

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA E INFORMÁTICA

DENSIDADE ESPECTRAL PARA O MODELO DE ANDERSON
DE DUAS IMPUREZAS SEM CORRELAÇÃO ELETRÔNICA

OK

Marcelo Ferreira da Silva



*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. Luiz Nunes de Oliveira*

SÃO CARLOS

1998

IFSC 111

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Silva, Marcelo Ferreira.

Densidade espectral para o Modelo de Anderson de duas impurezas sem correlação eletrônica /Marcelo Ferreira da Silva.–São Carlos, 1998.

76 p.

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

Orientador: Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

1. Metais . 2. Modelo de Anderson. 3. Propriedades dinâmicas. I.

Título.



MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE
MARCELO FERREIRA DA SILVA APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO
CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 27 DE MARÇO DE 1998.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira/IFSC-USP

Prof. Dr. José Carlos Égues de Menezes/IFSC-USP

Prof. Dr. Mário Eusébio Fóglio/UNICAMP

À memória de meu irmão

Agradecimentos

- Agradeço à Deus, sempre presente em minha vida, sem o qual nada seria possível.
- Ao Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira - meu orientador, o meu profundo agradecimento, não só pela sua eficiente orientação mas pela paciência e confiança que depositou em mim.
- Ao Prof. Dr. Valter Líbero pela amizade e apoio nas horas difíceis.
- Ao amigo Eik pela sua sincera amizade.
- Aos amigos do GRENA, Cíntia, João, Luís, Neemias, Vivaldo e Washington pelos momentos alegres e inesquecíveis que passamos juntos.
- Finalmente, e não menos importante, à Rô, pelo incentivo, pelo carinho e afeição sem os quais minha vida não seria a mesma.

*Este trabalho foi financiado pela **FAPESP, CNPq,**
CAPES e FINEP*

Índice

Lista de Figuras	iii
Lista de Tabelas	vi
Resumo	vii
Abstract	viii
1 Introdução	1
1.1 Densidade espectral para uma impureza	3
1.2 Densidade espectral para duas impurezas	6
2 Modelo de Anderson	7
2.1 Momentos Magnéticos Localizados	7
2.1.1 Modelos e métodos para estudar esses sistemas	10
2.2 Modelo de Anderson de uma impureza	10
2.3 Modelo de Anderson de duas impurezas	14
2.3.1 Preparação do Hamiltoniano	15
3 Grupo de Renormalização Numérico	24
3.1 Discretização logarítmica	24
3.2 Tridiagonalização	29
3.3 Truncamento	32
3.4 Cálculo analítico da densidade espectral	33

4	Análise de pontos fixos	38
4.1	Ponto fixo de elétrons livres	39
4.2	Nível Ressonante	43
5	Resultados e Conclusões	47
A	Tridiagonalização da Banda de Condução	53
A.1	Procedimento Formal	54
A.2	Função Peso	57
A.3	Procedimento Prático	59
A.4	Autovalores do Hamiltoniano tridiagonal e as energias da banda de condução . .	62
B	Diagonalização	64

Lista de Figuras

- 1-1 Densidade Espectral para o nível ressonante com $\Gamma = 0.01D$ e duas energias para a impureza. (a) $\varepsilon_d = 0$ e (b) $\varepsilon_d = 0.05D$. As linhas sólidas representam os resultados numéricos com $z \neq 1$ e os círculos cheios com $z = 1$. Os triângulos representam a convolução Gaussiana da Ref.[6]. 4
- 1-2 Densidade espectral para o modelo de Anderson de spin-degenerados como função da energia. Nos três casos temos que $\varepsilon_d = -0.1D$ e $\Gamma = 0.01D$. A repulsão Coulombiana nos casos (a), (b) e (c) é $U = 0.05D, 0.105D$ e $0.15D$, respectivamente. As densidades foram calculadas com parâmetro de discretização $\Lambda = 3$, círculos cheios. A linha sólida representa fits combinando Lorentzianas de largura diferentes. 5
- 2-1 Esquematização da contribuição da impureza para a suscetibilidade magnética e para o calor específico. O pico no calor específico representa uma mudança na entropia. Na suscetibilidade vemos que para $T \gg T_K$ a impureza comporta-se como partícula livre e $T \ll T_K$ a impureza torna-se independente da temperatura. 8
- 2-2 Representação esquemática do modelo de Anderson de uma impureza. D é a meia largura da banda de condução semi-preenchida e ε_F o nível de Fermi. O acoplamento entre o nível da impureza e a banda de condução possibilita a transferência de elétrons da impureza (lado esquerdo) para o metal (lado direito) e vice-versa. 12
- 2-3 Modelo de Anderson de duas impureza. D é a meia largura da banda de condução semi-preenchida e ε_F o nível de Fermi. U é a correlação eletrônica entre os elétrons das impurezas. 14

2-4	Relação de dispersão linear para a banda de condução utilizada em nossa abordagem.	23
3-1	Discretização da banda de condução pelo método intercalado que usa valores diferentes do parâmetro z para cada banda. Observe que, diferentemente do método tradicional, a banda de condução fica melhor recoberta.	25
3-2	Ilustração da invariância da banda de condução por transformação de escalas. Na figura a discretização é feita em escala logarítmica, uma discretização linear iria destruir a invariância por redução de escala.	26
3-3	Representação das funções de onda dos f_n em torno da impureza.	29
4-1	Estados de muitos corpos para iteração $N = 5$. Temos em (a) o estado fundamental e em (b) e (c) estados excitados a partir do estado fundamental; ε_F é zero e é acessível apenas para iterações pares.	41
4-2	Diagrama do Fluxo do Modelo do nível ressonante mostrando a evolução de um autovalor η_{2p}^{*+} para N par e ímpar e canal par e um autovalor $\hat{\eta}_{2p}^{*+}$ para N par e ímpar e canal ímpar. O <i>crossover</i> ocorre na mesma faixa do número de iteração N para cada paridade da impureza. Vê-se claramente que para cada canal temos pontos fixos diferentes, devido a assimetria natural do modelo.	46
5-1	Comportamento de γ_{oe} em função de z . Apesar da dependência ser muito suave, ela se torna progressivamente relevante à medida que nos aproximamos de níveis de baixa energias.	48
5-2	Densidades espectrais par (ρ_e) e ímpar (ρ_o). Os símbolos representam os resultados numéricos e a linha sólida a expressão analítica, dada pela Eq.(ref140). No cálculo utilizamos: $\Lambda = 10$, $k_F R = \pi$, $\Gamma = 0.01D$ e $\varepsilon_d = 0$. Com $k_F R = \pi$, as larguras par e ímpar do nível ressonante são iguais, $\Gamma_e = \Gamma_o$. Se o modelo fosse simétrico, teríamos um pico centrado em $\varepsilon_d = 0$. Neste caso $\Gamma_e = \Gamma_o$	49

5-3 Densidades espectrais par (ρ_e) e ímpar (ρ_o). Os símbolos representam os resultados numéricos e a linha sólida a expressão analítica, dada pela Eq.(ref140). Os parâmetros utilizados: $\Lambda = 10$, $k_F R = 2$, $\Gamma = 0.01D$ e $\varepsilon_d = 0$. Note que à medida que aproximamos as impurezas o canal par (ρ_e) se acopla mais fortemente a banda de condução. 51

Lista de Tabelas

2.1	Principais técnicas desenvolvidas na tentativa de explicar as propriedades físicas das ligas magnéticas.	11
4.1	Autovalores da diagonalização da banda de condução para N par com $\Lambda = 10$ e $z = 1$. Apenas uma das bandas (ímpar) está representada. Observa-se uma rápida convergência para o ponto fixo à medida que aumentamos o valor de N	40
4.2	Autovalores da diagonalização da banda de condução para N ímpar com $\Lambda = 10$ e $z = 1$. Apenas uma das banda(ímpar) está representada. Observa-se uma rápida convergência para o ponto fixo à medida que aumentamos o valor de N	42
4.3	Autovalores do Hamiltoniano de nível ressonante para N par e canal par	44
4.4	Autovalores do Hamiltoniano de nível ressonante para N par e canal ímpar	45
4.5	Autovalores do Hamiltoniano de nível ressonante para N ímpar e canal ímpar.	45

Resumo

Este trabalho calcula analítica e numericamente a densidade espectral para o modelo de Anderson de duas impurezas sem correlação eletrônica ($U = 0$). Nossos resultados servem como passo inicial para se entender o modelo com a correlação eletrônica. O modelo estudado descreve a interação entre elétrons de um metal e impurezas magnéticas localizadas, e a simplificação, $U = 0$, torna o Hamiltoniano quadrático permitindo assim que se divida o mesmo em dois termos: um envolvendo apenas operadores pares (canal par) e outro envolvendo apenas operadores ímpares (canal ímpar). Cada termo encontrado difere pouco do Hamiltoniano de Nível Ressonante. Nossos resultados abrangem tanto a diagonalização analítica como a numérica pelo método do Grupo de Renormalização, adaptado para o caso de duas impurezas. A simplicidade do Hamiltoniano permite que (1) se identifique características do modelo que afetam adversamente a precisão do cálculo numérico e (2) se encontre uma maneira de circundar tais dificuldades. Os resultados aqui encontrados ajudaram o desenvolvimento do cálculo da densidade espectral do modelo correlacionado, desenvolvido paralelamente em nosso grupo de pesquisa.

Abstract

This work calculates analytically and numerically the spectral density for the two impurity uncorrelated Anderson model ($U = 0$). Our results serve as an initial step towards understanding models with electronic correlation. The studied model describes the interaction between conduction-band electrons of a metal and localized magnetic impurities. The simplification $U = 0$ turns the Hamiltonian quadratic, allowing us to split it into two parts: one involving only even operators (even channel), the other involving odd operators (odd channel). Each term has a form differing a little from that for the Resonant Level Hamiltonian. Our results include analytic diagonalization as well as numerical calculations using the method of the Renormalization Group, adapted for the two impurity case. The traditional tridiagonalization method imposes particle-hole symmetry, while our treatment preserves the energy dependence of the coupling, between the impurities and the conduction-band, and consequently, the natural asymmetry of the model. The simplicity of the Hamiltonian allowed us to (1) identify characteristics of the model that affect adversely the accuracy of the numeric calculation and (2) find a way to surround such difficulties. The results here found helped the development of the calculation of the spectral density of the correlated model, developed simultaneously in our research group.

Capítulo 1

Introdução

Em 1966, Langreth^[1] calculou analiticamente a densidade espectral para o modelo de Anderson para impurezas magnéticas em metais. Nesse modelo, o metal é representado por uma banda de condução de largura $2D$ semi-preenchida e a impureza por um nível de energia ε_d (o índice refere-se ao orbital atômico d). Podemos ter quatro configurações possíveis para o orbital da impureza: vazio, ocupado com um elétron com spin para cima, ocupado com um elétron com spin para baixo ou duplamente ocupado. Temos também neste modelo uma hibridização (V) entre os estados dos elétrons de condução e o estado da impureza. Esse termo permite a transferência de elétrons entre a banda de condução e o orbital da impureza. Desta forma temos na banda uma ressonância centrada em ε_d com uma incerteza em energia dada por $\Gamma = \pi\rho V^2$, onde ρ é a densidade de estados dos elétrons de condução no nível de Fermi. O modelo inclui uma interação Coulombiana U quando o nível está duplamente ocupado, caso em que a energia do orbital é $2\varepsilon_d + U$. Utilizando técnicas diagramáticas Langreth encontrou uma relação de que decorre a seguinte expressão exata para a densidade espectral no nível de Fermi

$$\rho(\varepsilon = 0) = \frac{1}{\pi\Gamma} \sin^2(\delta_F) \quad (1.1)$$

onde δ_F é a defasagem sofrida pela banda de condução devido à presença da impureza.

Em 1985 Frota^[2], diagonalizou o Hamiltoniano do modelo de Anderson, utilizando um método numérico desenvolvido por Wilson^[3], e calculou numericamente sua densidade espectral; em especial, ele obteve o espectro de fotoemissão para o modelo de nível ressonante, caso particular do modelo descrito acima em que se desconsidera a correlação entre os elétrons da impureza.

Este trabalho tem por objetivo calcular numérica e analiticamente a densidade espectral para o modelo de Anderson de duas impurezas sem correlação eletrônica. A motivação para se estudar o modelo reside no fato de que podemos (a) mostrar que a expressão de Langreth é válida para todo o espectro de energia desse modelo, (b) apoiar o estudo do modelo correlacionado^[4] ($U \neq 0$) nos seguintes aspectos: *i*) fornecendo resultados analíticos que servem para conferir o código computacional desenvolvido para o modelo, *ii*) permitindo identificar com mais facilidade as dificuldades que eventualmente prejudiquem o cálculo numérico da densidade espectral e *iii*) simplificando a interpretação dos resultados numéricos nas vizinhanças dos pontos fixos da transformação do Grupo de Renormalização, que é o método por nós utilizado no cálculo.

