ e o elétron do nível d_- decai não-radiativamente para o nível d_+, de tal forma que a energia total do sistema é conservada.</i>	9
1.7	<i>Curvas de densidades espectrais par e ímpar, obtidas nesta dissertação através do Grupo de Renormalização Numérico. Estas curvas têm as formas esperadas.</i>	10
1.8	<i>Esquema da discretização logarítmica da banda de condução pelos parâmetros $\Lambda > 1$ e $z > 0$.</i>	12
3.1	<i>À esquerda, banda de condução de largura $2D$, esfericamente simétrico em torno do nível de Fermi (ε_F). À direita, Banda de condução de largura $2AD$. Excitações próximas ao nível de Fermi, ε_1 e ε_2 são indistinguíveis nas duas bandas. Excitações grandes, ε_3 não são identificadas nas duas bandas.</i>	26
3.2	<i>Densidade Espectral para dois valores de z consecutivos. Sabendo o valor da densidade espectral nestes dois valores de z, é possível saber o valor de ρ também para uma energia ε que está entre $E_F(z_1)$ e $E_F(z_2)$ e desta forma a curva da densidade espectral pode ser suavizada.</i>	35

4.1	<i>Curvas das densidades espectrais par, ρ_+, e ímpar, ρ_-, para os mesmos valores dos parâmetros G, S e Δ.</i>	40
4.2	<i>Curvas da densidade espectral ρ_+ para três diferentes valores de G.</i>	45
4.3	<i>Curvas da densidade espectral ρ_+ para dois diferentes valores de Δ.</i>	47
4.4	<i>Curvas da densidade espectral ρ_+ para três diferentes valores de S.</i>	48
4.5	<i>Curvas da densidade espectral ρ_+ para dois diferentes valores do parâmetro β da equação 4.10.</i>	50

Resumo

Utilizando o Grupo de Renormalização Numérico, técnica criada por Wilson (1975) para o estudo do problema de uma impureza magnética em metal não magnético, foi calculada a densidade espectral no Modelo de Kondo de Tunelamento, que consiste em duas impurezas, interagentes, localizadas em posições fixas num metal e separados por uma distância R . Os níveis de energia destas impurezas são degenerados e, portanto, um buraco criado em uma delas, tunela entre os dois níveis de energia de impurezas com uma taxa de tunelamento Δ .

A simetria de inversão, presente no problema, possibilita a separação da densidade espectral em duas partes, uma correspondendo à evolução do buraco criado no orbital ligante, chamada densidade espectral par e outra correspondendo à evolução do buraco criado no orbital anti-ligante, chamada densidade espectral ímpar. O comportamento das curvas, em certos limites, obedece à lei de potência proposta por Doniach e Šunjić [6], cujos expoentes podem ser encontrados em termos das defasagem da banda de condução.

O estudo deste problema já foi feito anteriormente, mas sem explorar uma lei de conservação existente no problema, a conservação da paridade. Esse número quântico adicional (paridade) permite uma diagonalização numérica mais eficiente e portanto permite que se explore melhor o espaço de parâmetros do modelo.

Abstract

Using the Numerical Renormalization Group, a technique created by Wilson (1975), to study the problem of one magnetic impurity in a non-magnetic metal, the spectral density in the Kondo Tunneling Model was calculated . This model consists of two interacting impurities located at fixed positions in a metal, separated by a distance R . Since the energy levels of such impurities are degenerate, a hole, which is created in one of them, can tunnel between the two levels at a rate Δ .

The inversion symmetry of the problem allows the spectral density to be split in two parts. One of them describes the evolution of the hole created in the bonding orbital, the even spectral density, and the other describes the evolution of the hole created in the anti-bonding orbital, the odd spectral density. The behavior of the curves obtained obeys, certain limits being taken, the power law proposed by Doniach and Šunjić whose exponents can be found in terms of the phase shifts of the conduction band.

This problem has been studied previously. However, parity conservation was not exploited in such study. This quantum number, taken into account in the present work, allows for more efficient numerical diagonalization and thus a better study of the model's parameter space.

Capítulo 1

Introdução

Em 1976, Kondo[1] tratou o problema do tunelamento de um íon entre dois sítios da rede de um metal. Em seu modelo, ele levou em conta a interação Coulombiana deste íon com os elétrons da banda de condução, que tendem a blindar o potencial criado pelo íon. O fato de o íon tunelar entre dois sítios provoca uma flutuação na distribuição de cargas da banda de condução, pois estas acompanham o movimento do íon, na tentativa de blindar o potencial por ele criado.

Kondo propôs um modelo com as seguintes características :

(i) A carga da banda de condução é conservada, bem como a carga da impureza. Portanto, não há troca de carga entre a banda de condução e a impureza.

(ii) A paridade total do sistema é conservada. Em outras palavras, os níveis de energia dos sítios entre os quais a impureza pode tunelar são degenerados e abrem-se em dois níveis com paridade bem definida: um ligante (par) e o outro anti-ligante (ímpar). Então quando muda a paridade da impureza, muda também a paridade da banda de condução.

O Hamiltoniano que descreve este problema pode ser escrito como :

$$\begin{aligned}
H = & \int d\vec{k} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^{\dagger} c_{\vec{k}} - \frac{\Delta}{2} (d_1^{\dagger} d_2 + d_2^{\dagger} d_1) + \\
& + G \Psi^{\dagger} \left(\frac{\vec{R}}{2} \right) \Psi \left(\frac{\vec{R}}{2} \right) d_1 d_1^{\dagger} + G \Psi^{\dagger} \left(-\frac{\vec{R}}{2} \right) \Psi \left(-\frac{\vec{R}}{2} \right) d_2 d_2^{\dagger},
\end{aligned} \tag{1.1}$$

onde o primeiro termo do lado direito representa a banda de condução do metal, o segundo termo representa o tunelamento do íon entre as impurezas e os dois últimos termos representam o espalhamento dos elétrons de condução devido ao potencial Coulombiano do íon, G .

Originalmente, Kondo calculou a taxa de tunelamento efetiva, usando teoria de perturbação. Posteriormente, Yamada [2, 3] determinou a expressão exata da taxa de tunelamento efetiva. Depois disso, outras grandezas dinâmicas [4] e termodinâmicas [5] foram calculadas, utilizando-se o Grupo de Renormalização Numérico (GRN), que será usado neste trabalho.

Nesta dissertação o sistema a ser estudado é o de duas impurezas adsorvidas num metal onde é criado um buraco numa delas. Este buraco pode tunelar entre as impurezas com uma taxa de tunelamento Δ . Os elétrons da banda de condução interagem eletrostaticamente com o buraco e na tentativa de blindar o potencial por ele criado, tem-se não mais uma taxa de tunelamento Δ e sim uma taxa de tunelamento efetiva Δ^* . Este problema é completamente equivalente àquele proposto por Kondo, sendo que no lugar da impureza tunelante foi considerado um buraco tunelante e no lugar dos dois sítios do metal foram consideradas duas impurezas, que podem ser dois átomos isolados ou ainda dois átomos formando uma molécula.

A grandeza a ser calculada é a densidade espectral que caracteriza a evolução do buraco criado no nível localizado, definida pela regra de ouro de Fermi que pode ser expressa como

$$\rho(\varepsilon) = \sum_{|F\rangle} |\langle F | d | I \rangle|^2 \delta(\varepsilon - E_F) \tag{1.2}$$

RECEBIDO EM 15/03/2012

onde $|F\rangle$ é o estado final do sistema após a criação do buraco, $|I\rangle$ é o estado inicial e d é o operador de destruição de elétrons no nível localizado.

A densidade espectral pode ser visualizada da seguinte maneira: inicialmente a impureza está neutra, e poderá conter um elétron num nível. Sob a ação de raios-x, o elétron é fotoemitido para o contínuo. O buraco deixado será blindado pelos elétrons de condução. A corrente fotoemitida é proporcional à densidade espectral, definida na equação (1.2). Neste caso, a excitação ε é identificada como sendo a frequência ω do raio-x, menos a frequência de limiar ω_T (frequência mínima de fotoemissão). Devido a esta proporcionalidade entre densidade espectral e corrente fotoemitida, algumas vezes, nesta dissertação, far-se-á referência ao problema do raio-x em vez de se falar explicitamente em densidade espectral.

Figura 1.1: A corrente fotoemitida é proporcional à densidade espectral, $\rho(\varepsilon)$. A excitação ε é dada por $\varepsilon = E_F - E_I = \omega - \omega_T$, sendo ω_T o limiar de fotoemissão e ω a frequência de raio-X.

O problema da densidade espectral de um nível localizado pode ser entendido através dos resultados de Doniach e Šunjić[6]. Espera-se que o problema de duas impurezas, aqui

representadas por dois níveis localizados, apresente resultados equivalentes aos encontrados por estes autores, em certos limites.

1.1 Densidade Espectral para um Nível Localizado num Metal.

Se o nível localizado (d) não tem nenhuma interação com a banda de condução do metal hospedeiro, o problema pode ser tratado como dois sistemas independentes. Portanto, para que se tenha conservação de energia, apenas fótons cuja frequência é dada pela frequência de limiar, ω_T , são capazes de arrancar o elétron do nível localizado, Figura 1.2, ou seja, a densidade espectral deste nível deve ser uma função δ nesta energia ($\delta(\omega - \omega_T)$), como está mostrado na curva (a) da Figura 1.3.

Figura 1.2: *Representação esquemática do problema de um nível localizado num metal. Se não há interação com a banda de condução, apenas fótons de frequência ω_T são capazes de arrancar elétrons do nível d .*

Se um buraco deixado no nível d interage eletrostaticamente com os elétrons da banda

de condução do metal, o Hamiltoniano a ser tratado é de muitos corpos e não se pode concluir a forma da curva de maneira tão direta. Doniach e Šunjić (1970) encontraram, considerando que o buraco criado no nível localizado tenha tempo de vida infinito, que a densidade espectral próximo ao limiar de fotoemissão, obedece a uma lei de potência dada por:

$$\rho(\omega) = \frac{I_0}{(\omega - \omega_T)^\alpha} \quad (1.3)$$

com

$$\alpha = 1 - \sum_l (2l + 1) \left(\frac{\delta_l}{\pi} \right)^2, \quad (1.4)$$

onde δ_l é a defasagem da banda de condução no nível de Fermi, dos elétrons de momentum angular l . A forma da curva obtida para $\rho(\omega)$ é mostrada na curva (b) da Figura 1.3.

Como pode ser observado, devido à interação com a banda de condução, a radiação necessária para arrancar o elétron do nível d pode ser tal que seus fótons tenham energia maior que o limiar ω_T . Isto acontece porque a energia $\varepsilon = \omega - \omega_T$ excedente será responsável pela excitação de pares elétron-buraco na banda de condução.

A lei de potência encontrada acima reflete o caso em que o buraco criado no nível d tem tempo de vida infinito. No caso em que o buraco criado neste nível localizado tenha tempo de vida finito, a curva da densidade espectral não obedece simplesmente à lei de potência (1.3). Para descrever este caso Doniach e Šunjić multiplicaram o propagador de buracos pelo termo $\exp(-\gamma t)$, obtendo a seguinte expressão:

$$\rho(\varepsilon) = \frac{\Gamma(\alpha)}{(\varepsilon^2 + \gamma^2)^{(1-\alpha)/2}} \cos \left(\frac{\pi\alpha}{2} + \Theta(\varepsilon) \right) \quad (1.5)$$

com

$$\Theta(\varepsilon) = \alpha \tan^{-1} \left(\frac{\varepsilon}{\gamma} \right), \quad (1.6)$$

Figura 1.3: Esquema das curvas de densidade espectral para o problema de nível localizado.