O interesse na densidade espectral deriva no fato de que podemos medi-la em laboratório por duas técnicas: espectroscopia de fotoemissão de raios-X (“ X-ray Photoemission Spectroscopy - XPS ”) e espectroscopia de fotoemissão inversa ou espectroscopia isocromática de bremsstrahlung (“ Bremsstrahlung Isochromat Spectroscopy - BIS ”). Essas técnicas nos fornecem informações sobre a estrutura de níveis profundos de íons absorvidos.

A experiência de fotoemissão (XPS) consiste basicamente em incidir radiação de energia $\hbar\omega$ em uma superfície metálica e em seguida medir a corrente de elétrons fotoemitidos. A XPS pode ser feita de duas maneiras: (a) medindo a corrente em função tanto do ângulo como da energia de fotoemissão; (b) medindo somente a energia cinética de fotoemissão. No caso (a) o

interesse é analisar a distribuição dos momentos dos elétrons e em (b) determinar a densidade de estados.

A experiência de fotoemissão inversa consiste em incidir com feixe eletrônico (monocromático) a superfície de uma amostra, causando uma desaceleração de elétrons que por sua vez emitem radiação eletromagnética (bremsstrahlung).

Na próxima seção apresentamos os resultados para a densidade espectral do modelo de nível ressonante.

1.1 Densidade espectral para uma impureza

No caso em que o nível da impureza não interage com os elétrons da banda de condução teremos uma linha discreta na energia $\varepsilon = \hbar\omega + \varepsilon_\ell$, onde $\hbar\omega$ é a energia cedida pelo raio-X e ε_ℓ é a energia de ligação do elétron no orbital atômico. Resultados experimentais mostram picos alargados como os da Figura (1-1). Este alargamento está relacionado com a vida média do buraco criado devido a absorção do raio-X, sendo determinado pela probabilidade de transição de elétrons para o nível do absorvido.

O modelo de nível ressonante tem sido nos últimos anos exaustivamente estudado pois serve para testar diversas técnicas de cálculo. Utilizando a técnica do Grupo de Renormalização Numérico (GRN) Frota calculou e analisou a densidade espectral para o modelo de nível ressonante. Yoshida^[5], utilizando uma versão modificada da técnica também calculou a densidade obtendo a curva da Figura (1-1). A densidade é uma Lorentziana de largura Γ centrada na energia ε_d . A introdução de um novo parâmetro de discretização (z) na técnica possibilita melhores resultados numéricos, como podemos observar na Figura (1-1). A linha contínua representa a técnica com $z \neq 1$, os círculos sólidos a técnica com $z = 1$ e os triângulos representam a Convolução Gaussiana discutida na Ref.[6]. Como podemos observar, no caso em que a ener-

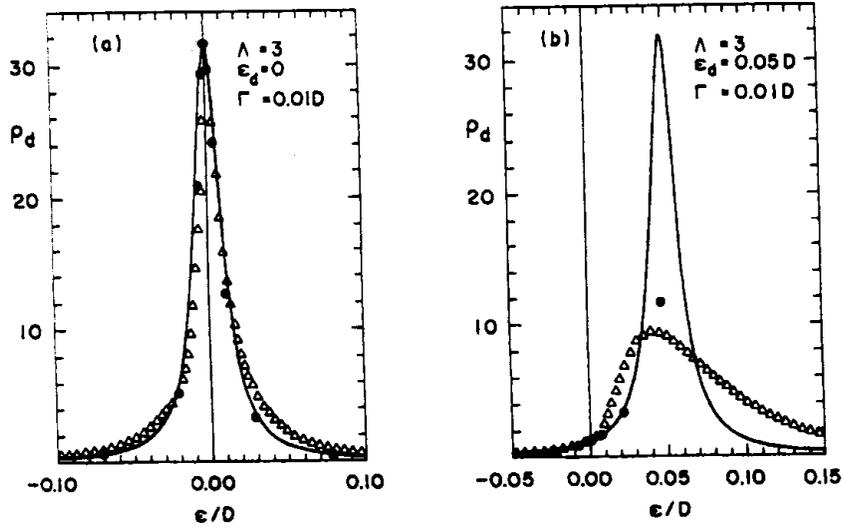


Figura 1-1: Densidade Espectral para o nível ressonante com $\Gamma = 0.01D$ e duas energias para a impureza. (a) $\varepsilon_d = 0$ e (b) $\varepsilon_d = 0.05D$. As linhas sólidas representam os resultados numéricos com $z \neq 1$ e os círculos cheios com $z = 1$. Os triângulos representam a convolução Gaussiana da Ref.[6].

gia da impureza é zero ($\varepsilon_d = 0$), os três resultados concordam bem, já para $\varepsilon_d \neq 0$ somente a técnica com $z \neq 1$ fornece resultados corretos.

Na Figura (1-2) mostramos a densidade para o modelo com $U \neq 0$ e $z = 1$, para três valores de correlação. Em a) devido a pequena correlação coulombiana, $U = 0.05D$, o estado fundamental é duplamente ocupado sendo necessário uma energia igual a $\Delta = \varepsilon_d + U$ para retirar um elétron da impureza e de acordo com a definição de densidade espectral, $\rho(\varepsilon) = \sum_F |\langle F|c_d|\Omega\rangle|^2 \delta(E_F - E_\Omega - \varepsilon)$, temos um pico em $\varepsilon = \Delta$ com meia largura Γ . Em b) aumentando o U , as configurações singelamente ocupada e duplamente ocupada são essencialmente degeneradas e o estado fundamental é uma combinação dessas duas configurações. O espectro de fotoemissão apresenta um pico referente a transição do estado duplamente ocupado para o singelamente ocupado e um devido a transição do estado singelamente ocupado para o vazio. Aumentando mais o U b) a configuração singelamente ocupada é favorecida, sendo este o regime

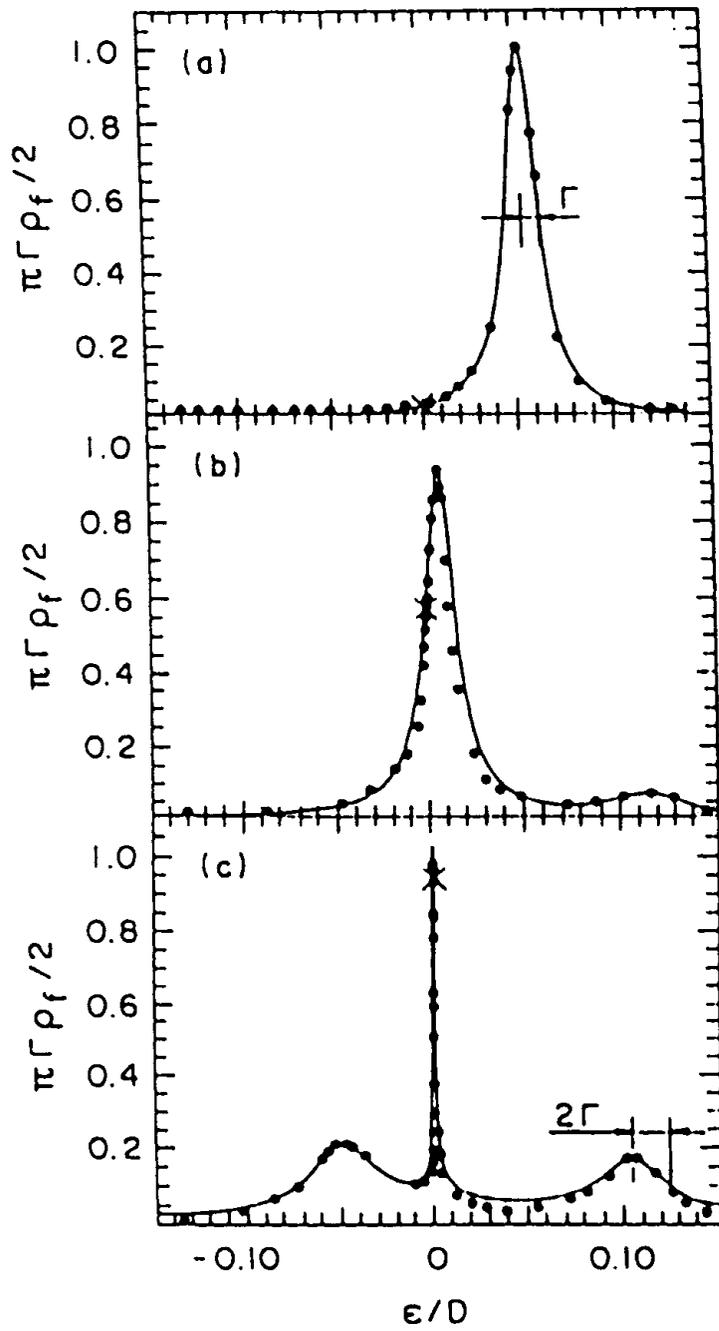


Figura 1-2: Densidade espectral para o modelo de Anderson de spin-degenerados como função da energia. Nos três casos temos que $\varepsilon_d = -0.1D$ e $\Gamma = 0.01D$. A repulsão Coulombiana nos casos (a), (b) e (c) é $U = 0.05D$, $0.105D$ e $0.15D$, respectivamente. As densidades foram calculadas com parâmetro de discretização $\Lambda = 3$, círculos cheios. A linha sólida representa fits combinando Lorentzianas de largura diferentes.

conhecido como Regime de Kondo.

1.2 Densidade espectral para duas impurezas

Na seção anterior apresentamos os resultados para uma única impureza. No presente trabalho temos duas impurezas localizadas em diferentes posições e com níveis de energias equivalentes. O acoplamento entre esses níveis gera um orbital ligante ou *canal par* e um anti-ligante ou *canal ímpar*, sendo que a densidade espectral pode ser dividida em duas partes: densidade par (ρ_e) e densidade ímpar (ρ_o).

Para o caso em que não há interação com a banda teremos uma situação análoga à anterior com as densidades par e ímpar sendo funções deltas. No caso em que há interação espera-se um comportamento semelhante ao de uma impureza, pois, devido a simetria de paridade, podemos separar o Hamiltoniano em dois problemas de uma impureza.

Concomitantemente ao nosso trabalho, Paula^[4] calculou a densidade espectral para o modelo correlacionado, descrevendo cada um dos três regimes característicos do modelo no limite de Kondo: regime Ferromagnético, regime Kondo e regime Antiferromagnético. A obtenção daqueles resultados, complementares aos contido nesta dissertação, se beneficiou da experiência adquirida ao longo do desenvolvimento deste trabalho.

Capítulo 2

Modelo de Anderson

Neste capítulo nós apresentamos alguns aspectos experimentais dos sistemas magnéticos, tais como ligas magnéticas, compostos de terras raras com valência flutuante e os sistemas de férmions pesados, nos quais ocorrem momentos magnéticos localizados. Estamos interessados aqui nas ligas magnéticas. Discutimos também, de uma maneira qualitativa, os principais métodos e modelos teóricos desenvolvidos com a finalidade de explicar as suas propriedades. Finalizando o capítulo, apresentamos o modelo de nosso interesse.

2.1 Momentos Magnéticos Localizados

Pequenas quantidades de metal de transição, como por exemplo *Fe*, *Ce*, *Mn*, *La*, ..., dissolvidos em um metal não magnético (*Pb*, *Au*, *Cu*, etc...) podem exibir ou não momento magnético localizado^[7]. A presença desses momentos magnéticos em ligas diluídas tem consequências importantes nas propriedades estáticas e dinâmicas dessas ligas. As impurezas magnéticas imersas nesses meios metálicos exercem perturbações localizadas, caracterizadas por efeitos de muitos-corpos, causando uma modificação no comportamento do sistema, metal mais impureza, quando se passa de altas temperaturas (ou energias) para baixas temperaturas. A

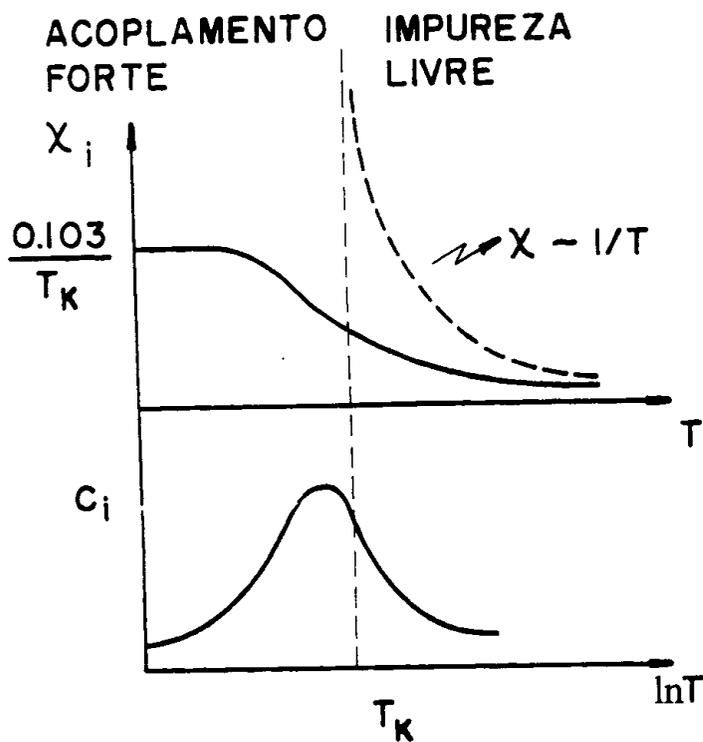


Figura 2-1: Esquemática da contribuição da impureza para a suscetibilidade magnética e para o calor específico. O pico no calor específico representa uma mudança na entropia. Na suscetibilidade vemos que para $T \gg T_K$ a impureza comporta-se como partícula livre e $T \ll T_K$ a impureza torna-se independente da temperatura.

temperatura que ocorre depende da substância.