(a) Não há interação entre o nível localizado e a banda de condução. Com isto, a densidade espectral é dada por uma função δ . (b) O nível localizado d possui tempo de vida infinito, resultando numa divergência para $\omega = \omega_T$. (c) O nível localizado d possui tempo de vida finito e com isto, há uma suavização da divergência.

onde tem-se $\varepsilon = \omega - \omega_T$. A forma da curva é, agora, dada pela curva (c) da Figura 1.3. O lado direito da curva está relacionado com a interação coulombiana do buraco com os elétrons de condução e seu comportamento é semelhante ao encontrado na curva divergente (b) dada pela lei de potência (1.3). O lado esquerdo, por sua vez, tem a forma mais arredondada e reflete a vida média do buraco.

1.2 Densidade Espectral para Duas Impurezas Localizadas num Metal.

Os resultados da seção anterior foram obtidos para o caso de um único nível localizado. No problema tratado nesta dissertação tem-se duas impurezas interagentes localizadas em posições diferentes e em níveis equivalentes de energia (Figura 1.4-a). Este problema

Figura 1.4: Representação esquemática do problema de dois níveis localizados num metal.

(a) Os dois níveis degenerados, d_1 e d_2 , estão localizados em posições diferentes do metal.

(b) Abertura da degenerescência dos níveis localizados em orbitais ligante e anti-ligante, separados pela energia Δ .

é descrito pelo Hamiltoniano de Kondo de tunelamento (1.1). A degenerescência entre os níveis de energia d_1 e d_2 é aberta em um orbital ligante, d_+ , e outro anti-ligante, d_- , separados por uma energia Δ (Figura 1.4-b):

$$d_+ = \frac{d_1 + d_2}{2} \quad (1.7)$$

e

$$d_- = \frac{d_1 - d_2}{2}, \quad (1.8)$$

de tal forma que a densidade espectral possa ser separada em duas partes: ρ_+ , densidade espectral par, que descreve a evolução do buraco criado no nível ligante d_+ e ρ_- , densidade espectral ímpar, que descreve a evolução do buraco criado no nível anti-ligante d_- . Tem-se, então, um problema com dois níveis localizados num metal devendo-se, portanto, observar quais as expectativas para as duas densidades espectrais ρ_+ e ρ_- com base nos resultados de um único centro.

Para o caso em que o parâmetro G é nulo, não há espalhamento dos elétrons de condução pelo buraco tunelante. Se não há interação entre a banda e as impurezas, as densidades espectrais ρ_+ e ρ_- são funções delta: $\rho_-(\varepsilon) = \delta(\varepsilon)$ e $\rho_+(\varepsilon) = \delta(\varepsilon - \Delta)$, semelhante ao caso (a) da Figura 1.3.

Figura 1.5: Quando não há interação entre os elétrons da banda de condução e o buraco nas impurezas ($G = 0$), as densidades espectrais ρ_+ e ρ_- são deltas de Dirac localizadas em $\varepsilon = 0$ e $\varepsilon = \Delta$, respectivamente.

Para $G \neq 0$, ou seja, com interação coulombiana entre o buraco e os elétrons da banda de condução, espera-se que as densidades espectrais ρ_+ e ρ_- tenham um comportamento tipo lei de potência, dado pela equação(1.3), ao menos em algumas regiões do espectro. Quando a energia do raio-x é maior do que o limiar de fotoemissão, pode ser criado um buraco no nível d_- (Figura 1.6-a). Entretanto, nenhuma energia menor que o limiar de fotoemissão poderá criar um buraco neste nível. Sendo assim, a densidade espectral

Figura 1.6: Representação esquemática de algumas possíveis excitações no problema de dois níveis localizados. (a) Qualquer energia maior que ω_T pode criar um buraco no nível d_- . (b) Qualquer energia maior que $\omega_T + \Delta$ pode criar um buraco no nível d_+ . (c) Energias entre ω_T e $\omega_T + \Delta$ podem criar um buraco no nível d_+ e o elétron do nível d_- decai não-radiativamente para o nível d_+ , de tal forma que a energia total do sistema é conservada.

Figura 1.7: *Curvas de densidades espectrais par e ímpar, obtidas nesta dissertação através do Grupo de Renormalização Numérico. Estas curvas têm as formas esperadas.*

ímpar, ρ_- , tem a forma divergente da lei de potência de Doniach e Šunjić, como mostrado na curva (a) da Figura 1.7. Um processo semelhante a esse pode ocorrer na criação de um buraco no nível d_+ , onde qualquer frequência maior que $\omega_T + \Delta$ pode arrancar um elétron deste nível (Figura 1.6-b). Entretanto, neste caso, mesmo uma energia menor que $\omega_T + \Delta$ é capaz de criar um buraco no nível d_+ , pois o elétron do nível d_- pode decair não-radiativamente para o nível d_+ (Figura 1.6-c). Portanto, a curva da densidade espectral par, ρ_+ , tem a divergência suavizada, como mostra a curva (b) da Figura 1.7.

Deve-se chamar atenção ao fato de que o Hamiltoniano tratado aqui conserva a paridade total do sistema. Como o decaimento não-radiativo do elétron do nível d_- para o nível d_+ muda a paridade nas impurezas, deve ocorrer uma troca de paridade na banda. Isto pode ser observado na Figura 1.6-c onde a banda de condução foi dividida em dois canais: canal par, composta pelos elétrons com função de onda par, e canal ímpar, onde os elétrons têm função de onda ímpar.

Na próxima seção será mostrada a técnica de Grupo de Renormalização Numérico, que será empregada para o cálculo da densidade espectral neste problema.

1.3 O Grupo de Renormalização Numérico

A técnica utilizada para o cálculo da densidade espectral neste trabalho é o Grupo de Renormalização Numérico (GRN) proposta por Wilson[7] para o estudo do problema Kondo de uma impureza magnética em metal não-magnético[8]. Apesar de algumas adaptações serem necessárias, o método usado para o caso de duas impurezas é muito semelhante ao usado por Wilson.

Este método consiste na discretização logarítmica da banda de condução, de tal forma que sejam enfatizadas as energias próximas ao nível de Fermi. Um esquema desta discretização é mostrado na Figura 1.8.

Depois de discretizado, o Hamiltoniano é escrito por escalas de energia, obtendo-se um Hamiltoniano para cada uma destas escalas, advindas da discretização. O primeiro Hamiltoniano, H_0 , é resolvido analiticamente e a partir deste resolve-se os Hamiltonianos subsequentes, sendo que a resolução de H_{N+1} depende do resultado de H_N .

Figura 1.8: *Esquema da discretização logarítmica da banda de condução pelos parâmetros $\Lambda > 1$ e $z > 0$.*

1.4 O Que Vem Por Aí...

O capítulo 2 discute o modelo de Kondo de Tunelamento. Neste capítulo, será estudado em maiores detalhes o Hamiltoniano de tunelamento.

O capítulo 3 trata do Grupo de Renormalização Numérico. Será mostrada a adaptação do modelo a este método. Será tratado também o problema específico da densidade espectral, do ponto de vista deste método.

No capítulo 4 são apresentados os resultados obtidos para as curvas de densidade espectral. Além da exploração do espaço de parâmetros do modelo, foi feito um estudo das defasagens da banda de condução, com uma determinação do expoente α de Doniach-Šunjić para uma das curvas obtidas nesta dissertação. Ainda, foi estudada a dependência das curvas de densidade espectral com o parâmetro $\beta = \sqrt{1 - S^2} \sin \delta$, [5].

Finalmente, no capítulo 5, uma breve discussão dos resultados é feita, bem como algumas sugestões de futuros trabalhos neste assunto.

Capítulo 2

O Modelo de Kondo de Tunelamento.

O interesse nesta dissertação é calcular a densidade espectral para o problema em que existem duas impurezas adsorvidas num metal, localizadas em posições fixas $-\frac{\vec{R}}{2}$ e $\frac{\vec{R}}{2}$. Este problema possui simetria de inversão, pois as impurezas estão em níveis de energia degenerados.

Quando é criado um buraco em uma das impurezas, ocorre uma atração eletrostática entre este buraco e os elétrons da banda de condução. Este buraco pode tunelar entre as duas impurezas com uma taxa de tunelamento Δ e na tentativa de blindá-lo, os elétrons da banda de condução acompanham este tunelamento. Devido a isto a taxa de tunelamento, Δ , assume um valor efetivo Δ^* , menor que Δ .

Esse problema pode ser descrito pelo Hamiltoniano de Kondo de Tunelamento que foi proposto por Kondo em 1976 [1] para tratar o tunelamento de um íon adsorvido num metal, entre dois sítios equivalentes da rede, levando em conta a interação coulombiana com os elétrons de condução. Este problema, proposto por Kondo, é completamente equivalente ao problema de duas impurezas que é de interesse nesta dissertação.

O Hamiltoniano de Kondo de Tunelamento, usado para descrever o problema em questão, é escrito como:

$$H = \int d\vec{k} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^{\dagger} c_{\vec{k}} - \frac{\Delta}{2} (d_1^{\dagger} d_2 + d_2^{\dagger} d_1) + \sum_{\alpha\alpha'\vec{k}\vec{k}'} J_{\alpha\alpha'}(\vec{k}' - \vec{k}) V(\vec{k}' - \vec{k}) d_{\alpha'}^{\dagger} d_{\alpha} c_{\vec{k}}^{\dagger} c_{\vec{k}'}, \quad (2.1)$$

onde o primeiro termo representa a banda de condução do metal, o segundo representa o tunelamento do buraco entre os sítios $R_1 = -\frac{R}{2}$ e $R_2 = \frac{+R}{2}$ e o terceiro termo, o espalhamento dos elétrons de condução pelo buraco. O operador $d_1(d_2)$ destrói um elétron na posição $R_1(R_2)$, $c_{\vec{k}}$ destrói um elétron de momentum $\vec{k}$ na banda de condução, $V(\vec{k}' - \vec{k})$ é a transformada de Fourier do potencial Coulombiano do buraco tunelante e $J_{\alpha\alpha'}(\vec{k}' - \vec{k})$ é o elemento de matriz do potencial Coulombiano entre os estados de dois corpos $|k, d_{\alpha}\rangle$, dado por:

$$J_{\alpha\alpha'}(\vec{k}' - \vec{k}) = \int e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}} \varphi_{\alpha'}^*(\vec{r}) \varphi_{\alpha}(\vec{r}) d^3\vec{r}, \quad (2.2)$$

com $\alpha = +, -$ representando as combinações ligante e anti-ligante dos orbitais de impureza d_1 e d_2 , respectivamente:

$$d_+ = \frac{d_1 + d_2}{\sqrt{2}} \quad e \quad d_- = \frac{d_1 - d_2}{\sqrt{2}}, \quad (2.3)$$

e $\varphi_{\alpha}(\vec{r})$ são as funções de onda dos orbitais ligante ($\alpha = +$) e anti-ligante ($\alpha = -$).

Para escrever este Hamiltoniano na forma final mostrada por Kondo, foram utilizados os dois estados de impureza $\varphi_+(\vec{r})$ e $\varphi_-(\vec{r})$ para reescrever as matrizes de Pauli na forma:

$$\sigma_x = d_+^{\dagger} d_- + d_-^{\dagger} d_+ \quad (2.4)$$

e

$$\sigma_z = d_+^{\dagger} d_+ - d_-^{\dagger} d_- \quad (2.5)$$

com $\sigma_z^2 = \sigma_x^2 = 1$. A partir destas matrizes, o Hamiltoniano(2.1) é escrito na forma:

$$H = \int d\vec{k} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}} - \frac{\Delta}{2} (d_1^\dagger d_2 + d_2^\dagger d_1) + \quad (2.6)$$

$$\sum_{\vec{k}\vec{k}'} (L_{\vec{k}\vec{k}'} + M_{\vec{k}\vec{k}'} \sigma_z + N_{\vec{k}\vec{k}'} \sigma_x) c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}'} ,$$

onde

$$L_{\vec{k}\vec{k}'} = \frac{V(\vec{k}' - \vec{k})}{2} [J_{++}(\vec{k}' - \vec{k}) + J_{--}(\vec{k}' - \vec{k})]; \quad (2.7)$$

$$M_{\vec{k}\vec{k}'} = \frac{V(\vec{k}' - \vec{k})}{2} [J_{++}(\vec{k}' - \vec{k}) - J_{--}(\vec{k}' - \vec{k})] \quad (2.8)$$

e

$$N_{\vec{k}\vec{k}'} = V(\vec{k}' - \vec{k}) J_{+-}(\vec{k}' - \vec{k}). \quad (2.9)$$

Para simplificar o problema, Kondo assumiu que as funções $\varphi_\alpha(\vec{r})$ fossem escritas em termos das funções $\varphi_1(\vec{r})$ e $\varphi_2(\vec{r})$, localizadas nas posições $\frac{-\vec{R}}{2}$ e $\frac{\vec{R}}{2}$, respectivamente:

$$\varphi_+(\vec{r}) = \frac{\varphi_1(\vec{r}) + \varphi_2(\vec{r})}{\sqrt{2}} \quad e \quad \varphi_-(\vec{r}) = \frac{\varphi_1(\vec{r}) - \varphi_2(\vec{r})}{\sqrt{2}}, \quad (2.10)$$

e desta forma os termos (2.7), (2.8) e (2.9) são reescritos na forma:

$$L_{\vec{k}\vec{k}'} = \frac{V(\vec{k}' - \vec{k})}{2} \int e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}} [\varphi_1(\vec{r})^2 + \varphi_2(\vec{r})^2] d^3r; \quad (2.11)$$

$$M_{\vec{k}\vec{k}'} = \frac{V(\vec{k}' - \vec{k})}{2} \int e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}} \varphi_1(\vec{r}) \varphi_2(\vec{r}) d^3r \quad (2.12)$$

e

$$N_{\vec{k}\vec{k}'} = \frac{V(\vec{k}' - \vec{k})}{2} \int e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}} [\varphi_1(\vec{r})^2 - \varphi_2(\vec{r})^2] d^3r. \quad (2.13)$$

Como as funções $\varphi_1(\vec{r})$ e $\varphi_2(\vec{r})$ são localizadas,[1] em posições diferentes,

$$\varphi_1(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \frac{\vec{R}}{2}) \quad e \quad \varphi_2(\vec{r}) = \delta(\vec{r} + \frac{\vec{R}}{2}) \quad (2.14)$$

e portanto, o produto $\varphi_1(\vec{r})\varphi_2(\vec{r})$ é pequeno e portanto o termo $M_{\vec{k}\vec{k}'}$ é desprezível e os termos $L_{\vec{k}\vec{k}'}$ e $N_{\vec{k}\vec{k}'}$ podem ser escritos de maneira mais simplificada:

$$L_{\vec{k}\vec{k}'} = V(\vec{k}' - \vec{k}) \cos(\vec{k}' - \vec{k}) \frac{\vec{R}}{2} \quad (2.15)$$

e

$$N_{\vec{k}\vec{k}'} = V(\vec{k}' - \vec{k}) i \sin(\vec{k}' - \vec{k}) \frac{\vec{R}}{2}. \quad (2.16)$$

Para a implementação do Grupo de Renormalização Numérico, que é a técnica utilizada para diagonalizar este Hamiltoniano quártico, o Hamiltoniano (2.6) deve passar por várias transformações.

Os operadores d_α , que destroem elétrons nos orbitais ligante ($\alpha = +$) e anti-ligante ($\alpha = -$), podem ser escritos, novamente, como na equação (2.3), em termos dos operadores d_1 e d_2 , que destroem elétrons nas posições $\frac{\vec{R}}{2}$ e $-\frac{\vec{R}}{2}$, respectivamente.

Em termos dos operadores d_1 e d_2 , o Hamiltoniano (2.6) fica na forma

$$H = \int d\vec{k} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}} - \frac{\Delta}{2} (d_1^\dagger d_2 + d_2^\dagger d_1) + \sum_{\vec{k}\vec{k}'} V(\vec{k}' - \vec{k}) [e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \frac{\vec{R}}{2}} d_1 d_1^\dagger + e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \frac{\vec{R}}{2}} d_2 d_2^\dagger] c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}'}, \quad (2.17)$$

onde foi levada em conta a simetria de inversão existente no problema, ou seja, a troca de d_1 por d_2 e $\vec{R}$ por $-\vec{R}$ e vice versa. Com isto tem-se que $d_1^\dagger d_1 - d_2^\dagger d_2$ pode ser trocado por $d_1 d_1^\dagger - d_2 d_2^\dagger$. Esta forma é mais conveniente porque o espalhamento dos elétrons pode ser visto em termos da contagem de buraco ($d_i d_i^\dagger$) e não da contagem de elétrons ($d_i^\dagger d_i$) na impureza.

A blindagem eletrostática dos elétrons da banda de condução, em torno do átomo tunelante, resulta num potencial Coulombiano de curto alcance. Devido a isto, a transformada de Fourier do potencial Coulombiano, $V(\vec{k}' - \vec{k})$, pode ser considerada constante:

$$V(\vec{k}' - \vec{k}) = G. \quad (2.18)$$

Definindo o operador de campo

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} c_{\vec{k}}, \quad (2.19)$$

que destrói elétrons da banda de condução no sítio $\vec{r}$, o Hamiltoniano (2.17) fica, então:

$$\begin{aligned} H = & \int d\vec{k} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^{\dagger} c_{\vec{k}} - \frac{\Delta}{2} (d_1^{\dagger} d_2 + d_2^{\dagger} d_1) + \\ & + G \Psi^{\dagger}(\frac{\vec{R}}{2}) \Psi(\frac{\vec{R}}{2}) d_1 d_1^{\dagger} + G \Psi^{\dagger}(-\frac{\vec{R}}{2}) \Psi(-\frac{\vec{R}}{2}) d_2 d_2^{\dagger} \end{aligned} \quad (2.20)$$

Deve-se lembrar que este problema possui simetria de inversão e devido a isto, temos conservação de paridade, ou seja, sempre que a paridade das impurezas muda, a paridade da banda de condução deve mudar também, para que exista conservação no sistema como um todo.

Além disto, não há troca de carga entre a banda de condução e as impurezas, ou seja, há conservação de carga, não só no sistema como um todo, como também, na banda de condução e nas impurezas, separadamente.

Estas leis de conservação serão muito úteis para a diagonalização do Hamiltoniano (2.20), mostrada no capítulo 3, visto que diminuem sensivelmente o tamanho das matrizes existentes no problema.

Capítulo 3

Grupo de Renormalização Numérico para o Modelo de Duas Impurezas.

O grupo de renormalização numérico foi desenvolvido por Wilson[7] para o estudo de problemas de muitos corpos. Wilson estudou, através do grupo de renormalização numérico, o problema de uma impureza, no Hamiltoniano de Anderson e no Hamiltoniano de Kondo. O Hamiltoniano tratado neste trabalho, o Hamiltoniano de Kondo de tunelamento, considera o problema de duas impurezas adsorvidas num metal. O desenvolvimento necessário para a transformação de Grupo de Renormalização que será mostrado neste capítulo é basicamente o mesmo proposto por Wilson, adaptado para o caso de duas impurezas.

3.1 Adaptação do Hamiltoniano de Duas Impurezas ao Grupo de Renormalização Numérico.

Depois das transformações feitas no capítulo 2, o Hamiltoniano de Kondo de Tunelamento, para descrever o problema de duas impurezas, foi escrito na forma :

$$\begin{aligned}
H = & \int d^3\vec{k} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}} - \frac{\Delta}{2} (d_1^\dagger d_2 + d_2^\dagger d_1) + \\
& + G \Psi^\dagger \left(\frac{\vec{R}}{2} \right) \Psi \left(\frac{\vec{R}}{2} \right) d_1 d_1^\dagger + G \Psi^\dagger \left(-\frac{\vec{R}}{2} \right) \Psi \left(-\frac{\vec{R}}{2} \right) d_2 d_2^\dagger,
\end{aligned} \tag{3.1}$$

sendo o primeiro termo deste Hamiltoniano correspondente à banda de condução do metal e o segundo, ao tunelamento do buraco entre as duas impurezas com taxa de tunelamento Δ . O terceiro termo representa o espalhamento dos elétrons da banda de condução devido à presença do buraco que tunela entre as duas impurezas.

Neste modelo, as impurezas, localizadas, não trocam elétrons com a banda de condução. Desta forma, o buraco criado em uma das impurezas, que estão inicialmente neutras, não pode ser preenchido pelos elétrons da banda de condução. A banda de condução é considerada simétrica em relação ao nível de Fermi, com largura $2D$ e isotrópica ($\varepsilon_{\vec{k}} = \varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$, onde m é a massa do elétron).

É conveniente escrever os termos do Hamiltoniano (3.1) em função da energia ε em vez do momentum $\vec{k}$. Isto pode ser feito porque ε depende apenas do módulo de $\vec{k}$.

Iniciando a modificação pelo operador de campo, $\Psi \left(\frac{\vec{R}}{2} \right)$:

$$\Psi \left(\frac{\vec{R}}{2} \right) = \int d^3k e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}/2} c_{\vec{k}} = \int d^3k \int d\varepsilon \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}/2} c_{\vec{k}} \tag{3.2}$$

Definindo

$$c_{1\varepsilon} = \frac{1}{\sqrt{\rho(\varepsilon)}} \int d^3k e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}/2} \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) c_{\vec{k}}, \tag{3.3}$$

onde a densidade de estados $\rho(\varepsilon) = \int d^3k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)$ é usada para a normalização do operador $c_{1\varepsilon}$, o operador de campo pode ser reescrito como

$$\Psi \left(\frac{\vec{R}}{2} \right) = \int_{-D}^D d\varepsilon \sqrt{\rho(\varepsilon)} c_{1\varepsilon}. \tag{3.4}$$

Num procedimento análogo ao mostrado acima, encontra-se

$$\Psi\left(-\frac{\vec{R}}{2}\right) = \int_{-D}^D d\varepsilon \sqrt{\rho(\varepsilon)} c_{2\varepsilon}; \quad (3.5)$$

com

$$c_{2\varepsilon} = \frac{1}{\sqrt{\rho(\varepsilon)}} \int d^3k e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}/2} \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) c_{\vec{k}}. \quad (3.6)$$

Entretanto, os operadores $c_{1\varepsilon}$ e $c_{2\varepsilon}$ não obedecem às relações de anti-comutação de férmions e sim à relação de anti-comutação

$$\{c_{2\varepsilon}, c_{2\varepsilon'}\} = \{c_{1\varepsilon}, c_{1\varepsilon'}\} = \delta(\varepsilon - \varepsilon'); \quad (3.7)$$

e

$$\{c_{1\varepsilon}, c_{2\varepsilon'}\} = \delta(\varepsilon - \varepsilon') \frac{\sin k(\varepsilon)R}{k(\varepsilon)R}, \quad (3.8)$$

onde

$$\frac{\sin k(\varepsilon)R}{k(\varepsilon)R} = \frac{1}{\sqrt{\rho(\varepsilon)}} \int d^3k e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_k). \quad (3.9)$$