As propriedades físicas refletem o aparecimento desses fenômenos, mostrando uma modificação no comportamento da liga diluída quando a temperatura passa por uma *temperatura característica* (T_K). A Figura (2-1) ilustra pictoricamente o comportamento da liga mostrando a suscetibilidade magnética e o calor específico como função da temperatura. Para uma temperatura maior que T_K , o comportamento de Curie indica que a impureza tem um momento magnético bem definido. Observa-se no entanto à medida que a temperatura diminui o momento magnético desaparece, pois a susceptibilidade desvia-se e torna-se independente da temperatura para regiões de temperatura menores que T_K . O calor específico mostrou uma

anomalia em torno da temperatura T_K , indicando que a impureza magnética está perdendo graus de liberdade.

Uma outra característica marcante dessa liga é o aparecimento de um mínimo na resistividade, na temperatura característica T_K , que depende da concentração das impureza. A ascensão da resistividade à medida que a temperatura decresce foge ao padrão tradicional, chamando a atenção de experimentais na década de 30. Análises sistemáticas dos trabalhos experimentais mostravam uma correlação entre este fenômeno e a presença de momentos localizados. Kondo^[8], calculou perturbativamente a contribuição para a resistividade e encontrou um termo proporcional a $\ln(T)$, com esse termo conseguiu explicar a resistência mínima que era encontrada experimentalmente. Segundo ele, o mínimo era originado pelo acoplamento do momento magnético da impureza com a banda de condução do metal hospedeiro. Por isso, a temperatura característica em que o mínimo ocorre é chamada *temperatura de Kondo* ou T_K .

Apesar do cálculo perturbativo de Kondo obter sucesso na explicação dos resultados experimentais, sua solução levantou dificuldades matemáticas, pois quando calculadas por teoria de perturbação as propriedades físicas apresentavam divergências logarítmicas infravermelhas. Essa falha na teoria de perturbação despertou o interesse de muitos autores e diversos foram os trabalhos teóricos propostos na tentativa de solucionar o problema. Finalmente, mais de uma década depois, Wilson^[3] desenvolveu um método não perturbativo para calcular a contribuição da impureza à susceptibilidade χ . Esse método, que descreveremos detalhadamente no Capítulo III, consiste em desacoplar e identificar de maneira sistemática as várias escalas de energia da banda de condução, que são responsáveis pelas divergências logarítmicas, e tratar numericamente apenas as escalas que sejam importantes no problema.

2.1.1 Modelos e métodos para estudar esses sistemas

Nesta seção vamos delinear alguns métodos e modelos teóricos empregados no estudo das propriedades físicas das ligas magnéticas.

Basicamente esses sistemas são representados por modelos de impurezas, dos quais os mais realistas envolve efeitos de muitos corpos e cálculos não perturbativos. O modelo de nível ressonante é o mais simples de todos, constituído por uma impureza, representada por um orbital não degenerado, ressonante com a banda de condução do metal hospedeiro. Dentre os mais realistas que foram adotados para descrever esses sistemas destacam-se o modelo de Anderson e o modelo de Kondo. Na próxima seção discutiremos o primeiro, que engloba o Hamiltoniano do nível ressonante como caso especial. O modelo de Anderson é equivalente ao Modelo de Kondo para $\Gamma \ll U, \varepsilon_d$.

As diversas técnicas desenvolvidas desde 1975 para investigar esses sistemas apresentam suas vantagens e desvantagens. Sob esses aspectos essas diversas técnicas se complementam. Na Tabela (2.1.1) ilustramos resumidamente as principais técnicas.

Aqui, como já foi mencionado, empregamos o Grupo de Renormalização para calcular a densidade espectral para o modelo de Anderson de duas impurezas sem correlação eletrônica. A seguir faremos um breve descrição do modelo de Anderson.

2.2 Modelo de Anderson de uma impureza

A primeira descrição da formação dos momentos magnéticos foi dada por Anderson^[7] em meados da década de 60. Ele propôs, para descrever esses sistemas metálicos diluídos com impurezas magnéticas localizadas, um modelo simples no qual o metal hospedeiro é representado por uma liga diluída e a impureza por um orbital ressonante (d para metal de transição e f para terras raras) com degenerescência de spin. Essa degenerescência possibilita quatro configurações

<i>Técnica</i>	<i>Vantagens</i>	<i>Desvantagens</i>
Ansatz Bethe	Mostra-se muito eficaz para calcular as propriedades termodinâmicas.	Ainda não se pode calcular com esse método as propriedades dinâmicas.
Expansão $1/N$	Trata propriedades dinâmicas e estáticas e trabalha com modelos mais realísticos, é aplicado a sistemas com alta degenerescência na impureza.	Inadequado para pequenas degenerescência N . Problemática para mais de uma impureza.
Grupo de Renormalização	Trata propriedades estáticas e dinâmicas, é altamente preciso e válido para quaisquer parâmetro do modelo.	Alto custo computacional e limita a aplicação para modelos com poucos graus de liberdade.
Monte Carlo	Possui as mesmas vantagens do GRN.	Precisão limitada e decrescente à medida que $T \rightarrow 0$.
Invariância Conforme	Vantagens analíticas, pouco trabalhosa	Aplicável apenas a alguns modelos. Só funciona a baixas energias.

Tabela 2.1: Principais técnicas desenvolvidas na tentativa de explicar as propriedades físicas das ligas magnéticas.

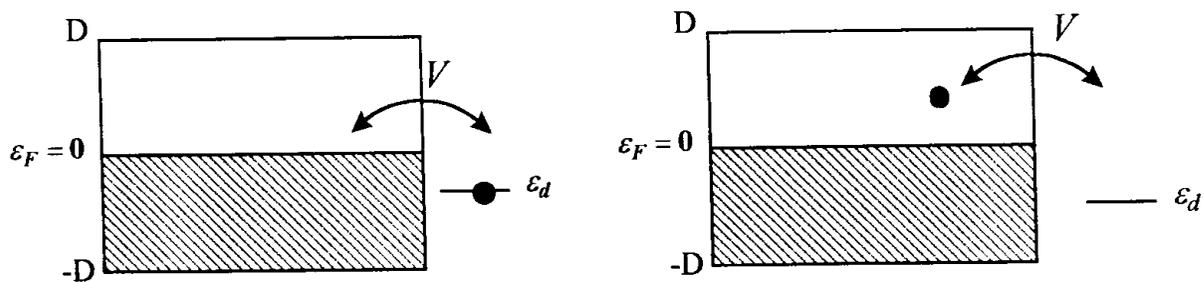


Figura 2-2: Representação esquemática do modelo de Anderson de uma impureza. D é a meia largura da banda de condução semi-preenchida e ε_F o nível de Fermi. O acoplamento entre o nível da impureza e a banda de condução possibilita a transferência de elétrons da impureza (lado esquerdo) para o metal (lado direito) e vice-versa.

possíveis para o orbital da impureza: vazio, ocupado com um elétrons (degenerescência de spin) ou duplamente ocupado.

Representamos o modelo pelos elétrons de condução não interagentes da banda de condução, pela energia de ligação dos elétrons do orbital da impureza, pela hibridização desse orbital com a banda de condução e pela interação dos elétrons de condução com a impureza magnética. Consideramos a banda de condução simétrica em relação ao nível de Fermi com largura $2D$ e com relação de dispersão linear $\varepsilon = v_F(k - k_F)$, sendo $v_F = k_F/m$ a velocidade de Fermi. Temos neste modelo dois fatores que podem afetar o elétron no estado da impureza: um é a hibridização V , que representa o acoplamento entre o metal hospedeiro e a impureza e o outro é a repulsão Coulombiana (U) entre os elétrons dentro deste orbital. Quando o orbital está duplamente ocupado temos uma energia de $2\varepsilon_d + U$. Devido a hibridização o orbital da impureza possui uma largura na sua energia dada por $\Gamma = \pi\rho V^2$; ρ é a densidade de estados de elétrons de condução por spin no nível de Fermi. O modelo é ilustrado na Figura (2-2).

O Hamiltoniano de Anderson é descrito por

$$H = H_{BC} + \varepsilon_d c_{d\mu}^\dagger c_{d\mu} + V \sum_{k,\mu} (c_{k\mu}^\dagger c_{d\mu} + h.c.) + U c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow} c_{d\downarrow}^\dagger c_{d\downarrow} \quad (2.1)$$

onde $H_{BC} = \sum_{k,\mu} \varepsilon_k c_{k\mu}^\dagger c_{k\mu}$ denota a banda de condução. O operador $c_{k\mu}^\dagger$ cria um elétron de condução com momento k e spin μ e o operador $c_{d\mu}^\dagger$ cria um elétron no orbital d com spin μ . O primeiro termo corresponde a energia da banda de condução, o segundo a energia da impureza, o terceiro a hibridização e o quarto a correlação eletrônica no orbital da impureza. O Hamiltoniano possui simetria partícula-buraco; sendo assim, é invariante frente à transformação $c_{k\mu} \rightarrow c_{-k\mu}^\dagger$, $c_{d\mu} \rightarrow -c_{d\mu}^\dagger$. Para $U = 0$ temos

$$H_{NR} = \sum_{k,\mu} \varepsilon_k c_{k\mu}^\dagger c_{k\mu} + \varepsilon_d c_{d\mu}^\dagger c_{d\mu} + V \sum_{k,\mu} (c_{k\mu}^\dagger c_{d\mu} + h.c.) \quad (2.2)$$

que é o Hamiltoniano do nível ressonante.

O Hamiltoniano dado pela Eq.(2.2) sendo quadrático é exatamente diagonalizável. Com esse modelo calculou-se^[10] a susceptibilidade magnética estática e dinâmica como função da temperatura, do campo magnético e da largura do nível ressonante por meio de funções de Green. Gunnarsson e Schönhammer^[11] utilizaram-o para estudar as propriedades de absorção química em metais e calcularam espectros de fotoemissão por funções de Green. Do ponto de vista teórico esse modelo, uma vez sendo exato, serve não só para testar outras técnicas como também para simplificar a interpretação de alguns resultados; do ponto de vista experimental, entretanto ele é menos interessante, já que desconsidera a correlação entre os elétrons da impureza.

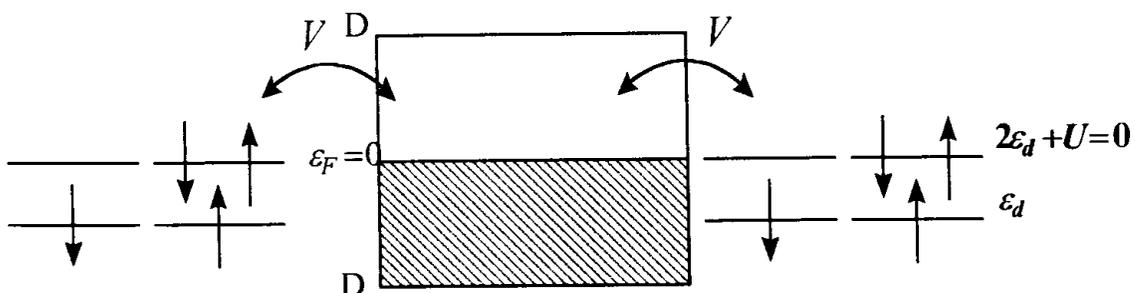


Figura 2-3: Modelo de Anderson de duas impureza. D é a meia largura da banda de condução semi-preenchida e ε_F o nível de Fermi. U é a correlação eletrônica entre os elétrons das impurezas.

2.3 Modelo de Anderson de duas impurezas

Embora o modelo de uma impureza descreva muito bem o limite de altas diluições das ligas magnéticas, ele se torna progressivamente menos confiável à medida que a concentração das impurezas aumenta. Um dos fatores que contribuem para esse comportamento é a interação (indireta) entre as impurezas desprezada no modelo de uma impureza. O modelo mais simples que mantém esta interação é o Modelo de Anderson de duas impurezas, definido por Alexander e Anderson^[12]. A Figura (2-3) ilustra o modelo.