Estes operadores seriam fermiônicos apenas se as impurezas estivessem na mesma posição ($R=0$). É interessante, no entanto, escrever operadores fermiônicos para qualquer que seja a separação entre as duas impurezas. Os operadores

$$s_{\varepsilon+} = \frac{1}{A_+} \left(\frac{c_{1\varepsilon} + c_{2\varepsilon}}{2} \right) \quad \text{e} \quad s_{\varepsilon-} = \frac{1}{A_-} \left(\frac{c_{1\varepsilon} - c_{2\varepsilon}}{2} \right), \quad (3.10)$$

onde

$$A_+^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\sin k(\varepsilon)R}{k(\varepsilon)R} \right) \quad \text{e} \quad A_-^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\sin k(\varepsilon)R}{k(\varepsilon)R} \right), \quad (3.11)$$

são fermiônicos e com paridade bem definida ($s_{\varepsilon+}$, par e $s_{\varepsilon-}$, ímpar). Escrevendo os operadores de campo em função desses operadores, tem-se

$$\Psi\left(-\frac{\vec{R}}{2}\right) = \int_{-D}^D d\varepsilon \sqrt{\rho(\varepsilon)} (A_+ s_{\varepsilon+} \pm A_- s_{\varepsilon-}). \quad (3.12)$$

O termo de espalhamento do Hamiltoniano (3.1)

$$H_{esp} = G\Psi^\dagger \left(\frac{\vec{R}}{2} \right) \Psi \left(\frac{\vec{R}}{2} \right) d_1 d_1^\dagger + G\Psi^\dagger \left(-\frac{\vec{R}}{2} \right) \Psi \left(-\frac{\vec{R}}{2} \right) d_2 d_2^\dagger \quad (3.13)$$

pode, então, ser reescrito na forma:

$$\begin{aligned} H_{esp} = & G \int \int_{-D}^D d\varepsilon d\varepsilon' \sqrt{\rho(\varepsilon)\rho(\varepsilon')} (A_+^2 s_{\varepsilon+}^\dagger s_{\varepsilon'+} + A_-^2 s_{\varepsilon-}^\dagger s_{\varepsilon'-} + \\ & + A_+ A_- s_{\varepsilon+} s_{\varepsilon'-} + A_- A_+ s_{\varepsilon-} s_{\varepsilon'+}) d_1 d_1^\dagger + \\ & + G \int \int_{-D}^D d\varepsilon d\varepsilon' \sqrt{\rho(\varepsilon)\rho(\varepsilon')} (A_+^2 s_{\varepsilon+}^\dagger s_{\varepsilon'+} + A_-^2 s_{\varepsilon-}^\dagger s_{\varepsilon'-} + \\ & - A_+ A_- s_{\varepsilon+} s_{\varepsilon'-} - A_- A_+ s_{\varepsilon-} s_{\varepsilon'+}) d_2 d_2^\dagger. \end{aligned}$$

É necessário, agora, reescrever o termo referente à banda de condução do metal em termos dos novos operadores $s_{\varepsilon+}$ e $s_{\varepsilon-}$. Para isto, os operadores $c_{\vec{k}}$ e $c_{\vec{k}}^\dagger$ são expandidos em harmônicos esféricos:

$$c_{\vec{k}} = \frac{1}{k} \sum_{l,m} Y_{l,m}(\Omega) c_{klm} \quad (3.14)$$

Assim,

$$H_{BC} = \sum_{l,m} \int d\vec{k} \varepsilon_k c_{klm}^\dagger c_{klm}. \quad (3.15)$$

Como consequência da isotropia da interação Coulombiana, introduzida quando foi feito $V(\vec{k}' - \vec{k}) = G$, constante, apenas elétrons com componente de momentum angular $m = 0$ são espalhados. Para ver em detalhes, consulte a página 31 da referência [5]. Denotando $c_{kl0} \equiv c_{kl}$, tem-se

$$H_{BC} = \sum_{l=0}^{\infty} \int dk \varepsilon_k c_{kl}^\dagger c_{kl}$$

Tendo em vista o interesse em escrever os operadores envolvidos neste modelo em termos da energia, no lugar do momentum k , é possível definir novos operadores, $c_{\varepsilon l}$, que obedecem às relações de anticomutação de férmions:

$$c_{kl} = \sqrt{\frac{d\varepsilon}{dk}} c_{\varepsilon l} \quad (3.16)$$

e com isto H_{bc} pode ser escrito como:

$$H_{BC} = \sum_{l=0}^{\infty} \int d\varepsilon \varepsilon c_{\varepsilon l}^{\dagger} c_{\varepsilon l}. \quad (3.17)$$

Os operadores $s_{\varepsilon p}$ podem ser expandidos na base dos operadores $c_{\varepsilon l}$:

$$s_{\varepsilon p} = \sum_l u_{pl} c_{\varepsilon l}, \quad (3.18)$$

com os coeficientes u_{pl} obedecendo $\sum_l u_{pl} u_{p'l}^* = \delta_{pp'}$, uma vez que a transformação é ortogonal. É preciso inverter esta transformação:

$$c_{\varepsilon l} = u_{+l}^* s_{\varepsilon+} + u_{-l}^* s_{\varepsilon-} + \dots, \quad (3.19)$$

onde (...) significa termos contendo operadores sem paridade definida. Como os termos de interação só contêm operadores com paridade definida, $s_{\varepsilon+}$ e $s_{\varepsilon-}$, serão considerados apenas estes operadores em H_{BC} . Os demais não devem contribuir para qualquer propriedade física advinda da presença da impureza. Dessa forma, então,

$$\begin{aligned} H_{BC} &= \int d\varepsilon \varepsilon \sum_l (u_{+l} s_{\varepsilon+}^{\dagger} + u_{-l} s_{\varepsilon-}^{\dagger} + \dots) (u_{+l}^* s_{\varepsilon+} + u_{-l}^* s_{\varepsilon-} + \dots) = \\ &\int d\varepsilon \varepsilon (s_{\varepsilon+}^{\dagger} s_{\varepsilon+} + s_{\varepsilon-}^{\dagger} s_{\varepsilon-} + \text{termos livres}) \end{aligned} \quad (3.20)$$

onde "termos livres" são aqueles sem paridade definida e que portanto não se acoplam.

Tem-se, então, o Hamiltoniano (3.1) completamente escrito em termos da energia, a partir dos novos operadores fermiônicos $s_{\varepsilon+}$ e $s_{\varepsilon-}$:

$$\begin{aligned}
H = & \int_{-D}^D d\varepsilon \varepsilon (s_{\varepsilon+}^\dagger s_{\varepsilon+} + s_{\varepsilon-}^\dagger s_{\varepsilon-}) - \frac{\Delta}{2} (d_1^\dagger d_2 + d_2^\dagger d_1) + \\
& + G \int \int_{-D}^D d\varepsilon d\varepsilon' \sqrt{\rho(\varepsilon) \rho(\varepsilon')} (A_+^2(\varepsilon) s_{\varepsilon+}^\dagger s_{\varepsilon'++} + A_-^2(\varepsilon) s_{\varepsilon-}^\dagger s_{\varepsilon'-} + \\
& + A_+(\varepsilon) A_-(\varepsilon) s_{\varepsilon+}^\dagger s_{\varepsilon'-} + A_-(\varepsilon) A_+(\varepsilon) s_{\varepsilon-}^\dagger s_{\varepsilon'+}) d_1 d_1^\dagger + \\
& + G \int \int_{-D}^D d\varepsilon d\varepsilon' \sqrt{\rho(\varepsilon) \rho(\varepsilon')} (A_+^2(\varepsilon) s_{\varepsilon+}^\dagger s_{\varepsilon'++} + A_-^2(\varepsilon) s_{\varepsilon-}^\dagger s_{\varepsilon'-} + \\
& - A_+(\varepsilon) A_-(\varepsilon) s_{\varepsilon+}^\dagger s_{\varepsilon'-} - A_-(\varepsilon) A_+(\varepsilon) s_{\varepsilon-}^\dagger s_{\varepsilon'+}) d_2 d_2^\dagger
\end{aligned} \tag{3.21}$$

O fato de os acoplamentos $A_+(\varepsilon)$ e $A_-(\varepsilon)$, bem como a densidade de estados $\rho(\varepsilon)$, dependerem da energia, dificulta muito a implementação do grupo de renormalização. Entretanto, o interesse geral é de se estudar as propriedades próximas ao nível de Fermi. Devido a isto, considera-se os acoplamentos, $A_\pm(\varepsilon)$, assim como $\rho(\varepsilon)$, com o valor que assumem na energia de Fermi.

Esse procedimento, aparentemente inofensivo e praticado no caso de uma impureza, levou a sérias consequências no caso do Hamiltoniano de Kondo de duas impurezas com spin (modelo sem tunelamento) [8]. Esta aproximação tornou este modelo simétrico pela transformação partícula-buraco, o que é drástico neste caso. No modelo de Kondo de tunelamento, tratado nesta dissertação, essa aproximação não altera a assimetria partícula-buraco, o que nos faz acreditar que a aproximação não é muito drástica neste caso. Apenas o cálculo com $k \neq k_F$, hoje possível graças ao trabalho da referência [9], poderá esclarecer definitivamente este ponto.

Sendo assim, será considerado que, a baixas energias, tem-se:

$$A_\pm(\varepsilon) = A_\pm(\varepsilon_F) \tag{3.22}$$

e

$$\rho(\varepsilon) = \rho(\varepsilon_F) = \frac{1}{D}. \quad (3.23)$$

A partir desta aproximação pode-se escrever o Hamiltoniano modelo na forma:

$$\begin{aligned} \frac{H}{D} = & \int_{-1}^1 d\varepsilon \varepsilon (s_{\varepsilon+}^\dagger s_{\varepsilon+} + s_{\varepsilon-}^\dagger s_{\varepsilon-}) - \frac{\Delta}{2} (d_1^\dagger d_2 + d_2^\dagger d_1) + \\ & + G \int \int_{-1}^1 \{ A_+^2 d\varepsilon d\varepsilon' s_{\varepsilon+}^\dagger s_{\varepsilon'+} + A_-^2 d\varepsilon d\varepsilon' s_{\varepsilon-}^\dagger s_{\varepsilon'-} \\ & + A_+ A_- d\varepsilon d\varepsilon' (s_{\varepsilon+}^\dagger s_{\varepsilon'-} + s_{\varepsilon-}^\dagger s_{\varepsilon'+}) \} d_1 d_1^\dagger + \\ & + G \int \int_{-1}^1 \{ A_+^2 d\varepsilon d\varepsilon' s_{\varepsilon+}^\dagger s_{\varepsilon'+} + A_-^2 d\varepsilon d\varepsilon' s_{\varepsilon-}^\dagger s_{\varepsilon'-} \\ & - A_+ A_- d\varepsilon d\varepsilon' (s_{\varepsilon+}^\dagger s_{\varepsilon'-} - s_{\varepsilon-}^\dagger s_{\varepsilon'+}) \} d_2 d_2^\dagger, \end{aligned} \quad (3.24)$$

onde foi feito o escalonamento:

$$\frac{\varepsilon}{D} \rightarrow \varepsilon, \quad \frac{\Delta}{D} \rightarrow \Delta \quad e \quad \frac{G}{D} \rightarrow G. \quad (3.25)$$

Todavia, os operadores envolvidos neste problema atuam num contínuo de estados e, como o tratamento será feito numericamente, faz-se necessário introduzir operadores discretos. Isto será feito através da discretização logarítmica, objeto de estudo da próxima seção.

3.2 Discretização Logarítmica da Banda de Condução

A banda de condução do metal possui um contínuo de energia. Para o tratamento numérico deste problema é, obviamente, necessário definir uma base discreta de estados. A discretização da banda de condução deve levar em conta o fato de que as energias

de interesse estão próximas do nível de Fermi. Sendo a banda de condução um contínuo de energias, ela é invariante por mudança de escala próximo ao nível de Fermi, ou seja, se a banda de condução for multiplicada por um parâmetro Λ , a estrutura dos níveis de energia permanece a mesma próximo ao nível de Fermi (Figura 3.1). Sendo assim, Wilson propôs a discretização logarítmica, pois desta forma a condição de invariância de escala próximo ao nível de Fermi é preservada (ao menos de forma discreta).

Na discretização logarítmica representada na Figura 1.8 existe ainda a vantagem, em relação à discretização linear, de que é considerada uma quantidade maior de estados próximo ao nível de Fermi, que é a região de maior interesse, e apenas alguns estados próximos ao topo da banda são levados em conta. Esta ênfase nos estados de baixa energia economiza tempo computacional.

No procedimento tradicional de Wilson o parâmetro z não existe, sendo este uma generalização da discretização logarítmica. Ele foi criado para calcular propriedades dinâmicas [10] e, por isto, é muito importante neste trabalho. Entretanto, este parâmetro é também utilizado para eliminar oscilações originadas pelo método numérico nas curvas de propriedades termodinâmicas [11].

O parâmetro Λ ($\Lambda > 1$) deve ser escolhido de forma a poupar tempo computacional (chega-se rapidamente ao nível de Fermi com Λ grande) e, ao mesmo tempo, evitar perder muita informação. Ou seja, é importante conseguir o maior número de intervalos possíveis (Λ pequeno leva em conta uma quantidade maior de intervalos com energia longe do nível de Fermi).

Como pode ser observado (Figura 1.8), na discretização logarítmica a banda de condução é dividida em vários intervalos, onde o m -ésimo intervalo é aquele compreendido entre Λ^{-z-m-1} e Λ^{-z-m} ($m = 0, 1, 2, 3, \dots$), do lado positivo das energias e entre $-\Lambda^{-z-m-1}$ e $-\Lambda^{-z-m}$ do lado negativo. Para cada intervalo de energia, foi construído um conjunto

Figura 3.1: À esquerda, banda de condução de largura $2D$, esfericamente simétrico em torno do nível de Fermi (ε_F). À direita, Banda de condução de largura $2AD$. Excitações próximas ao nível de Fermi, ε_1 e ε_2 são indistinguíveis nas duas bandas. Excitações grandes, ε_3 não são identificadas nas duas bandas.

completo de funções de onda ortonormais, definidas por [7]:

$$\Phi_l^\pm(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{(1-\Lambda^{-z})^{1/2}} \exp\left(\pm \frac{2\pi i}{1-\Lambda^{-z}} l \varepsilon\right) & \Lambda^{-z} < \pm \varepsilon < 1 \\ 0 & \text{fora do intervalo} \end{cases} \quad (3.26)$$

e

$$\Phi_{ml}^\pm(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{(1-\Lambda^{-z})^{1/2}} \exp\left(\pm \frac{2\pi i l}{1-\Lambda^{-1}} \Lambda^{m+z} \varepsilon\right) & \Lambda^{-(z+m+1)} < \pm \varepsilon < \Lambda^{-(z+m)} \\ 0 & \text{fora do intervalo} \end{cases} \quad (3.27)$$

onde l é o índice de Fourier ($l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$) e $+$ ($-$) indica a forma da função se a

energia ε é positiva (negativa). São usados também as condições de contorno:

$$\Phi_l^\pm(\Lambda^{-z}) = \Phi_l^\pm(1) \quad (3.28)$$

e

$$\Phi m_l^\pm(\Lambda^{-(z+m+1)}) = \Phi_l^\pm(\Lambda^{-(z+m)}) \quad (3.29)$$

Os operadores $s_{\varepsilon p}$ podem ser projetados nesta nova base:

$$s_{\varepsilon p} = \sum_{m,l} \left\{ a_{pl} \Phi_l^{(+)} + b_{pl} \Phi_l^{(-)} + a_{pml} \Phi_{ml}^{(+)} + b_{pml} \Phi_{ml}^{(-)} \right\} \quad (3.30)$$

e desta forma ficam definidos novos operadores fermiônicos:

$$a_{pl} = \int_{-1}^1 d\varepsilon \left\{ \Phi_l^{(+)} \right\}^* s_{\varepsilon p} \quad ; \quad b_{pl} = \int_{-1}^1 d\varepsilon \left\{ \Phi_l^{(-)} \right\}^* s_{\varepsilon p} \quad (3.31)$$

$$a_{pml} = \int_{-1}^1 d\varepsilon \left\{ \Phi_{ml}^{(+)} \right\}^* s_{\varepsilon p} \quad ; \quad b_{pml} = \int_{-1}^1 d\varepsilon \left\{ \Phi_{ml}^{(-)} \right\}^* s_{\varepsilon p}. \quad (3.32)$$

Estes operadores são tais que destroem elétrons que possuam a energia média de cada intervalo. a_{pl} destrói elétrons com a energia média do primeiro intervalo (próximo ao topo da banda), no lado positivo e b_{pl} atua de maneira semelhante no lado negativo de energia. Da mesma forma, no m -ésimo intervalo a_{pml} destrói um elétron com a energia média neste intervalo $[\varepsilon_m = (1 - \Lambda^{-1})/2\Lambda^{m+z}]$.

O termo de condução do Hamiltoniano modelo pode, então, ser novamente reescrito a partir destes novos operadores:

$$\begin{aligned} H_{BC} = & \sum_{pl} \frac{(1 + \Lambda^{-z})}{2} \left[a_{pl}^\dagger a_{pl} - b_{pl}^\dagger b_{pl} \right] + \\ & + \sum_{pl \neq l'} (1 - \Lambda^{-z}) \exp \left(\frac{2\pi i}{1 - \Lambda^{-z}} (l' - l) \right) \left[a_{pl}^\dagger a_{pl'} - b_{pl}^\dagger b_{pl'} \right] + \end{aligned} \quad (3.33)$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{pml} \frac{\Lambda^{-z-m} (1 + \Lambda^{-1})}{2} [a_{pml}^\dagger a_{pml} - b_{pml}^\dagger b_{pml}] + \\
& + \sum_{pml \neq l'} (1 - \Lambda^{-z}) \Lambda^{-z-m} \exp\left(\frac{2\pi i}{1 - \Lambda^{-z}}(l' - l)\right) [a_{pml}^\dagger a_{pml'} - b_{pml}^\dagger b_{pml'}]
\end{aligned}$$

Entretanto, os elétrons de interesse neste problema são aqueles cujas funções de onda interagem com a impureza. Na equação (3.24) pode ser visto que a interação entre a impureza e a banda de condução é feita através dos operadores $\int d\varepsilon s_{\varepsilon p}$. Usando (3.26),(3.27)e(3.30) obtém-se:

$$\int_{-1}^1 d\varepsilon s_{\varepsilon p} = (1 - \Lambda^{-z}) [a_{p0} + b_{p0}] + (1 - \Lambda^{-1})^{1/2} \sum_m \Lambda^{\frac{-m-z}{2}} [a_{pm0} + b_{pm0}], \quad (3.34)$$

que mostra que o acoplamento é feito apenas entre a impureza e os elétrons da banda de condução que possuem funções de onda com $l = 0$. Desta forma os termos que possuem $l \neq 0$ podem ser desconsiderados:

$$\begin{aligned}
H_{BC} = & \sum_{p,l} \frac{(1 + \Lambda^{-z})}{2} [a_{pl}^\dagger a_{pl} - b_{pl}^\dagger b_{pl}] + \\
& + \sum_{p,m,l \neq 0} \frac{\Lambda^{-z-m} (1 + \Lambda^{-1})}{2} [a_{pml}^\dagger a_{pml} - b_{pml}^\dagger b_{pml}], \quad (3.35)
\end{aligned}$$

onde $a_{pm} \equiv a_{pm0}$ e $b_{pm} \equiv b_{pm0}$.

Sendo a banda de condução acoplada à impureza pelo termo $\int_{-1}^1 d\varepsilon s_{\varepsilon p}$, é conveniente escrever o Hamiltoniano (3.24) em termos dos operadores

$$f_{0p} = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-1}^1 d\varepsilon s_{\varepsilon p} \quad , \quad p = +, - \quad , \quad (3.36)$$

que obedecem às relações de anticomutação de férmions e passam a ser os únicos que se acoplam diretamente com as impurezas. Tem-se, então:

$$\begin{aligned}
\frac{H}{D} = & \sum_{pl} \frac{(1 + \Lambda^{-z})}{2} [a_{pl}^\dagger a_{pl} - b_{pl}^\dagger b_{pl}] + \\
& + \sum_{pml} \frac{\Lambda^{-z-m} (1 + \Lambda^{-1})}{2} [a_{pml}^\dagger a_{pml} - b_{pml}^\dagger b_{pml}] + \\
& + 2G [A_+^2 f_{0+}^\dagger f_{0+} + A_-^2 f_{0-}^\dagger f_{0-} + A_+ A_- (f_{0+}^\dagger f_{0-} + f_{0-}^\dagger f_{0+})] d_1^\dagger d_1 + \\
& + 2G [A_+^2 f_{0+}^\dagger f_{0+} + A_-^2 f_{0-}^\dagger f_{0-} - A_+ A_- (f_{0+}^\dagger f_{0-} + f_{0-}^\dagger f_{0+})] d_2^\dagger d_2 - \\
& - \frac{\Delta}{2} (d_1^\dagger d_2 + d_2^\dagger d_1).
\end{aligned} \tag{3.37}$$

O Hamiltoniano modelo, escrito nesta forma, possui operadores atuando em determinados intervalos de energia e não mais no contínuo. Entretanto, a banda de condução pode ser dividida num número infinito de intervalos; é necessário, então, determinar quantos intervalos deve haver de tal forma que o problema possa ser tratado numericamente com o mínimo de prejuízo nos resultados finais.

Sendo o Hamiltoniano escrito nesta forma, o acoplamento entre a banda de condução e a impureza é feito através do operador f_{0p} (que foi definido com este propósito). Todavia, a definição destes operadores é feita em termos dos operadores a_p , b_p , a_{pm} e b_{pm} , que formam uma base infinita de estados. Sendo assim, o truncamento, necessário para os cálculos numéricos, não pode ser feito sem prejudicar o acoplamento da banda de condução com a impureza. Portanto, é necessário definir uma nova base de estados, na qual o operador f_{0p} seja incluído, de tal forma que os acoplamentos entre os operadores sejam do tipo $f_{n,p} \longleftrightarrow f_{n+1,p}$ [12]. Com isto, os operadores $f_{n,p}$ (se $n \neq 0$) não se acoplam diretamente com a impureza, possibilitando o truncamento e consequentemente o tratamento numérico.

Escrito em termos destes operadores, o termo de condução fica:

$$H_{BC} = \frac{(1 + \Lambda^{-1})}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n^{(z)} (f_{n+}^{\dagger} f_{n+1+} + f_{n-}^{\dagger} f_{n+1-} + h.c.), \quad (3.38)$$

onde os coeficientes $\varepsilon_n^{(z)}$ são determinados numericamente[12] e $h.c.$ é o hermitiano conjugado. Com isto, o Hamiltoniano fica:

$$\begin{aligned} H_N = & \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \sum_{n=0}^{N-1} \varepsilon_n^{(z)} (f_{n+}^{\dagger} f_{n+1+} + f_{n-}^{\dagger} f_{n+1-} + h.c.) + \\ & + 2G' \left[A_+^2 f_{0+}^{\dagger} f_{0+} + A_-^2 f_{0-}^{\dagger} f_{0-} + A_+ A_- (f_{0+}^{\dagger} f_{0-} + f_{0-}^{\dagger} f_{0+}) \right] d_1 d_1^{\dagger} + \\ & + 2G' \left[A_+^2 f_{0+}^{\dagger} f_{0+} + A_-^2 f_{0-}^{\dagger} f_{0-} - A_+ A_- (f_{0+}^{\dagger} f_{0-} + f_{0-}^{\dagger} f_{0+}) \right] d_2 d_2^{\dagger} - \\ & - \frac{\Delta'}{2} (d_1^{\dagger} d_2 + d_2^{\dagger} d_1) \end{aligned} \quad (3.39)$$

e, quanto maior for o valor de N , menor o valor da escala de energia considerada, ou seja, quanto maior N , mais próximo do nível de Fermi estar-se-à trabalhando. No Hamiltoniano H_N escrito acima foi feita uma mudança de escala da forma:

$$\frac{2}{1 + \Lambda^{-1}} \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \frac{H}{D} \longrightarrow H_N, \quad (3.40)$$

pois desta maneira o menor termo de energia da banda de condução fica da ordem da unidade, facilitando o trabalho computacional[7].