O Hamiltoniano de Anderson de duas impurezas pode ser escrito por

$$H = H_{BC} + \varepsilon_d(n_{d_1} + n_{d_2}) + V \sum_k \left\{ c_k^\dagger \left[e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R})/2} d_1 + e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{R})/2} d_2 \right] + h.c. \right\} + U(n_{d_1 \uparrow} n_{d_1 \downarrow} + n_{d_2 \uparrow} n_{d_2 \downarrow}), \quad (2.3)$$

onde

$$H_{BC} = \sum_k^\infty \varepsilon_k c_k^\dagger c_k, \quad (2.4)$$

denota a banda de condução não interagente e semi cheia, com largura D . Os operadores fermiônicos c_k , d_1 e d_2 se referem ao estado k de condução, a impureza 1 (localizada na posição $\vec{R}/2$), e a impureza 2 (localizada na posição $-\vec{R}/2$), respectivamente e n_d é o número de ocupação de spin no nível da impureza de energia ε_d . A soma em μ está subentendida. Nesse modelo descrevemos a banda de condução por orbitais s e as impurezas por orbitais nominalmente chamados “ d ” ou “ f ”, muito embora se desconsidere a degenerescência orbital. Com $U = 0$, o Hamiltoniano se reduz à forma quadrática

$$H_{BC} = H_{BC} + \varepsilon_d(n_{d_1} + n_{d_2}) + V \sum_k \left\{ c_k^\dagger \left[e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R})/2} d_1 + e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{R})/2} d_2 \right] + h.c. \right\}. \quad (2.5)$$

Este é o Hamiltoniano de nosso interesse.

2.3.1 Preparação do Hamiltoniano

Assim como o Hamiltoniano geral, a forma quadrática possui simetrias que podem ser exploradas na sua diagonalização. O problema que consideramos possui simetria de inversão \vec{R} em $-\vec{R}$, ou seja, a troca da impureza 1 pela impureza 2 não altera o problema. Devido a essa simetria os auto-estados associados das impurezas formam orbitais ligante e anti-ligante com paridade bem definida. Podemos assim trabalhar com os operadores d_p dados por

$$d_p = \frac{d_1 \pm d_2}{\sqrt{2}}, \quad (2.6)$$

onde $p = e, o$ denota o canal par ou ímpar, respectivamente.

Se \vec{R} é infinito podemos separar o Hamiltoniano em dois problemas de uma impureza, mas se \vec{R} for finito os operadores de condução centrados em cada uma das impurezas não serão mais ortogonais. Contornamos esse problema fazendo uma combinação linear par e outra ímpar dos estados de condução, tomando como origem o ponto médio entre as impurezas. Assim no

Hamiltoniano, Eq.(2.5), podemos separar a parte quadrática em duas parcelas uma par e outra ímpar. Esse procedimento é discutido detalhadamente a seguir.

Supondo simetria esférica em torno de cada nível localizado da impureza, podemos construir estados de Wannier em torno de cada impureza, representados por

$$\Psi(\vec{R}/2) = \sum_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}/2} c_k \quad (2.7)$$

e

$$\Psi(-\vec{R}/2) = \sum_k e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}/2} c_k, \quad (2.8)$$

onde $\Psi(\vec{R}/2)$ e $\Psi(-\vec{R}/2)$ são operadores de aniquilação de um elétron localizado num estado esférico em torno da impureza $\vec{R}/2$ (ou sítio 1) ou da impureza $-\vec{R}/2$ (ou sítio 2) respectivamente. Desta forma podemos escrever a Eq.(2.5) como

$$H = H_{BC} + \varepsilon_d(n_{d_1} + n_{d_2}) + V \left[\Psi(\vec{R}/2)d_1 + \Psi(-\vec{R}/2)d_2 + h.c. \right]. \quad (2.9)$$

Essa simetria esférica permite que trabalhem com os operadores $\Psi(\vec{R}/2)$ e $\Psi(-\vec{R}/2)$ em função dos operadores c_ε e \bar{c}_ε , os quais são operadores de aniquilação de um elétron com energia ε em estados com simetria esférica. Portanto podemos reescrever a Eq.(2.7) como

$$\Psi(\vec{R}/2) = \int d^3k \int d\varepsilon \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}/2} c_k = \int d\varepsilon \sqrt{\rho(\varepsilon)} c_\varepsilon, \quad (2.10)$$

onde

$$c_\varepsilon = \frac{1}{\sqrt{\rho(\varepsilon)}} \int d^3k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}/2} c_k \quad (2.11)$$

e

$$\rho(\varepsilon) = \int d^3k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) \quad (2.12)$$

é a densidade de estados no nível de energia ε .

Analogamente para $\Psi(-\vec{R}/2)$, temos

$$\Psi(-\vec{R}/2) = \int d^3k \int d\varepsilon \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}/2} c_k = \int d\varepsilon \sqrt{\rho(\varepsilon)} \bar{c}_\varepsilon, \quad (2.13)$$

onde

$$\bar{c}_\varepsilon = \frac{1}{\sqrt{\rho(\varepsilon)}} \int d^3k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}/2} c_k. \quad (2.14)$$

Descrever o sistema em termos dos operadores das Eqs.(2.11) e (2.14) não é apropriado, pois eles não são ortogonais

$$\{c_\varepsilon, \bar{c}_{\varepsilon'}^\dagger\} = \frac{1}{\rho(\varepsilon)} \delta(\varepsilon - \varepsilon') \int d^3k e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{R})} \delta(\varepsilon - \varepsilon_k). \quad (2.15)$$

Contudo, podemos definir operadores ortogonais a partir deles; para isso devemos calcular o lado direito dessa equação. Considerando a banda de condução isotrópica, isto é, $\varepsilon = \varepsilon_k$, temos

$$\int d^3k e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{R})} \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) = \int d^2k k^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) \int d\Omega e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R})}. \quad (2.16)$$

A mudança de variável k para ε' transforma essa equação em

$$\int d^3k e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{R})} \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) = k^2 \frac{dk}{d\varepsilon} \int d\Omega e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R})}, \quad (2.17)$$

sendo que a integral resulta em

$$\int d\Omega e^{i(\vec{k} \cdot \vec{R})} = \frac{4\pi}{kR} \sin(kR). \quad (2.18)$$

Substituindo a Eq.(2.18) na Eq.(2.17) temos

$$\int d^3k e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{R})} \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) = k^2 \frac{dk}{d\varepsilon} \frac{4\pi}{kR} \sin(kR), \quad (2.19)$$

ou

$$\int d^3k e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{R})} \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) = \frac{\rho(\varepsilon)}{kR} \sin(kR). \quad (2.20)$$

com $\rho(\varepsilon) = 4\pi k^2 \frac{dk}{d\varepsilon}$. Agora combinando as Eqs.(2.20) e (2.15) obtemos

$$\{c_\varepsilon, \bar{c}_{\varepsilon'}^\dagger\} = \delta(\varepsilon - \varepsilon') \frac{\sin(kR)}{kR}. \quad (2.21)$$

Definimos então dois operadores fermiônicos ortogonais $c_{\varepsilon+}$ e $c_{\varepsilon-}$ como combinações lineares dos operadores originais;

$$c_{\varepsilon p} = \frac{1}{2A_p} (c_\varepsilon \pm \bar{c}_\varepsilon), \quad (2.22)$$

onde p indica a combinação linear par(e) ou ímpar(o) dos operadores originais. As relações de anticomutação, $\{c_{\varepsilon p}, \bar{c}_{\varepsilon' p}^\dagger\} = \delta(\varepsilon - \varepsilon')$, implicam que

$$A_p^2 = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\sin(k(\varepsilon)R)}{k(\varepsilon)R} \right), \quad (2.23)$$

onde $A_{p=e,o}$ são fatores de normalização, que dependem da energia e da separação R das impurezas; $k(\varepsilon)$ é o valor absoluto do momentum, isto é,

$$k(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{v_F} + k_F. \quad (2.24)$$

onde k_F é o momentum do elétron no nível de Fermi.

Obtemos os operadores $\Psi(\vec{R}/2)$ e $\Psi(-\vec{R}/2)$ invertendo as Eqs.(2.22) e substituindo os

resultados nas Eqs.(2.10) e (2.13), respectivamente. Assim, encontramos

$$\Psi(\vec{R}/2) = \int d\varepsilon \sqrt{\rho(\varepsilon)} (A_e c_{\varepsilon e} + A_o c_{\varepsilon o}) \quad (2.25)$$

e

$$\Psi(-\vec{R}/2) = \int d\varepsilon \sqrt{\rho(\varepsilon)} (A_e c_{\varepsilon e} - A_o c_{\varepsilon o}). \quad (2.26)$$

Então substituindo as Eqs.(2.25) e (2.26) na Eq.(2.9) obtemos

$$H = H_{BC} + V \int d\varepsilon \sqrt{\rho(\varepsilon)} \left[(A_e c_{\varepsilon e}^\dagger + A_o c_{\varepsilon o}^\dagger) d_1 + (A_e c_{\varepsilon e}^\dagger - A_o c_{\varepsilon o}^\dagger) d_2 + h.c. \right] + \varepsilon_d (n_{d_1} + n_{d_2}). \quad (2.27)$$

Com a finalidade de obtermos o Hamiltoniano da banda de condução em termos dos operadores $c_{\varepsilon p}$, substituímos c_ε e \bar{c}_ε , definidos pelas Eqs.(2.11) e (2.14), nas Eqs.(2.22), e assim chegamos a

$$c_{\varepsilon e} = \frac{1}{A_e \sqrt{\rho(\varepsilon)}} \int d^3 k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) \cos(\vec{k} \cdot \vec{R}/2) c_k \quad (2.28)$$

e

$$c_{\varepsilon o} = \frac{i}{A_o \sqrt{\rho(\varepsilon)}} \int d^3 k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) \sin(\vec{k} \cdot \vec{R}/2) c_k, \quad (2.29)$$

que é vista como uma transformação unitária do tipo

$$c_i = \int d^3 k u_{ik} c_k,$$

onde i representa um valor de k para cada sinal (+) ou (-). Podemos então invertê-las, resultando em

$$c_k = \frac{1}{\sqrt{\rho(\varepsilon)}} \int d\varepsilon \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) \left[\frac{1}{A_e} \cos(\vec{k} \cdot \vec{R}/2) c_{\varepsilon e} - \frac{i}{A_o} \sin(\vec{k} \cdot \vec{R}/2) c_{\varepsilon o} \right]. \quad (2.30)$$

Como

$$H_{BC} = \sum_k^\infty \varepsilon_k c_k^\dagger c_k, \quad (2.31)$$

substituindo a Eq.(2.30) na equação acima temos

$$H_{BC} = \int d\varepsilon \frac{dk}{d\varepsilon} \frac{k^2}{\rho(\varepsilon)} \varepsilon_k \left[\frac{1}{A_e^2} \int d\Omega \cos^2(kR \cos \theta/2) c_{\varepsilon e}^\dagger c_{\varepsilon e} + \frac{1}{A_o^2} \int d\Omega \sin^2(kR \cos \theta/2) c_{\varepsilon o}^\dagger c_{\varepsilon o} - \frac{1}{A_e A_o} \int d\Omega \cos(kR \cos \theta/2) \sin(kR \cos \theta/2) (c_{\varepsilon e}^\dagger c_{\varepsilon e} - c_{\varepsilon o}^\dagger c_{\varepsilon o}) \right], \quad (2.32)$$

onde $\vec{k} \cdot \vec{R} = kR \cos \theta$. As três integrais acima resultam em

$$\begin{aligned} \int d\Omega \cos^2(kR \cos \theta/2) &= 4\pi A_e^2 \\ \int d\Omega \sin^2(kR \cos \theta/2) &= 4\pi A_o^2 \\ \int d\Omega \cos(kR \cos \theta/2) \sin(kR \cos \theta/2) &= 0. \end{aligned}$$

Combinando os resultados das integrais com a Eq.(2.32) encontramos

$$H_{BC} = \int d\varepsilon \varepsilon (c_{\varepsilon e}^\dagger c_{\varepsilon e} + c_{\varepsilon o}^\dagger c_{\varepsilon o}). \quad (2.33)$$

O Hamiltoniano da banda de condução, definido pela Eq.(2.33), agora está numa forma conveniente para usarmos o método de discretização logarítmica desenvolvido por Wilson. Podemos escrever o termo de hibridização em uma forma ainda mais conveniente como se segue

$$H_{i-c} = V \int d\varepsilon \sqrt{\rho(\varepsilon)} \left[(A_e c_{\varepsilon e}^\dagger + A_o c_{\varepsilon o}^\dagger) d_1 + (A_e c_{\varepsilon e}^\dagger - A_o c_{\varepsilon o}^\dagger) d_2 + h.c. \right]. \quad (2.34)$$

Definindo os operadores fermiônicos f_{0p} como

$$f_{0e} = N_e \int d\varepsilon c_{\varepsilon e} A_e(\varepsilon) \quad (2.35)$$

e

$$f_{0o} = N_o \int d\varepsilon c_{\varepsilon o} A_o(\varepsilon), \quad (2.36)$$

onde N_p^2 são dadas por

$$N_p^2 = \frac{1}{\int d\varepsilon c_{\varepsilon p} A_p^2(\varepsilon)}, \quad (2.37)$$

sendo facilmente avaliadas usando as Eq.(2.23), obtendo

$$N_p^2 = \frac{2k_F R \Delta / D}{2k_F R \Delta \pm [\text{Si}((1 + \Delta)k_F R) - \text{Si}((1 - \Delta)k_F R)]}, \quad (2.38)$$

onde $\Delta = D/v_F k_F$ é um parâmetro chamado assimetria, introduzido pela primeira vez neste modelo. Assim encontramos, para a Eq.(2.34),

$$H_{i-c} = \frac{V}{\sqrt{D}} \left[\left(\frac{1}{N_e} f_{0e}^\dagger + \frac{1}{N_o} f_{0o}^\dagger \right) d_1 + \left(\frac{1}{N_e} f_{0e}^\dagger + \frac{1}{N_o} f_{0o}^\dagger \right) d_2 + h.c. \right]. \quad (2.39)$$

Devido a simetria de inversão é conveniente trabalharmos com os operadores d_p definidos na Eq.(2.6). Com isso temos

$$H_{i-c} = \frac{V}{\sqrt{D}} \left(\frac{1}{N_e} f_{0e}^\dagger d_e + \frac{1}{N_o} f_{0o}^\dagger d_o + h.c. \right), \quad (2.40)$$

ou

$$H_{i-c} = \frac{V}{\sqrt{D}} \left(\frac{1}{N_p} f_{0p}^\dagger d_p + h.c. \right). \quad (2.41)$$

Resta-nos escrever o termo correspondente a energia da impureza,

$$H_i = \varepsilon_d (n_{d_1} + n_{d_2}), \quad (2.42)$$

em função dos operadores d_p . Assim

$$H_i = \varepsilon_d(d_1^\dagger d_1 + d_2^\dagger d_2). \quad (2.43)$$

Como

$$d_1^\dagger d_1 + d_2^\dagger d_2 = d_e^\dagger d_e + d_o^\dagger d_o, \quad (2.44)$$

temos que

$$H_i = \varepsilon_d(d_e^\dagger d_e + d_o^\dagger d_o), \quad (2.45)$$

ou

$$H_i = \varepsilon_d d_p^\dagger d_p. \quad (2.46)$$

A forma final do Hamiltoniano de duas impurezas fica

$$H = \int d\varepsilon \varepsilon c_{\varepsilon p}^\dagger c_{\varepsilon p} + \varepsilon_d d_p^\dagger d_p + \frac{V}{\sqrt{D}} \left(\frac{1}{N_p} f_{0p}^\dagger d_p + h.c. \right). \quad (2.47)$$

Convém observar que o acoplamento $A_{p=e,o}(k_\varepsilon, R)$ nas Eqs. (2.35) e (2.36) é dependente da energia. Uma transformação partícula-buraco resulta, como podemos verificar nas Eq.(2.24), em momentos diferentes e conseqüentemente em acoplamentos diferentes para uma mesma energia conforme ilustrado na Figura (2-4). Podemos observar também que a largura da banda de condução determina os limites máximos dos momentos e do acoplamento assimétrico que é controlado pelo parâmetro definido na Eq.(2.38).

Concluimos assim que o modelo de Anderson de duas impurezas é assimétrico frente a uma transformação partícula-buraco. Estudos anteriores^{[13]-[17]} tomaram o acoplamento entre a banda de condução e a impurezas via hibridização como uma constante calculada no nível de Fermi, isto é, $A_p(kR) = A_p(k_F R)$. Argumentou-se na época que essa substituição desconsidera

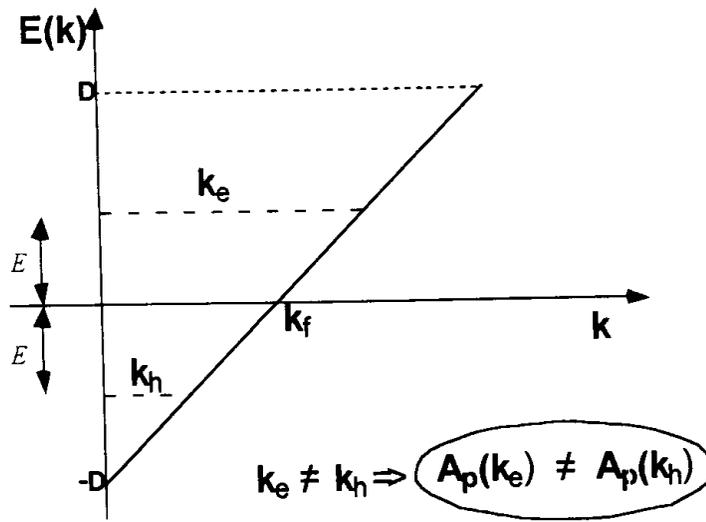


Figura 2-4: Relação de dispersão linear para a banda de condução utilizada em nossa abordagem.

apenas operadores irrelevantes. Hoje sabemos [18] que a aproximação desconsidera um operador marginal e que ela impõe simetria inexistente no modelo original.

Capítulo 3

Grupo de Renormalização Numérico

Este procedimento, desenvolvido por Wilson no estudo do problema de Kondo^[3], consiste basicamente em discretizar logaritmicamente a banda de condução e encontrar uma base finita na qual podemos escrever o Hamiltoniano que é, em seguida, diagonalizado numericamente.

3.1 Discretização logarítmica

Dadas as divergências logarítmicas apresentadas no cálculo perturbativo do modelo, a discretização da banda é efetuada substituindo o contínuo k por um conjunto de pontos dispostos num intervalo de escala logarítmica, conforme mostra a Figura(3-1) o qual envolve dois parâmetros adimensionais, Λ e z . O primeiro foi introduzido por Wilson^[3] e pode, em princípio, assumir qualquer valor maior que a unidade e o segundo por Yoshida *et al*^[5] podendo assumir qualquer valor no intervalo $0 < z \leq 1$. No limite de $\Lambda \rightarrow 1$ o contínuo é recuperado e o procedimento se torna exato e quando $z = 1$, a discretização original é recuperada.

No procedimento generalizado (método intercalado) desenvolvido por Silva^[19] o parâmetro z assume diferentes valores dependendo da paridade da banda de condução, isto é, $z = z_{p=e,o}$.

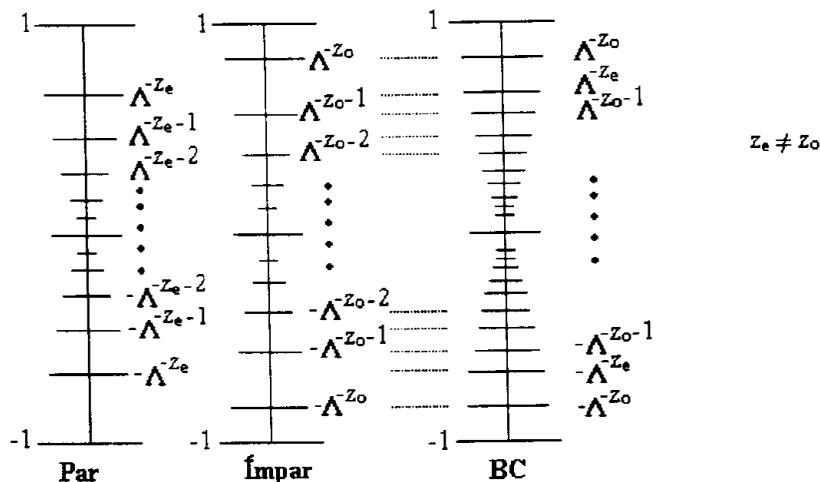


Figura 3-1: Discretização da banda de condução pelo método intercalado que usa valores diferentes do parâmetro z para cada banda. Observe que, diferentemente do método tradicional, a banda de condução fica melhor recoberta.

Uma consequência imediata disso é que, como podemos observar na Figura (3-1), a banda de condução fica melhor recoberta, assim obtemos mais energias (discretas) sem aumentar substancialmente o tempo de cálculo numérico. Podemos ilustrar isso da seguinte maneira: se $z_e = 1$ e $z_o = 0.5$ a discretização com o parâmetro Λ é equivalente à tradicional com $\Lambda^{1/2}$. Em suma tudo se passa como se estivéssemos trabalhando com um parâmetro $\Lambda_{efetivo} = \sqrt{\Lambda}$. Como o tempo exigido para diagonalização numérica do Hamiltoniano cresce exponencialmente com $1/\ln \Lambda$, tal equivalência reduz enormemente o esforço computacional necessário para se computarem propriedades termodinâmicas. A banda de condução é invariante por transformação de escalas de energias (veja Figura (3-2)), essa propriedade característica é preservada na discretização logarítmica. Assim a discretização tem um papel importante na teoria do Grupo de Renormalização, pois a banda de condução mantém seus níveis espectrais após a transformação de escalas. Esses níveis de energias invariantes definem os pontos fixos na transformação de Grupo

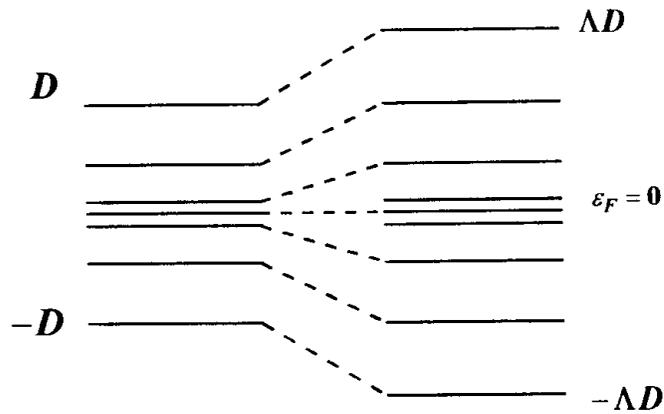


Figura 3-2: Ilustração da invariância da banda de condução por transformação de escalas. Na figura a discretização é feita em escala logarítmica, uma discretização linear iria destruir a invariância por redução de escala.

de Renormalização. Como podemos observar na Figura (3-1), o intervalo entre esses níveis vai diminuindo exponencialmente à medida que se aproxima do nível de Fermi. Com isso teremos uma maior concentração de níveis de energia nessa região que faz com que ela se aproxime de um contínuo. Assim as energias compreendidas nesse intervalo são representadas por uma relação de dispersão linear

$$\varepsilon = \varepsilon_k - \varepsilon_F \approx v_F(k - k_F), \quad (3.1)$$

sendo k_F e v_F o momento e a velocidade de Fermi, respectivamente.

A discretização do Hamiltoniano de duas impurezas é feita basicamente de maneira análoga ao caso de uma impureza^[20]. Projetamos o Hamiltoniano em uma nova base discreta, definida de forma a preservar a invariância da banda de condução, formada de operadores fermiônicos definidos para cada intervalo da banda discretizada. Assim

$$a_p = (1 - \Lambda^{-z_p})^{-\frac{1}{2}} \int_{\Lambda^{-z_p}}^1 c_{\varepsilon p} d\varepsilon, \quad b_p = (1 - \Lambda^{-z_p})^{-\frac{1}{2}} \int_{-1}^{-\Lambda^{-z_p}} c_{\varepsilon p} d\varepsilon \quad (3.2)$$

$$a_{mp} = \frac{\Lambda^{-\frac{m+z_p}{2}}}{(1-\Lambda^{-1})^{\frac{1}{2}}} \int_{\Lambda^{-(m+1+z_p)}}^{\Lambda^{-(m+z_p)}} c_{\varepsilon p} d\varepsilon, \quad b_{mp} = \frac{\Lambda^{-\frac{m+z_p}{2}}}{(1-\Lambda^{-1})^{\frac{1}{2}}} \int_{-\Lambda^{-(m+z_p)}}^{-\Lambda^{-(m+1+z_p)}} c_{\varepsilon p} d\varepsilon$$

com $p = e, o$, onde; $e =$ canal par e $o =$ canal ímpar.

A banda de condução continua com a simetria partícula-buraco portanto, similarmente ao problema de uma impureza, temos

$$H_{BC} = \sum_p E_p (a_p^\dagger a_p - b_p^\dagger b_p) + \sum_{m=0,p}^{\infty} E_{mp} (a_{mp}^\dagger a_{mp} - b_{mp}^\dagger b_{mp}), \quad (3.3)$$

onde

$$E_p = \frac{\int_{\Lambda^{-z_p}}^1 \varepsilon_k d\varepsilon_k}{\int_{\Lambda^{-z_p}}^1 d\varepsilon_k} \quad (3.4)$$

e

$$E_{mp} = \frac{\int_{\Lambda^{-z_p-m}}^{\Lambda^{1-z_p-m}} \varepsilon_k d\varepsilon_k}{\int_{\Lambda^{-z_p-m}}^{\Lambda^{1-z_p-m}} d\varepsilon_k} \quad (3.5)$$

são as energias médias em cada intervalo da Figura (3-1).