As constantes G e Δ , por consequência, devem ser trocadas por:

$$G' = \frac{2G}{1 + \Lambda^{-1}} \quad \text{e} \quad \Delta' = \frac{2\Delta}{1 + \Lambda^{-1}}, \quad (3.41)$$

e no limite $N \rightarrow \infty$, é possível recuperar o Hamiltoniano (3.24):

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2\Lambda^{\frac{N-1}{2}}} H_N = \frac{H}{D}. \quad (3.42)$$

Na próxima seção serão analisadas as leis de conservação, presentes no modelo, que podem facilitar o trabalho de diagonalização.

3.3 Leis de Conservação.

É bastante conveniente, para o tratamento deste Hamiltoniano, levar em conta as leis de conservação existentes pois elas facilitam a diagonalização do Hamiltoniano. Neste modelo, observa-se que a carga é conservada, separadamente, na banda de condução e nas impurezas. Tem-se, ainda, a conservação de paridade do Hamiltoniano.

A conservação de carga pode ser observada a partir dos operadores número de partículas das impurezas:

$$NQI = d_1^\dagger d_1 + d_2^\dagger d_2 \quad (3.43)$$

e da banda de condução:

$$NQ = \sum_{n=0}^N (f_{n+}^\dagger f_{n+} + f_{n-}^\dagger f_{n-}), \quad (3.44)$$

onde é fácil ver que:

$$[H_N, NQ] = [H_N, NQI] = 0. \quad (3.45)$$

A conservação de paridade existe neste problema devido ao fato de que o modelo tratado aqui possui simetria de inversão, ou seja, a troca de $\frac{\vec{R}}{2}$ por $-\frac{\vec{R}}{2}$ e d_1 por d_2 e vice versa não altera o Hamiltoniano modelo.

Como pode ser observado no Hamiltoniano H_N , a banda de condução é escrita em termos de operadores com paridade definida, pois os elétrons que interagem com a impureza são apenas aqueles cujas funções de onda têm paridade definida. Isto pode ser interpretado pensando na banda de condução como tendo dois canais: o canal par, que possui elétrons com função de onda par, e o canal ímpar, que possui elétrons com função de onda ímpar.

Se há conservação de paridade, tem-se que quando o elétron tunelante troca de paridade, a paridade da banda de condução como um todo também é trocada. Neste contexto,

torna-se conveniente reescrever, como no capítulo 2, os operadores d_1 e d_2 , nas combinações ligante e anti-ligante (ou seja, com paridade definida):

$$d_+ = \frac{d_1 + d_2}{\sqrt{2}}, \text{ combinação ligante,} \quad (3.46)$$

e

$$d_- = \frac{d_1 - d_2}{\sqrt{2}}, \text{ combinação anti-ligante.} \quad (3.47)$$

A partir destes operadores a equação (3.39) fica na forma:

$$\begin{aligned} H_N = & \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \sum_{n=0}^{N-1} \varepsilon_n^{(z)} (f_{n+}^\dagger f_{n+1+} + f_{n-}^\dagger f_{n+1-} + h.c.) + \\ & + 2G' (A_+^2 f_{0+}^\dagger f_{0+} + A_-^2 f_{0-}^\dagger f_{0-}) (d_+ d_+^\dagger + d_- d_-^\dagger) \\ & + 2G' A_+ A_- (f_{0+}^\dagger f_{0-} + f_{0-}^\dagger f_{0+}) (d_- d_+^\dagger + d_+ d_-^\dagger) - \\ & - \frac{\Delta'}{2} (d_+^\dagger d_+ - d_-^\dagger d_-). \end{aligned} \quad (3.48)$$

Este Hamiltoniano, escrito nesta forma, evidencia a existência dos orbitais ligante e anti-ligante da impureza e dos canais par e ímpar da banda de condução. A Figura 1.6-c mostra uma representação esquemática desta condição.

3.4 Diagonalização

Usando a equação (3.48) é possível escrever uma relação de recorrência para o subespaço $N + 1$ a partir do subespaço N :

$$H_{N+1} = \Lambda^{\frac{1}{2}} H_N + \xi_N (f_{N+}^\dagger f_{N+1+} + f_{N-}^\dagger f_{N+1-} + \quad (3.49)$$

$$f_{N+1+}^\dagger f_{N+} + f_{N+1-}^\dagger f_{N-}),$$

onde o coeficiente ξ_N é dado por $\xi_N = \Lambda^{\frac{N}{2}} \varepsilon_n$.

A partir desta relação de recorrência, conhecida como a transformação do Grupo de Renormalização, pode-se iniciar o processo iterativo para a diagonalização do Hamiltoniano. O primeiro Hamiltoniano, definido para $N = 0$, é

$$\Lambda^{\frac{1}{2}} H_0 = 2G' (A_+^2 f_{0+}^\dagger f_{0+} + A_-^2 f_{0-}^\dagger f_{0-}) (d_+ d_+^\dagger + d_- d_-^\dagger) + \quad (3.50)$$

$$+ 2G' A_+ A_- (f_{0+}^\dagger f_{0-} + f_{0-}^\dagger f_{0+}) (d_- d_+^\dagger + d_+ d_-^\dagger) -$$

$$-\frac{\Delta'}{2} (d_+^\dagger d_+ - d_-^\dagger d_-),$$

que é facilmente diagonalizado na base do número de ocupação dos operadores $f_{0\pm}$ e $d_\pm$, $|f_{0+}, f_{0-}, d_+, d_- \rangle$. A matriz correspondente a H_0 é 8×8 , mas com o uso da conservação de carga e paridade o maior bloco a ser diagonalizado é 2×2 . Para diagonalizar o próximo Hamiltoniano, H_1 , deve-se incluir os graus de liberdade dos operadores $f_{1\pm}$ na base anterior. Isto é feito tomando-se o produto direto dos estados $|0\rangle, |f_{1+}\rangle, |f_{1-}\rangle, |f_{1+}, f_{1-}\rangle$ com cada um dos estados de H_0 . Este procedimento é repetido até um valor máximo de N , N_m , tal que a energia de interesse ε seja da ordem do elemento de matriz $\varepsilon_{N_m}^{(z)} \sim \Lambda^{-\frac{N_m}{2}}$, $\varepsilon/D \sim \Lambda^{-\frac{N_m}{2}}$. Nos cálculos efetuados nesta dissertação foi utilizado $\Lambda = 10$, com $N_m = 15$, o que permite estudar excitações tão baixas quanto $10^{-7} D$.

A cada etapa do processo iterativo descrito acima, tem-se quatro vezes mais estados que na etapa anterior. Esta progressão torna o problema intratável, computacionalmente,

pois rapidamente esgota-se o espaço de memória para os estados. No entanto, como o interesse reside nas baixas excitações em torno do nível de Fermi, não espera-se grande contribuição das altas energias vindas das interações anteriores. Assim, pode-se, com segurança, cortar todas as energias acima de determinado valor, escolhido em função do espaço disponível para armazenagem e da precisão que se deseja nos cálculos. Nesta dissertação o valor do corte na energia foi fixado em 25, unidades da largura de banda D .

O processo iterativo iniciado pelo Hamiltoniano (3.50) dá os estados finais $|F\rangle$, isto é, após a criação do buraco. Para se calcular as densidades espectrais $\rho_{\pm}$, necessita-se do elemento de matriz $\langle I|d_{\pm}|F\rangle$. O estado inicial $|I\rangle$ é calculado simplesmente iniciando-se o processo iterativo com o Hamiltoniano (3.50) tomando-se $G = 0$ e $\Delta = 0$, uma vez que antes de ter criado o buraco existem apenas uma banda livre e as impurezas neutras. Neste caso, como $H = H_{BC}$ e portanto quadrático, não é necessário recorrer ao método iterativo. Poder-se-ia construir os estados de muitos corpos a partir do espectro de partículas independentes de H_0 . Este caminho não foi seguido por ser mais trabalhoso. Seguiu-se, ao invés, o método iterativo que apenas dispense um pouco mais de tempo de processamento.

Uma vez tendo o estado inicial $|I\rangle$ e os estados finais $|F\rangle$, podemos determinar $\rho_{\pm}$, através da definição (1.2),

$$\rho_{\pm}^{(z)}(\varepsilon) = \sum_{|F\rangle} |\langle F|d_{\pm}|I\rangle|^2 \delta(\varepsilon - E_F) \quad (3.51)$$

onde os expoentes (z) são para salientar que todo o cálculo é feito com o parâmetro z , de discretização, fixo.

Em consequência da discretização da banda de condução, as energias E_F são discretas e assim só é possível saber $\rho_{\pm}(\varepsilon)$ para alguns valores de ε , aqueles que satisfazem $\varepsilon = E_F$. Isso dá um gráfico para $\rho_{\pm}(\varepsilon) \times \varepsilon$ como o da Figura (3.2). Quanto maior o valor do parâmetro de discretização Λ , mais esparsas são as linhas. Para aumentar a concentração

Figura 3.2: *Densidade Espectral para dois valores de z consecutivos. Sabendo o valor da densidade espectral nestes dois valores de z , é possível saber o valor de ρ também para uma energia ε que está entre $E_F(z_1)$ e $E_F(z_2)$ e desta forma a curva da densidade espectral pode ser suavizada.*

destas linhas, trabalhar-se-á com várias discretizações ao mesmo tempo. Isto poderia ser feito trabalhando-se com vários Λ , mas um procedimento mais elaborado é conseguido através do fator z . A densidade espectral será definida, para uma energia ε qualquer do contínuo, pela seguinte média sobre z :

$$\rho_{\pm}(\varepsilon) = \int_0^1 \rho_{\pm}^{(z)}(\varepsilon) dz. \quad (3.52)$$

O intervalo da integral é unitário, uma vez que a discretização logarítmica tem período $z = 1$ (exceto no topo da banda). Este procedimento permite a volta para o contínuo de energias, mesmo com Λ tão grande quanto 10 [13].

Trocando a integral em z pela integral em E_F , tem-se

INSTITUTO DE FÍSICA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
TRABALHO DE FÍSICA

$$\begin{aligned}
\rho_{\pm}(\varepsilon) &= \int_0^1 \sum_{|F\rangle} |\langle F | d_{\pm} | I \rangle|^2 \delta(\varepsilon - E_F) dz = \\
&= \int_0^1 \sum_{|F\rangle} |\langle F | d_{\pm} | I \rangle|^2 \delta(\varepsilon - E_F) \frac{dz}{dE_F} dE_F = \\
&= \sum_{|F^*\rangle} \frac{|\langle F | d_{\pm} | I \rangle|^2}{dE_F/dz}
\end{aligned} \tag{3.53}$$

onde $\sum_{|F^*\rangle}$ significa soma sobre estados finais que satisfaçam a função $\delta(\varepsilon - E_F)$, para algum z , no intervalo unitário de integração.

Para que a integral acima seja resolvida são necessários infinitos valores de z , o que não é possível. Discretiza-se, então, o intervalo de z . As diagonalizações são feitas para $z = 0.1, 0.2, 0.3, \dots, 1$. Para uma dada excitação ε acha-se o valor de z interpolando-se linearmente entre as energias $E_F(z_1)$ e $E_F(z_2)$.