Descrevendo os operadores f'_{0p} s em termos dos operadores definidos na Eq.(3.2) temos

$$f_{0p} = N_p \int d\varepsilon c_{\varepsilon p} A_p(\varepsilon), \quad (3.6)$$

como

$$c_{\varepsilon p} = \sum_{\ell, m} \left(a_{\ell p} \Psi_\ell^+ + b_{\ell p} \Psi_\ell^- + a_{m\ell p} \Psi_{m\ell}^+ + b_{m\ell p} \Psi_{m\ell}^- \right), \quad (3.7)$$

substituindo a Eq.(3.7) na Eq.(3.6) com os $\Psi_{m\ell}^\pm$ definidos na referência [21], encontramos

$$f_{0p} = N_p \sum_m \left[\int_{\Lambda^{-z_p}}^1 d\varepsilon A_p(\varepsilon) a_p \frac{1}{(1-\Lambda^{-z_p})^{1/2}} + \int_{-1}^{-\Lambda^{-z_p}} d\varepsilon A_p(\varepsilon) b_p \frac{1}{(1-\Lambda^{-z_p})^{1/2}} \right. \\ \left. + \int_{\Lambda^{-(m+1+z_p)}}^{\Lambda^{-(m+z_p)}} d\varepsilon A_p(\varepsilon) a_{mp} \frac{\Lambda^{\frac{m+z_p}{2}}}{(1-\Lambda^{-1})^{1/2}} + \int_{-\Lambda^{-(m+z_p)}}^{-\Lambda^{-(m+1+z_p)}} d\varepsilon A_p(\varepsilon) b_{mp} \frac{\Lambda^{\frac{m+z_p}{2}}}{(1-\Lambda^{-1})^{1/2}} \right] \quad (3.8)$$

Considerando \bar{A}_p o valor médio das funções $A_p(\varepsilon)$ em cada intervalo temos

$$\bar{A}_{ap} = \frac{\int_{\Lambda^{-z_p}}^1 d\varepsilon A_p(\varepsilon)}{(1 - \Lambda^{-z_p})^{1/2}}, \quad \bar{A}_{bp} = \frac{\int_{-1}^{-\Lambda^{-z_p}} d\varepsilon A_p(\varepsilon)}{(1 - \Lambda^{-z_p})^{1/2}} \quad (3.9)$$

$$\bar{A}_{amp} = \frac{\int_{\Lambda^{-(m+1+z_p)}}^{\Lambda^{-(m+z_p)}} d\varepsilon A_p(\varepsilon)}{(1 - \Lambda^{-1})^{1/2} \Lambda^{-\frac{m+z_p}{2}}}, \quad \bar{A}_{bmp} = \frac{\int_{-\Lambda^{-(m+z_p)}}^{-\Lambda^{-(m+1+z_p)}} d\varepsilon A_p(\varepsilon)}{(1 - \Lambda^{-1})^{1/2} \Lambda^{-\frac{m+z_p}{2}}} \quad (3.10)$$

com $m = 0, 1, 2, \dots$. Assim encontramos,

$$f_{0p} = \bar{N}_p \left[\bar{A}_{ap} a_p + \bar{A}_{bp} b_p + \sum_m \left(\bar{A}_{amp} a_{mp} + \bar{A}_{bmp} b_{mp} \right) \right]. \quad (3.11)$$

Definindo

$$\begin{aligned} \alpha_p &= \bar{N}_p \bar{A}_{ap} \\ \beta_p &= \bar{N}_p \bar{A}_{bp} \\ \alpha_{mp} &= \bar{N}_p \bar{A}_{amp} \\ \beta_{mp} &= \bar{N}_p \bar{A}_{bmp} \end{aligned} \quad (3.12)$$

onde \bar{N}_p é a normalização na base discreta, dada por

$$\bar{N}_p^2 = \left[\bar{A}_{ap}^2 + \bar{A}_{bp}^2 + \sum_{m=0}^{\infty} \left(\bar{A}_{amp}^2 + \bar{A}_{bmp}^2 \right) \right]^{-1} \quad (3.13)$$

obtemos que

$$f_{0p} = (\alpha_p a_p + \beta_p b_p) + \sum_{m=0}^{\infty} (\alpha_{mp} a_{mp} + \beta_{mp} b_{mp}). \quad (3.14)$$

Em trabalhos anteriores^{[13]-[17]} o operador f_{0p} não mantinha a assimetria natural do modelo, pois, $\alpha_{mp} = \beta_{mp}$. Isto se deve ao fato de usar a aproximação *ECC*, discutida no último parágrafo do capítulo anterior; já no nosso trabalho, o operador f_{0p} mantém esta assimetria.

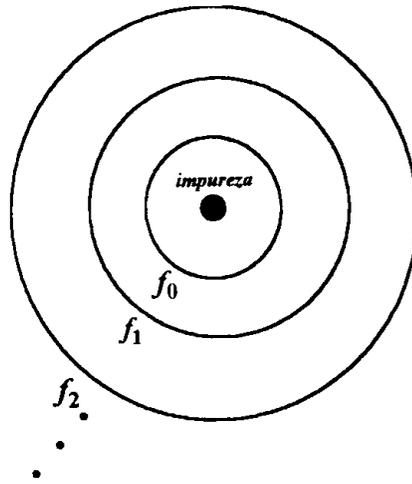


Figura 3-3: Representação das funções de onda dos f_n em torno da impureza.

3.2 Tridiagonalização

A base formada por esses operadores não é apropriada para diagonalizar o Hamiltoniano, pois, todos os operadores se acoplam com a impureza. Define-se assim, através de uma transformação unitária do conjunto de operadores a_{mp} e b_{mp} , uma nova base de operadores fermiônicos $f_{n,p}$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) de tal forma que cada operador acopla somente com seus vizinhos mais próximos ($f_{n-1,p}$ e $f_{n+1,p}$). Mais ainda, exige-se que apenas o operador f_{0p} se acople com a impureza. Os operadores $f_{n,p}$ criam funções de onda esféricas centradas em torno da impureza, como ilustrado na Figura (3-3).

É fácil mostrar que um modelo com simetria partícula-buraco não tem termos diagonais; para manter a assimetria em nosso tratamento, escrevemos a banda de condução na forma tridiagonal

$$H_{BC} = \sum_{n=0,p}^{\infty} \left[\eta_{np} f_{np}^{\dagger} f_{np} + t_{np} (f_{np}^{\dagger} f_{(n+1)p} + h.c.) \right]. \quad (3.15)$$

O procedimento de tridiagonalização é a parte central do método do grupo de renormalização

numérico. Na tridiagonalização tradicional da banda de condução o cálculo dos coeficientes é feito analiticamente^[3] para $z = 1$ e para $z \neq 1$ faz-se necessário um cálculo algébrico complicado à medida que n aumenta (ver ref[5]). No procedimento alternativo, desenvolvido por Lima^[22] e detalhadamente descrito no Apêndice A, o cálculo dos coeficientes não envolve processos recursivos e suas expressões são bem simples.

Utilizando esse procedimento para tridiagonalização da banda de condução encontramos as seguintes expressões para os coeficientes diagonais e codiagonais, respectivamente

$$\eta_{np} = \frac{\tilde{\Delta}_{(n+1)p}}{\Delta_{(n+1)p}} - \frac{\tilde{\Delta}_{np}}{\Delta_{np}} \quad (3.16)$$

e

$$t_{np} = \frac{\sqrt{\Delta_{(n+2)p}\Delta_{np}}}{\Delta_{(n+1)p}}, \quad (3.17)$$

onde Δ_{np} e $\tilde{\Delta}_{np}$ são determinantes dados por

$$\Delta_{np} = \det \begin{bmatrix} \phi_{0p} & \cdots & \phi_{(n-2)p} & \phi_{(n-1)p} \\ \phi_{1p} & \cdots & \phi_{(n-1)p} & \phi_{np} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_{(n-1)p} & \cdots & \phi_{(2n-3)p} & \phi_{(2n-2)p} \end{bmatrix} \quad (3.18)$$

e

$$\tilde{\Delta}_{np} = \det \begin{bmatrix} \phi_{0p} & \cdots & \phi_{(n-2)p} & \phi_{np} \\ \phi_{1p} & \cdots & \phi_{(n-1)p} & \phi_{(n+1)p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_{(n-1)p} & \cdots & \phi_{(2n-3)p} & \phi_{(2n-1)p} \end{bmatrix}. \quad (3.19)$$

sendo que os momentos ϕ_{np} dependem somente dos coeficientes de H_{BCp} e f_{0p} , projetados na base discreta e dados por

$$\phi_{np} = E_p^n [\alpha_{mp}^2 + (-1)^n \beta_{mp}^2] + \sum_m E_{mp}^n [\alpha_{mp}^2 + (-1)^n \beta_{mp}^2]. \quad (3.20)$$

Desta forma determinamos todos os coeficientes diagonais e codiagonais a exceção de η_{0p} , que é dado por

$$\eta_{0p} = \phi_{1p}$$

No cálculo numérico dos coeficientes utilizamos rotinas do software MAPLE, que permite trabalhar com um número de casas decimais arbitrário. Para o cálculo os passos são: (i) calcula-se E_{mp} , α_{mp} e β_{mp} dados pelas Eqs.(3.5) e (3.12), (ii) calcula-se em seguida os momentos ϕ_{np} dados pela Eq.(3.20) e os determinantes Δ_N e $\tilde{\Delta}_N$, Eqs.(3.18) e (3.19) respectivamente, e (iii) finalmente os coeficientes η_{np} e t_{np} dados pelas Eqs.(3.16) e (3.17). O cálculo só é estável para um determinado valor de n que depende do número de casas decimais utilizadas. No caso de duzentos algarismos significativos temos $n = 9$. Acima deste valor utilizamos os valores assintóticos

$$t_{np} = \Lambda^{(1-z_p)-n/2} \quad (3.21)$$

e

$$\eta_{np} = \Lambda^{-n/2}. \quad (3.22)$$

que são encontrados por inspeção dos já calculados.

Convém observar que os coeficientes codiagonais apresentam o mesmo comportamento assintótico que os da tridiagonalização tradicional desenvolvida por Wilson. Já os coeficientes diagonais η_n decrescem muito rapidamente em comparação aos codiagonais. Para $n > N_M$ pode-se considerar $\eta_n = 0$.

Um ponto interessante, e que deve ser ressaltado, é que na tridiagonalização tradicional os termos diagonais são zero. Para o caso assimétrico, conforme explicado acima, os coeficientes diagonais não são zero. Isso mostra que a assimetria introduz um operador, com primeiro termo diagonal $\eta_0 f_0^\dagger f_0$, que é marginal [21].

onde

$$\tilde{V} = \frac{2}{(1 + \Lambda^{-1})D} \Lambda^{z_p-1} V$$

$$\tilde{\varepsilon}_d = \frac{2}{(1 + \Lambda^{-1})D} \Lambda^{z_p-1} \varepsilon_d.$$

e a soma em μ é subentendida.

O Hamiltoniano acima é bem semelhante ao Hamiltoniano de um nível ressonante, não apresentando desta forma dificuldades na sua diagonalização.

3.4 Cálculo analítico da densidade espectral

Nesta seção calculamos analiticamente a densidade espectral para o modelo descrito pela Eq.(3.24) e mostramos que sua forma é a mesma que a da expressão deduzida por Langreth, Eq.(1.1). Antes de dar início ao cálculo, podemos adiantar que o caso de duas impurezas difere de de uma impureza basicamente pela existência de canais par e ímpar. Assim, embora o cálculo aqui feito seja muito semelhante ao de uma impureza, ele conduz a resultados significativamente distintos daquele caso mais simples.

A densidade espectral $\rho_d(\varepsilon, z)$, é definida por^{[19],[5]}

$$\rho_d(\varepsilon, z) = \begin{cases} \sum_F |\langle F | d_p | \Omega \rangle|^2 \delta(E_f^z - E_\Omega^z - \varepsilon) & \text{se } \varepsilon > 0 \\ \sum_F |\langle F | d_p^\dagger | \Omega \rangle|^2 \delta(E_f^z - E_\Omega^z + \varepsilon) & \text{se } \varepsilon < 0 \end{cases}, \quad (3.25)$$

onde $|\Omega\rangle$ é o estado fundamental caracterizado por $a_{j+}^\dagger |\Omega\rangle = 0$, se $\varepsilon < 0$ e $a_{j-} |\Omega\rangle = 0$, se $\varepsilon > 0$, sendo a o operador de destruição de partículas. Os estados $|F\rangle$ são definidos como

$$|F\rangle = \begin{cases} a_{j+}^\dagger |\Omega\rangle & \text{se } \varepsilon > 0 \\ a_{j-} |\Omega\rangle & \text{se } \varepsilon < 0 \end{cases}. \quad (3.26)$$

Os operadores $a_{j\pm}$ se relacionam com os operadores fermiônicos da base discretizada por^[19]

$$a_{jp} = u_{jp}d_p + \sum_{n=0}^{N-1} u_{jnp}f_{np}. \quad (3.27)$$

Utilizando a definição (3.26), para $\varepsilon > 0$, e a expressão (3.27) o elemento de matriz em (3.25) resulta

$$\begin{aligned} \langle F | d_p | \Omega \rangle &= \langle \Omega | a_{j+} d_p | \Omega \rangle \\ \langle F | d_p | \Omega \rangle &= \langle \Omega | \left[u_{j+} d_+ + \sum_{n=0}^{N-1} u_{jn+} f_{n+} \right] d_p | \Omega \rangle. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Como $\{d_p, d_p^\dagger\} = 1$ e $\{d_p, f_{np}\} = 0$, temos

$$\langle F | d_p | \Omega \rangle = u_{j+} \quad \text{se } \varepsilon > 0. \quad (3.29)$$

Analogamente obtemos

$$\langle F | d_p^\dagger | \Omega \rangle = u_{j-} \quad \text{se } \varepsilon < 0.$$

Assim de uma maneira geral temos^[5]

$$\rho_d(\varepsilon, z) = \sum_j u_{jp}^2 \delta(\varepsilon - E_{jp}), \quad (3.30)$$

onde E_{jp} é a energia real envolvida no processo.