Dessa maneira, chamando o somando da equação(3.53) de $S(z)$, tem-se

$$\frac{|\langle F | d_{\pm} | I \rangle|^2}{dE_F/dz} = \sum_{z_1=0.1}^{1.0} \frac{S(z_1) \cdot (\varepsilon - E_F(z_1)) - S(z_2) \cdot (\varepsilon - E_F(z_2))}{E_F(z_1) - E_F(z_2)}. \tag{3.54}$$

As derivadas $\frac{dE_F}{dz}$ são calculadas numericamente, considerando-se dois valores de z bem próximos.

Utilizando a expressão acima foram obtidas as densidades espectrais mostradas e analisadas na próxima seção, onde inicialmente foi utilizado o mesmo valor $dz = 10^{-3}$ usado na referência [13]. Entretanto, a medida que o valor de G diminuía, foi observado que as curvas de densidade espectral deterioravam muito (isto não aparece na referência [13] porque a única curva mostrada lá é para $G = -2D$, que é bastante grande). Diminuindo o valor de dz para 10^{-4} as curvas melhoraram substancialmente. Isto ocorre porque a medida que G diminui o espaçamento entre os níveis de energia também diminui. Em

particular, para $G = 0$ as duas bandas, par e ímpar, são degeneradas. Logo, com dz grande a derivada $\frac{dE}{dz}$ não tem resolução para separar os níveis.

Capítulo 4

Resultados

A proposta desta dissertação é estudar o problema da densidade espectral do Modelo de Kondo de Tunelamento. O estudo deste problema já foi feito anteriormente[13]. Entretanto, este foi abordado de forma que a conservação de paridade existente no problema não foi explorada durante a diagonalização do Hamiltoniano. Desta forma, o tamanho das matrizes utilizadas eram muito grandes. Com o aumento de recursos computacionais e com a utilização da conservação de paridade (incluindo, portanto, um número quântico a mais no problema) diminui-se o tamanho das matrizes a serem diagonalizadas. Desta forma, o espaço de parâmetros pode ser melhor explorado, podendo-se efetuar um cuidadoso estudo do comportamento das curvas neste espaço, o que não foi possível na época. Outro ponto de interesse nesta dissertação é saber se as propriedades dinâmicas do modelo em questão, a exemplo do calor específico, também dependem apenas de uma combinação especial de G e S ($S = \frac{\sin K_F R}{K_F R}$), estudado na referência [5], o que será visto na última seção deste capítulo.

As curvas da densidade espectral para o caso de dois centros obedecem, em certos

limites, a lei de potência de Doniach-Šunjić, dada pela equação (1.3):

$$\rho(\omega) = \frac{I_0}{(\omega - \omega_T)^\alpha},$$

onde o expoente α é determinado através das defasagens da banda de condução e é dado por

$$\alpha = 1 - \sum_l \left(\frac{\delta_l}{\pi} \right)^2, \quad (4.1)$$

neste caso, l toma valores 1 e 2 e se referem aos dois canais, par e ímpar. O estudo destas defasagens será objeto da próxima seção.

4.1 Estudo das defasagens da banda de condução

A Figura 4.1 contém os gráficos para ρ_+ e ρ_- , definidos na Introdução. O gráfico pode ser dividido, para análise, em três regiões. Para $\varepsilon \gg \Delta^*$, ou seja, alta energia não há diferença entre d_+ e d_- e então o sistema comporta-se como no caso de um único centro. Logo, ρ_+ e ρ_- coincidem e o gráfico mostra comportamento linear, quando em escala logarítmica. Para a energia $\varepsilon \ll \Delta^*$, é como se $\Delta \rightarrow \infty$, logo o sistema está congelado no estado d_+ , lembrando novamente, de alguma forma, o problema de um centro e mostrando o comportamento linear de Doniach-Šunjić. Contudo, as defasagens da banda de condução nestes dois regimes são bem diferentes, o que dá expoentes diferentes para ρ_+ e ρ_- . A região cuja excitação ε é comparável a Δ^* já não é tão simples de ser descrita. Para um bom entendimento desta região veja referência [13].

Para se determinar o expoente de Doniach-Šunjić das curvas da Figura 4.1, é preciso calcular apenas as defasagens δ_+ e δ_- , do canal par e canal ímpar, respectivamente. Na região de alta energia, $\varepsilon \gg \Delta^*$, os dois canais par e ímpar se confundem e as defasagens δ_+ e δ_- são iguais entre si, valendo δ , tal que [14]

Figura 4.1: *Curvas das densidades espectrais par, ρ_+ , e ímpar, ρ_- , para os mesmos valores dos parâmetros G , S e Δ .*

$$\tan \delta = -\frac{\pi G}{D}. \quad (4.2)$$

Assim $\delta_- = \delta_+ = \delta$ e

$$\rho = \frac{I_0}{\varepsilon^\alpha}, \quad (4.3)$$

com $\alpha = 1 - \left(\frac{\delta}{\pi}\right)^2 = 0.8979$, para o exemplo da Figura 4.1

No regime de baixa energia, $\varepsilon \ll \Delta^*$, o cálculo de δ_1 e δ_2 é mais delicado. É preciso olhar o espectro de energia. A Tabela 1 mostra as energias de muitos corpos para $N = 15$ (o que garante energias suficientemente menores que Δ^*) nos subespaços com um elétron

(carga = -1), ou com um buraco (carga = 1) a mais do estado fundamental (carga = 0). É fácil verificar que muitos estados são combinações de alguns poucos, estes últimos identificados como níveis de partícula independente (na Tabela 1, estes são identificados pelos rótulos 1,2,3 ou 4 para buracos e $\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}$, ou $\bar{4}$ para elétrons). Tal qual a banda de condução livre, discutida no capítulo 3, o espectro de partículas independentes segue a lei :

$$\varepsilon_{j\pm} = \Lambda^{j-1-\gamma_{\pm}} \quad (4.4)$$

para elétrons, e

$$\varepsilon_{j\pm} = \Lambda^{j-1+\gamma_{\pm}} \quad (4.5)$$

para buracos, sendo $\gamma_{\pm} = \frac{\delta_{\pm}}{\pi}$. No exemplo da Tabela 1 tem-se $\delta_1 = 0.26517$ e $\delta_2 = 0.05416$.

A densidade espectral ρ_- caracteriza o comportamento do buraco criado no nível d_- . No regime em questão, $\varepsilon \ll \Delta^*$, não haverá contribuição de estados com excitação do elétron do nível d_+ para o nível d_- , pois este processo custaria ao sistema uma energia Δ^* , que não está disponível. Assim, de fato, as defasagens da banda são $\delta_1 = \delta_+$ e $\delta_2 = \delta_-$, originadas pelo buraco localizado no nível d_- . Logo, pela equação (4.3),

$$\rho_- = \frac{I_{0-}}{\varepsilon^{\alpha_-}} \quad (4.6)$$

com

$$\alpha_- = 1 - \left[\left(\frac{\delta_1}{\pi} \right)^2 + \left(\frac{\delta_2}{\pi} \right)^2 \right], \quad (4.7)$$

que no caso da tabela 1, vale $\alpha_- = 0.9267$. Observe-se que α_- difere de α por pouco mais de 3%, o que torna difícil distinguir as inclinações das retas de ρ_- nas regiões $\varepsilon \ll \Delta^*$ e $\varepsilon \gg \Delta^*$.

carga=-1	carga=-1	carga=0	carga=0	carga=1	carga=1
par	ímpar	par	ímpar	par	ímpar
1.83108 (2)	1.09369 (1)	0.00000 (EF)	1.48177 (1̄1̄)	0.38809 (1̄)	0.81564 (2̄)
3.74043 (122̄)	3.31289 (121̄)	1.90934 (12̄)	2.64669 (22̄)	2.29743 (1̄21̄)	3.03479 (1̄22̄)
11.75053 (124̄)	8.35379 (123̄)	4.12851 (1̄1̄22̄)	6.52266 (13̄)	5.42910 (3̄)	6.91073 (1̄31̄)
12.80977 (131̄)	11.32817 (3)	7.26018 (23̄)	8.74186 (1̄1̄23̄)	7.33842 (231̄)	8.07589 (232̄)
13.97527 (232̄)	13.23751 (132̄)	9.16950 (2213̄)	10.65678 (24̄)	7.6482 (1̄32̄)	8.82602 (4̄)
17.84964 (133̄)	13.54759 (231̄)	9.91972 (14̄)	11.71609 (31̄)	9.55759 (1̄23̄12̄)	10.73537 (241̄)
18.41504 (4)	15.45693 (1231̄2̄)	12.13873 (1̄1̄24̄)	12.5663 (1422̄)	10.30792 (1̄41̄)	11.04501 (1̄42̄)
20.06907 (1231̄3̄)	18.58756 (233̄)	12.14382 (32̄)	13.62543 (1̄1̄32̄)	11.47239	12.95435
20.32466 (142̄)	19.89725 (141̄)	14.36321 (2231̄)	16.75607 (33̄)	12.53175	16.08682
20.63421 (241̄)	20.49689	17.18043	18.66539 (33̄12̄)	15.34962	17.14399
21.98537	21.0137	18.23754	18.97548 (33̄21̄)	17.56863	17.99614
22.54363	21.24790	18.80313	19.30232	17.57182	19.05330
	23.46715	19.40328	20.88481	19.79121	19.61843
	24.93815	20.15420	21.44947	20.54225	20.96985
		20.71255	21.63593	22.45159	23.18905
		22.06354	22.80098	24.23223	24.65953
		22.37342			
		23.84414			
		24.28277			

Tabela 1 - A tabela mostra o espectro de energia para N=15, nos subespaços de elétron (carga = -1), de buraco (carga = 1) e o estado fundamental (carga = 0). Os estados 1, 2, 3, 4 e 1̄, 2̄, 3̄, 4̄ representam estados de partícula independente como numa banda de condução livre. Alguns dos estados estão mostrados em termos dos estados de partícula independente.

A densidade espectral ρ_+ caracteriza o comportamento do buraco criado no nível d_+ . Diferentemente do caso ρ_- , agora o elétron localizado em d_- pode transicionar para o buraco em d_+ , diminuindo a energia total do sistema. Isto é possível graças à presença do termo

$$G' A_+ A_- (f_{0+}^\dagger f_{0-} + f_{0-}^\dagger f_{0+}) (d_- d_+^\dagger + d_+ d_-^\dagger)$$

no Hamiltoniano. Como se vê por este termo, quando um elétron transiciona de d_- para d_+ , necessariamente, na banda de condução, um elétron transiciona de um canal para o outro, conservando assim a paridade total do modelo. Este é um exemplo de transição não-radiativa. Esta transição inter-canais altera a defasagem dos mesmos por um fator π . A questão é qual canal ganha π e qual perde π . No caso de um buraco atraindo a banda de condução ($G < 0$), a banda par está mais baixa em energia que a banda ímpar. Então, é mais favorável que o elétron transicione da banda ímpar para a banda par. O processo inverso também ocorre, sendo entretanto menos importante. Sendo assim, as defasagens ficam $\delta_1 + \pi$ e $\delta_2 - \pi$. Finalmente, então, tem-se pela equação (4.1),

$$\rho_+ = \frac{I_{0+}}{\varepsilon \alpha_+}, \quad (4.8)$$

com

$$\begin{aligned} \alpha_+ &= 1 - [(\gamma_+ - 1)^2 + (\gamma_- + 1)^2] = \\ &- [1 + \gamma_+^2 + \gamma_-^2 + 2\gamma_+ - 2\gamma_-]. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Como γ_+ ou γ_- nunca são maiores que 0.5 (valor alcançado só para $G \rightarrow \infty$), α_+ é sempre negativo ! Pode-se concluir, então, que daí vem a inclinação da reta de ρ_+ para $\varepsilon \ll \Delta^*$ ser diferente do caso de Doniach e Šunjić, não tendo, portanto, divergência para $\varepsilon \rightarrow 0$. Neste caso, tem-se $\rho_+ \rightarrow 0$ para $\varepsilon \rightarrow 0$.