A densidade espectral é calculada realizando-se a integração sobre z

$$\rho_{dp}(\varepsilon) = \int_0^1 \rho_d(\varepsilon, z) dz.$$

Portanto, da Eq.(3.30) encontramos

$$\rho_{dp}(\varepsilon) = \int_0^1 \sum_j u_{jp}^2 \delta(\varepsilon - E_{jp}) dz. \quad (3.31)$$

A Eq.(3.31) é facilmente determinada, resultando

$$\rho_{dp}(\varepsilon) = \frac{u_{jp}^2}{|dE_{jp}/dz|} \Big|_{E_{j\pm}=\varepsilon}. \quad (3.32)$$

Resta-nos encontrar o elemento de matriz u_{jp} e calcular a derivada $\frac{dE_{jp}}{dz}$. Primeiramente calculamos o elemento da matriz u_{jp} .

Da diagonalização (apêndice B), Eq.(B.19), sabemos que

$$\begin{aligned} u_{-\ell jp} &= \frac{\beta_{-\ell p}^{*-}}{(\lambda_{jp} - \eta_{-\ell p}^*)} u_{0jp} \\ u_{\ell jp} &= \frac{\beta_{\ell p}^{*+}}{(\lambda_{jp} - \eta_{\ell p}^*)} u_{0jp}, \end{aligned} \quad (3.33)$$

com: $\ell \neq 0$, $\beta_{-\ell p}^{*-}$ e $\beta_{\ell p}^{*+}$ dados pelas Eqs.(B.21) e (B.22) respectivamente.

Como a matriz (\mathbf{u}) é normalizada, somando para todo ℓ temos

$$1 - u_{jp}^2 = u_{jp}^2 \Lambda^{(N-1)/2} \frac{\tilde{\Gamma}}{N_p^2} Y(\lambda_{jp}), \quad (3.34)$$

com

$$Y(\lambda_{jp}) = \sum_{\ell=1}^{(N+1)/2} \left[\frac{\alpha_{0\ell p}^{*-2}}{(\lambda_{jp} + \eta_{\ell p}^*)^2} + \frac{\alpha_{0\ell p}^{*+2}}{(\lambda_{jp} - \eta_{\ell p}^*)^2} \right]. \quad (3.35)$$

Comparando a expressão acima com a Eq.(B.21) vemos que

$$Y(\lambda_{jp}) = -X'(\lambda_{jp}). \quad (3.36)$$

Desta forma encontramos

$$Y(\lambda_{jp}) = \frac{\pi^2 \alpha_{0p}^2(k_F)}{(\ln \Lambda)^2 \lambda_{jp}} \left(\frac{1 - \Lambda^{-1}}{2} \right) \csc^2(\pi \gamma_{jp}), \quad (3.37)$$

que substituída na Eq.(3.34) resulta em

$$u_{jp}^2 = \frac{\lambda_{jp} (\ln \Lambda)^2}{\lambda_{jp} (\ln \Lambda)^2 + \Lambda^{(N-1)/2} \tilde{\Gamma} \pi^2 A_p^2 (1 - \Lambda^{-1}) \csc^2(\pi \gamma_{jp})}. \quad (3.38)$$

Escrevendo a Eq.(A.4) em uma forma mais conveniente, obtemos

$$u_{jp} = \frac{\sin(\pi \gamma_{jp})}{[\sin^2(\pi \gamma_{jp}) + \pi \bar{\Gamma}_p / E_{jp} (\ln \Lambda)]^{1/2}}. \quad (3.39)$$

Agora resta-nos calcular a derivada da Eq.(3.32). Sabemos que

$$E_{jp} = \pm \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} D \Lambda^{-\frac{(N-1)}{2} - 1 + z_p} \Lambda^{j-1 + \gamma_{jp}} \quad (3.40)$$

e

$$\gamma_{jp} = \frac{1}{\pi} \arctan \left[\frac{\bar{\Gamma}_p}{(\varepsilon_d - E_{jp}) \pm \bar{\Gamma}_p \cot(\pi \gamma_{0p})} \right].$$

obtemos que

$$\frac{dE_{jp}}{dz} = \frac{\pi \bar{\Gamma}_p}{\sin^2(\pi \gamma_{jp}) + \pi \bar{\Gamma}_p / E_{jp} (\ln \Lambda)}. \quad (3.41)$$

Desta maneira estamos em condições de resolver a Eq.(3.32). Substituindo (3.39) e (3.41) em (3.32) encontramos a expressão para a densidade espectral

$$\rho_{dp}(\varepsilon) = \frac{1}{\pi \bar{\Gamma}_p} \sin^2(\pi \gamma_{jp}), \quad (3.42)$$

como $\bar{\Gamma}_p = \Gamma_p / A_\Lambda$, onde $A_\Lambda = \frac{1 + \Lambda^{-1}}{1 - \Lambda^{-1}} \frac{\ln \Lambda}{2}$, que converge rapidamente para a unidade quando

$\Lambda \rightarrow 1$. Em particular, no limite

$$\rho_{dp}(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_p}{(\varepsilon_{dp}^* - \varepsilon)^2 + \Gamma_p^2}, \quad (3.43)$$

ou

$$\rho_{dp}(\varepsilon) = \frac{1}{\pi\Gamma_p} \sin^2(\pi\gamma_{jp}). \quad (3.44)$$

onde

$$\varepsilon_{dp}^* = \varepsilon_d \pm \Gamma_p \cot(\pi\gamma_{0p}). \quad (3.45)$$

A equação acima é uma extensão da equação de Langreth para o caso de duas impurezas.

A densidade espectral para o caso de uma impureza foi obtida e analisada por Yoshida *et al*^[5]. A diferença aqui, como mencionamos anteriormente, é a existência de canais par e ímpar, e a dependência que as defasagens γ_{jp} tem com a energia.

Em particular observamos da Eq.(B.48) que a energia do nível ressonante é corrigida por uma constante que depende da paridade

$$\varepsilon_d \longrightarrow \varepsilon_d \pm \Gamma_p \cot(\pi\gamma_{0p}). \quad (3.46)$$

Assim, por exemplo, mesmo quando $\varepsilon_d = 0$, as defasagens na banda de condução são assimétricas em relação ao nível de Fermi. Esse reflexo da assimetria partícula-buraco, característica do modelo de duas impurezas, afeta marcadamente densidades espectrais calculadas no Capítulo V.

Capítulo 4

Análise de pontos fixos

Uma propriedade característica da banda de condução é a invariância dos níveis de energias por transformação de escalas. Esses níveis invariantes definem os pontos fixos na transformação do Grupo de Renormalização. Dessa forma vamos primeiramente introduzir o conceito de ponto fixo. Uma transformação de grupo de renormalização é definida por

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

Aplicando-se T sobre H_N obtém-se os autovalores e os elementos de matriz de f_{n+1} de H_{N+1} . Essa operação preserva a invariância de escala de energia do Hamiltoniano H_N . A transformação T não tem pontos fixos, assim consideramos a aplicação de T duas vezes consecutivas que continua sendo uma transformação do Grupo de Renormalização e leva H_N para H_{N+2} . Sendo assim, um Hamiltoniano H^* que permanece invariante sob a aplicação de T^2 é um *ponto fixo* da transformação, ou seja,

$$T^2[H^*] = H^*.$$

4.1 Ponto fixo de elétrons livres

Consideremos o ponto fixo mais simples dado somente pela banda de condução, ou seja, fazemos $\varepsilon_d = 0$ e $\Gamma = 0$ no Hamiltoniano da Eq.(3.24). Assim

$$H_{BCp} = \Lambda^{(N-1)/2} \sum_{n=0}^{N-1} \left[t_{np} (f_{np}^\dagger f_{(n+1)p} + h.c.) + \eta_{np} f_{np}^\dagger f_{np} \right], \quad (4.1)$$

com t_{np} e η_{np} dados pelas Eqs.(A.37) e (A.43) respectivamente.

O Hamiltoniano de elétrons livres acima é quadrático e pode ser escrito na forma matricial

$$H_{BCp} = \mathcal{F}_{np}^\dagger [\mathcal{H}_{BC}]_{np} \mathcal{F}_{np},$$

onde \mathcal{F}_{np} é o vetor $(f_{0p}, f_{1p}, \dots, f_{Np})$ e \mathcal{H}_{BC} é uma matriz de dimensão $(N+1) \times (N+1)$, cujos elementos de matriz não nulos são da forma,

$$[\mathcal{H}_{BC}]_{n,n} = \Lambda^{(N-1)/2} \eta_{np} \quad n = 0, 1, \dots, N.$$

$$[\mathcal{H}_{BC}]_{n+1,n} = [\mathcal{H}_{BC}]_{n,n+1} = \Lambda^{(N-1)/2} t_{np}. \quad n = 0, 1, \dots, N-1.$$

e por uma transformação de similaridade, $\widetilde{\mathbf{M}} \mathcal{H}_{BC} \mathbf{M} = \eta^*$, pode ser diagonalizado exatamente. A matriz \mathbf{M} e os autovalores η^* são calculados numericamente. Os resultados da diagonalização estão nas Tabelas (4.1) e (4.2) para energias positivas, iterações pares e ímpares e canal ímpar, ou seja, só uma das banda é representada. Vemos que os valores convergem rapidamente para um ponto fixo à medida que o número de iterações N aumenta. Da diagonalização numérica encontra-se que $(N+1)/2$ de seus autovalores são positivos e $(N+1)/2$ são negativos. Os autovalores para N par, denotados por $\pm \hat{\eta}_{jp}^*$, e os autovalores para N ímpar, denotados por \pm

N	$\hat{\eta}_{0o}^*$	$\hat{\eta}_{1o}^*$	$\hat{\eta}_{2o}^*$	$\hat{\eta}_{3o}^*$	$\hat{\eta}_{4o}^*$	$\hat{\eta}_{5o}^*$	$\hat{\eta}_{6o}^*$	$\hat{\eta}_{7o}^*$	$\hat{\eta}_{8o}^*$
4	0.000	3.1607	31.6228						
6	0.000	3.1607	31.6228	316.228					
8	0.000	3.1607	31.6228	316.228	3162.28				
10	0.000	3.1607	31.6228	316.228	3162.28	31622.8			
12	0.000	3.1607	31.6229	316.229	316.228	3162.28	31622.8	316228	
14	0.000	3.1607	31.6229	316.229	316.229	3162.28	31622.8	316228	3162280

Tabela 4.1: Autovalores da diagonalização da banda de condução para N par com $\Lambda = 10$ e $z = 1$. Apenas uma das bandas (ímpar) está representada. Observa-se uma rápida convergência para o ponto fixo à medida que aumentamos o valor de N .