4.2 Estudo do Comportamento das Curvas no Espaço de Parâmetros

Nesta seção será discutida a dependência das curvas de densidade espectral obtidas em relação aos parâmetros do modelo, G , S e Δ . Para tanto, fixou-se dois destes parâmetros e variou-se o outro. Como a densidade ρ_- sempre apresenta comportamento praticamente linear em todo o espectro, será mostrado apenas ρ_+ que é mais rica. Antes porém de analisar cada caso, pode-se, através de uma inspeção do Hamiltoniano, tirar algumas conclusões.

Trocar G por $-G$, ou S por $-S$, ou Δ por $-\Delta$, não altera ρ_+ ou ρ_- . Isso porque o Hamiltoniano do Modelo (1.1) é invariante por essas transformações. Ao trocar G por $-G$, basta trocar d_+ por $d_+^\dagger$ e d_- por $d_-^\dagger$, ou seja, é o mesmo que trocar elétron por buraco nas impurezas, e assim o Hamiltoniano volta a ser o mesmo. Trocar S por $-S$ implica em trocar A_+ por A_- e vice-versa. Basta, então, trocar f_{0+} por f_{0-} e f_{0-} por f_{0+} e novamente se recupera o Hamiltoniano. Finalmente, a troca Δ por $-\Delta$ pode ser desfeita com a troca simultânea de d_+ por d_- e d_- por d_+ . Os resultados são expostos a seguir.

4.2.1 S e Δ fixos, G variando

Para $G = 0$, sabe-se que a densidade espectral, ρ_+ , deve ser uma função delta de Dirac localizada em Δ , como na Figura (1.5). Para $G \neq 0$, a função $\delta(\varepsilon - \Delta)$ se alarga, tendo seu máximo em $\Delta^* < \Delta$. Observando-se a Figura 4.2 podemos ver que, à medida em que G decresce, o pico fica mais alto e mais estreito, imitando cada vez mais uma função delta em torno de Δ . Sua forma para G pequeno ($G = -0.1D$, no gráfico) é assimétrica em torno de $\Delta^* \sim \Delta$, onde o lado direito lembra a lei de potência de Doniach e Šunjić, e o lado esquerdo, mais arredondado, lembra o decaimento não-radiativo. Quando G é

grande, o pico é menor, mais largo e tem-se $\Delta^* \ll \Delta$.

Figura 4.2: *Curvas da densidade espectral ρ_+ para três diferentes valores de G .*

4.2.2 S e G fixos, Δ variando

No caso extremo de $\Delta = 0$, a ocupação dos sítios $\vec{R}/2$ e $-\vec{R}/2$ é conservada separadamente, como se vê facilmente pelo Hamiltoniano (1.1). Então, tem-se dois problemas de Doniach e Šunjić superpostos, ou seja, duas leis de potência com singularidades em $\varepsilon = 0$. A Figura 4.3 ilustra o efeito de Δ finito. Para Δ bem pequeno, $10^{-6}D$, há um pico alto em Δ^* com a região linear em $\varepsilon \gg \Delta^*$, se estendendo até baixas energias, lembrando o caso de uma impureza. Para Δ maior, o pico é mais reduzido e ocorre para Δ^* também

menores. Em alta energia, $\varepsilon \gg \Delta^*$, a separação Δ torna-se insignificante e as curvas para diferentes Δ se encontram. As inclinações α_+ das curvas para diferentes Δ são numericamente indistinguíveis.

4.2.3 G e Δ fixos, S variando

O parâmetro S é, de certa forma, uma medida da separação entre os sítios das impurezas. No limite de altas energias o comportamento da curva é tal que reflete a degenerescência dos níveis de energia das impurezas, recaindo no problema de um único centro. Neste limite, então, as curvas para diferentes valores de S se sobrepõem, como mostra a Figura 4.4.

Conforme S cresce, ρ_+ tende a uma função que apresenta uma divergência, como no caso de um centro sem decaimento. Para $S = 1$ tem-se dois níveis d_1 e d_2 no mesmo sítio, mas, separados por uma energia Δ , com as duas densidades espectrais, ρ_+ e ρ_- , tendo o comportamento divergente da lei de Doniach e Šunjić como mostrado na Figura 1.3-b. O valor de $S = 0$, é o que mais renormaliza a taxa de tunelamento Δ .

4.3 Estudo das Curvas Obtidas em Função do Parâmetro

$$\sqrt{1 - S^2} \sin \delta$$

No estudo do calor específico do Modelo de Kondo de Tunelamento [1], foi encontrado que o comportamento das curvas é regido pelo parâmetro Δ e pelo parâmetro β , que é uma combinação de G (transformada de Fourier do Potencial Coulombiano) e S :

$$\beta = \sqrt{1 - S^2} \sin \delta \tag{4.10}$$

Figura 4.3: *Curvas da densidade espectral ρ_+ para dois diferentes valores de Δ .*

onde

$$\tan \delta = -\frac{\pi G}{D}. \quad (4.11)$$

No caso da densidade espectral isso não ocorre, ou seja, curvas com o mesmo valor de β são bem diferentes, como mostra a Figura 4.5. É fácil de entender este resultado. Em alta energia, $\varepsilon \gg \Delta^*$, a Figura 4.5 mostra que S é irrelevante pois mesmo para valores diferentes de S as curvas têm a mesma inclinação e a Figura 4.2 mostra que é o G que define a inclinação da curva. Logo, dois pares de G e S darão curvas diferentes independentemente do valor de β .

A taxa de tunelamento efetiva Δ^* , medida aqui pela posição do pico de ρ_+ , parece depender apenas de β . A altura do pico, no entanto, depende explicitamente do valor de G e é tanto maior quanto menor G (lembre-se que para $G = 0$ tem-se uma função delta em $\varepsilon = \Delta$). Como a área sob a curva de ρ_+ independe dos parâmetros G, S ou Δ , quanto maior o pico menor a inclinação da reta em baixa energia, $\varepsilon \ll \Delta^*$, daí, essa inclinação da reta também ser diferente para diferentes valores de β .

Figura 4.4: Curvas da densidade espectral ρ_+ para três diferentes valores de S .

4.4 Melhorias nas Curvas

Observando atentamente as diversas curvas apresentadas percebe-se imperfeições em algumas delas. A curva para $G = -2D$ da Figura 4.5 mostra um degrau próximo da energia $\varepsilon = 10^{-6}D$ e outro próximo da energia $\varepsilon = 10^{-5}D$. Esses pontos ocorrem onde o parâmetro N da iteração muda. Este problema é controlável aumentando-se o número de estados mantidos a cada iteração elevando-se o corte de energia citado no final do capítulo 3. Para G menor esses degraus são imperceptíveis.

Um pouco mais sério é o aparecimento de alguns pontos fora da curva, que ocorrem próximo à entrada e saída da região de pico. Não temos uma explicação para essas irreularidades; apenas uma análise mais demorada dos programas computacionais poderá revelar o que será feito oportunamente.

De qualquer maneira, nenhuma destas imperfeições compromete as análises feitas neste capítulo.

Figura 4.5: *Curvas da densidade espectral ρ_+ para dois diferentes valores do parâmetro β da equação 4.10.*

Capítulo 5

Discussão

Neste trabalho foi calculada a densidade espectral para o Modelo de Kondo de Tunelamento, levando em conta a conservação de paridade, de forma que um número quântico a mais fosse incluído no problema. Com isto foi possível estudar o espaço de parâmetros e observar a dependência das curvas da densidade espectral com relação aos parâmetros G , S e Δ , onde G representa o acoplamento Coulombiano do buraco nas impurezas com a banda de condução, $S = \frac{\sin K_F R}{K_F R}$ que é, de certa forma, uma medida da separação R entre as impurezas e Δ é a taxa de tunelamento (a separação entre os orbitais ligante e anti-ligante das impurezas) do buraco deixado entre as duas impurezas.

Deste estudo pode-se concluir que quando o parâmetro S aproxima-se de 1 (caso em que as duas impurezas estão localizadas no mesmo sítio) a curva da densidade espectral tende a uma divergência em $\Delta^* \sim \Delta$, resultando em picos mais alongados (com $\Delta^* < \Delta$) para menores valores de S .

Em altas energias o comportamento da curva é governado exclusivamente pelo parâmetro G devido ao fato de que a escala de energia envolvida é muito maior do que o tunelamento Δ .

Com estes resultados foi possível também concluir que o parâmetro β que rege o

comportamento das curvas de calor específico não providencia curvas coincidentes para a densidade espectral.

Para a realização deste trabalho foi feita a aproximação $k = k_F$ pois esperava-se que o comportamento do sistema fosse mais importante na região próxima ao nível de Fermi. Não foi possível remover esta aproximação devido ao pouco tempo que se teve para a realização deste trabalho. Portanto, fica como sugestão para trabalhos futuros a investigação do problema levando em conta $k = k_F$ para a observação da influência desta aproximação nas curvas de densidade espectral. Como foi dito no texto, a aproximação $k = k_F$, neste modelo em particular, não muda sua simetria, o que nos leva a pensar que talvez não seja tão drástico quanto no caso do Modelo de Kondo de duas impurezas magnéticas.

Bibliografia

- [1] J. Kondo, *Localized States in Metals*, Physica, 84B p. 207, 1976.
- [2] K. Yamada, A. Sakurai e M. Takeshige, *Application of the orthogonality theorem to the motion of a charged particle in metals*. Physical Review B, 70, n. 1, p. 73, 1983.
- [3] V. L. Líbero e L. N. Oliveira, *Renormalization of the tunneling rate between two centers in a metal*. Physica B, 171, p. 106, 1991.
- [4] D. E. Heim, Physical Review B 33, 5254, 1986.
- [5] J. V. B. Ferreira, *Estudo do Calor Específico de um Sistema de Dois Níveis Acoplado a um Banho Fermiônico*, dissertação apresentada ao Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, para a obtenção do título de Mestre em Ciências - Física Básica. São Carlos, 1995.
- [6] S. Doniach e M. Šunjić, Journal of Physics C 3, 285, 1970.
- [7] K. G. Wilson, *The renormalization group : critical phenomena and the Kondo problem*. Reviews of Modern Physics 47, n. 04, p.73, 1975.
- [8] J.Kondo, Progress Theoretical Physics 32, 37, 1964.
- [9] J.B.Silva, W.L.C.Oliveira, J.L.N.Mello, L.N.Oliveira e J.W.Wilkins, *Particle-Hole Asymmetry in the Two-Impurity Kondo Model* Physical Review Letters 76, 275,

1996.

- [10] M. Yoshida, M.A. Whitaker e L. N. Oliveira, *Renormalization-group calculation of excitation properties for impurity models*. Physical Review B 41, 9403, 1990.
- [11] W. C. Oliveira, *Método generalizado do Grupo de Renormalização Numérico para o Cálculo de Propriedades Termodinâmicas de Impurezas em Metais*, tese apresentada ao Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, para a obtenção do título de Doutora em Ciências - Física Básica. São Carlos, 1994.
- [12] J. L. N. Mello, *Diagonalização do Hamiltoniano de Falicov e Kimball para Duas Impurezas em Meio Metálico*, tese apresentada ao Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, para a obtenção do título de Doutor em Ciências - Física Básica. São Carlos, 1992.
- [13] L. N. Oliveira, V. L. Líbero, H. O. Frota e M. Yoshida, *Renormalization group of dynamical properties for impurity models*, Physica B, n. 171, p.61, 1991.
- [14] H.R.Krishna-murthy, J. W.Wlikins e K. G. Wilson *Renormalization-group approach to the Anderson model of dilute magnetic alloys II. Static properties for the asymmetric case*.Physical Review B 21, n.3 1044, (eq. A28) 1980.