η_{jp}^* são muito próximos, respectivamente, aos limites

$$\hat{\eta}_{jp}^* = \Lambda^{j-z_p+1/2} \quad \text{onde } j = 1, 2, \dots, (N/2) \text{ e } \hat{\eta}_{0p}^* = 0 \quad (4.2)$$

e

$$\eta_{jp}^* = \Lambda^{j-z_p} \quad \text{com } j = 1, 2, \dots, (N+1)/2. \quad (4.3)$$

Interpretando esses resultados, lembramos que na discretização logarítmica da banda de condução, explicado na Seção(3.1), consideramos os níveis de energias dispostos simetricamente em relação ao nível de Fermi, no truncamento foram desconsideradas energias menores que $\frac{D(1+\Lambda^{-1})}{2} \Lambda^{(1-z_p)-\frac{N-1}{2}}$ ou em termos da escala reduzida, energias menores que a unidade. Desta forma a menor e a maior escala de energia são: $-\Lambda^{\frac{N-1}{2}+z_p-1}$ e $\Lambda^{\frac{N-1}{2}+z_p-1}$. Distribuindo logaritmicamente os níveis entre estes dois limites encontramos, para N ímpar

$$-\Lambda^{\frac{N-1}{2}+1-z_p}, -\Lambda^{\frac{N-3}{2}+1-z_p}, \dots, -\Lambda, -\Lambda^{1-z_p}, \Lambda^{1-z_p}, \Lambda, \dots, -\Lambda^{\frac{N-3}{2}+1-z_p}, -\Lambda^{\frac{N-1}{2}+1-z_p},$$

e para N par

$$-\Lambda^{\frac{N-1}{2}+1-z_p}, -\Lambda^{\frac{N-3}{2}+1-z_p}, \dots, -\Lambda^{z_p-1/2}, \Lambda^{z_p-1/2}, \dots, -\Lambda^{\frac{N-3}{2}+1-z_p}, -\Lambda^{\frac{N-1}{2}+1-z_p},$$

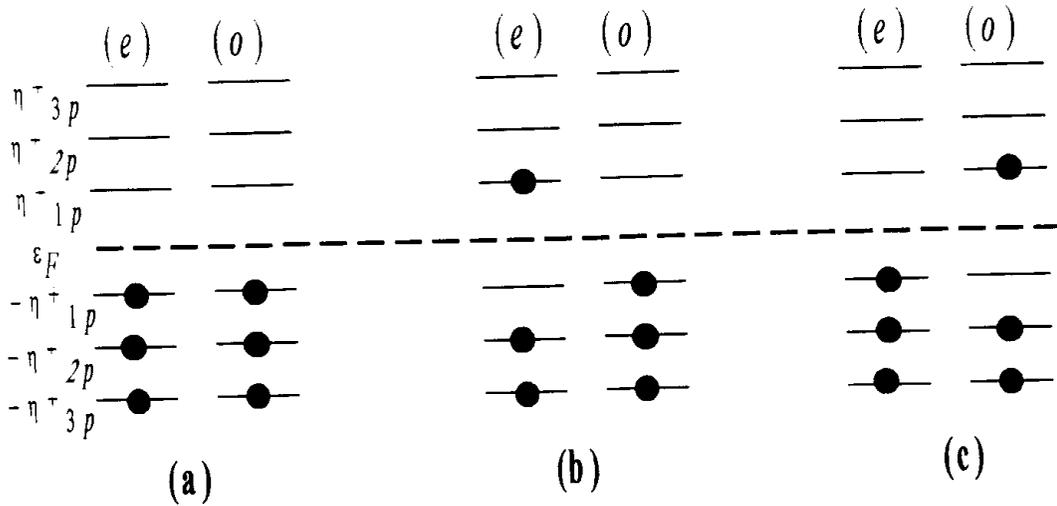


Figura 4-1: Estados de muitos corpos para iteração $N = 5$. Temos em (a) o estado fundamental e em (b) e (c) estados excitados a partir do estado fundamental; ε_F é zero e é acessível apenas para iterações pares.

que estão de acordo com as Eq.(4.2) e (4.3) e com os resultados numéricos.

Na diagonalização numérica do Hamiltoniano quadrático da Eq.(4.1) encontramos os níveis acessíveis para uma dada iteração, assim podemos construir estados de muitos corpos preenchendo os níveis de energia como os que estão, por exemplo, na Tabela(4.2). Ilustramos isto na Figura (4-1). O estado fundamental corresponde a ocupar todos as energias negativas e os estados excitados são as transições de elétrons a partir desta configuração.

Escrevendo o Hamiltoniano de condução em termos da base dos operadores que diagonalizam \mathcal{H}_{BC} temos para N ímpar

$$H_{BCp} = \sum_{j=1}^{(N+1)/2} \eta_{jp}^* (g_{jp}^\dagger g_{jp} + h_{jp}^\dagger h_{jp}). \quad (4.4)$$

N	$\hat{\eta}_{1o}^*$	$\hat{\eta}_{2o}^*$	$\hat{\eta}_{3o}^*$	$\hat{\eta}_{4o}^*$	$\hat{\eta}_{5o}^*$	$\hat{\eta}_{6o}^*$	$\hat{\eta}_{7o}^*$	$\hat{\eta}_{8o}^*$	$\hat{\eta}_{9o}^*$
3	0.947	10							
5	0.948	10	100						
9	0.948	10	100	1000	10000				
11	0.948	10	100	1000	10000	100000			
13	0.948	10	100	1000	10000	100000	100000	1.00×10^6	
15	0.948	10	100	1000	10000	100000	100000	1.00×10^6	1.00×10^7
17	0.948	10	100	1000	10000	100000	100000	1.00×10^6	1.00×10^7

Tabela 4.2: Autovalores da diagonalização da banda de condução para N ímpar com $\Lambda = 10$ e $z = 1$. Apenas uma das banda(ímpar) está representada. Observa-se uma rápida convergência para o ponto fixo à medida que aumentamos o valor de N .

O operador f_{op} escrito nessa base é da forma

$$f_{op} = \Lambda^{(N-1)/4} \sum_{j=1}^{(N+1)/2} (\alpha_{0jp}^{*+} g_{jp} + \alpha_{0jp}^{*-} h_{jp}^\dagger), \quad (4.5)$$

para $j \gg 1$, os coeficientes são dados pelas Eqs.(B.7) e (B.8). e para $j \approx 1$ dados pela Eqs.(2.47). Para N par teremos uma situação semelhante e os resultados são os seguintes

$$H_{BCp} = \sum_{j=1}^{(N+1)/2} \hat{\eta}_{jp}^* (g_{jp}^\dagger g_{jp} + h_{jp}^\dagger h_{jp}) + \hat{\eta}_{0p}^* g_{0p}^\dagger g_{0p}, \quad (4.6)$$

$$f_{op} = \Lambda^{(N-1)/4} \sum_{j=1}^{(N+1)/2} (\hat{\alpha}_{0jp}^{*+} g_{jp} + \hat{\alpha}_{0jp}^{*-} h_{jp}^\dagger) + \hat{\alpha}_{00p}^{*+} g_{0p}$$

Para N grande, teremos

$$\hat{\alpha}_{0jp}^{*+} = N_p \frac{\int_{\Lambda^{-\frac{N-1}{2}+j-z_p-1/2}}^{\Lambda^{-\frac{N-1}{2}+j-z_p+1/2}} A_p(\varepsilon) d\varepsilon}{(1-\Lambda^{-1})^{-1/2} \Lambda^{-\frac{N-1}{4}+\frac{j-z_p+1/2}{2}}} \quad (4.7)$$

e

$$\hat{\alpha}_{0jp}^{*-} = N_p \frac{\int_{-\Lambda^{-\frac{N-1}{2}+j-z_p+1/2}}^{-\Lambda^{-\frac{N-1}{2}+j-z_p-1/2}} A_p(\varepsilon) d\varepsilon}{(1-\Lambda^{-1})^{-1/2} \Lambda^{-\frac{N-1}{4}+\frac{j-z_p+1/2}{2}}}$$

com valores assintóticos

$$\hat{\alpha}_{0jp}^{**} = \alpha_{0p}(k_F) \left(\frac{1 - \Lambda^{-1}}{2} \right)^{1/2} \Lambda^{(j-z_p+\frac{1}{2})/2} \quad (4.8)$$

$$\hat{\alpha}_{0jp}^{*-} = \alpha_{0p}(k_F) \left(\frac{1 - \Lambda^{-1}}{2} \right)^{1/2} \Lambda^{(j-z_p+\frac{1}{2})/2}, \quad (4.9)$$

onde $\alpha_{0p}(k_F)$ é mesmo do N ímpar dado pela expressão (B.11) . Na próxima seção analisaremos o ponto fixo de nível ressonante.

4.2 Nível Ressonante

O Hamiltoniano do nível ressonante é

$$H_{NRp} = \Lambda^{(N-1)/2} \left\{ \sum_{n=0}^{N-1} \left[\eta_{np} f_{np}^\dagger f_{np} + t_{np} (f_{np}^\dagger f_{(n+1)p} + h.c.) \right] + \tilde{\varepsilon}_{dp} a_p^\dagger d_p + \frac{\tilde{V}_p}{N_p} (f_{0p}^\dagger d_p + h.c.) \right\}. \quad (4.10)$$

Conforme discutido no Apêndice B, podemos escrever este Hamiltoniano como um produto de matrizes,

$$H_{NRp} = \mathcal{F}_{Np}^\dagger [\mathcal{H}_{NRp}] \mathcal{F}_{Np} \quad (4.11)$$

onde \mathcal{F}_{Np} é dado pela Eq.(B.3) e \mathcal{H}_{NRp} é a matriz hermitiana tridiagonal de ordem $N + 2$. Os resultados numéricos da diagonalização são mostrados nas Tabelas(4.3), (4.4) e (4.5), onde os parâmetros de discretização usados foram $\Lambda = 10$ e $z = 1$. Obtém-se também para cada N par um conjunto de $N/2$ autovalores positivos e $N/2$ autovalores negativos. Para N ímpar um conjunto de $(N + 1)/2$ autovalores positivos e $(N + 1)/2$ autovalores negativos. A análise desses resultados mostra-nos que cada Hamiltoniano (par e ímpar) vai para pontos fixos diferentes, isto é uma consequência imediata de não desprezarmos a dependência energética no acoplamento

N	$\hat{\eta}_{1e}^*$	$\hat{\eta}_{2e}^*$	$\hat{\eta}_{3e}^*$	$\hat{\eta}_{4e}^*$	$\hat{\eta}_{5e}^*$	$\hat{\eta}_{6e}^*$	$\hat{\eta}_{7e}^*$	$\hat{\eta}_{8e}^*$	$\hat{\eta}_{9e}^*$
8	1.499	13.477	69.1566	357.45	3198.2				
10	1.518	15.174	134.774	691.56	3574.6	31982.1			
12	1.520	15.360	151.744	1347.7	6915.6	35745.8	319821		
14	1.520	15.379	153.607	1517.4	13477	69156.6	357458	319821	
16	1.520	15.382	153.795	1536.07	15174	134774	691566	357458	319821
18	1.520	15.382	153.814	1537.95	15360	151744	134774	691566	...
20	1.520	15.382	153.815	1538.14	15379	153607	151744	134774	...
22	1.520	15.382	153.816	1538.15	15381	153795	153607	151744	...
26	1.520	15.382	153.816	1538.16	15381	153815	153814	153795	...
28	1.520	15.382	153.816	1538.16	15381	153816	153815	153814	...

Tabela 4.3: Autovalores do Hamiltoniano de nível ressonante para N par e canal par

A_p (ver Eq.(2.23)), ou seja, $A_p(\varepsilon) \neq A_p(\varepsilon_F)$. Desta forma, ao contrário de estudos anteriores o modelo possui uma assimetria natural. No Apêndice B demonstra-se analiticamente, Eq(B.48), que os autovalores para N ímpar são dados aproximadamente pela expressão

$$\eta_{jp}^{\pm} = \Lambda^{j-z_p \pm \gamma_{jp}} \quad (4.12)$$

e para N par por

$$\hat{\eta}_{jp} = \Lambda^{j-z_p + \frac{1}{2} \pm \gamma_{jp}} \quad (4.13)$$

onde

$$\gamma_{jp} = \frac{1}{\pi} \arctan \left[\frac{\bar{\Gamma}_p}{(E_{jp} - \varepsilon_d) \pm \bar{\Gamma}_p \cot(\pi\gamma_{0p})} \right]. \quad (4.14)$$

Devido a conservação da paridade, podemos separar o Hamiltoniano da Eq.(4.2) em canal par e ímpar, com isso, o único “vínculo” entre eles, Eq.(2.23), é o acoplamento $A_p(\varepsilon)$. Quando $R = \infty$, $A_e = A_o$. De acordo com a equação $\Gamma_p = \left(1 \pm \frac{\sin(k_F R)}{k_F R}\right) \Gamma$, temos que à medida que aproximamos as impurezas, A_e e A_o quebram a degenerescência entre os canais par e ímpar da banda, aumentando Γ_e e diminuindo Γ_o . Já no caso extremo em que as impurezas estão no

N	$\hat{\eta}_{1o}^*$	$\hat{\eta}_{2o}^*$	$\hat{\eta}_{3o}^*$	$\hat{\eta}_{4o}^*$	$\hat{\eta}_{5o}^*$	$\hat{\eta}_{6o}^*$	$\hat{\eta}_{7o}^*$	$\hat{\eta}_{8o}^*$	$\hat{\eta}_{9o}^*$
4	0.341	3.539	32.101						
6	0.476	4.817	35.399	321.013					
8	0.503	6.010	48.171	353.987	3210				
10	0.506	6.265	60.103	481.708	3540	32101			
12	0.507	6.294	62.651	601.026	4817	35399	321013		
14	0.507	6.297	62.938	626.510	6010	48171	353987	3.210×10^6	
16	0.507	6.297	62.967	629.381	6265	60103	481708	3.540×10^6	3.210×10^6
18	0.507	6.297	62.970	629.672	6294	62651	601026	4.817×10^6	...
20	0.507	6.297	62.970	629.701	6295	62938	626510	6.010×10^6	...
22	0.507	6.297	62.970	629.704	6297	62967	629381	6.265×10^6	...
26	0.507	6.297	62.970	629.704	6297	62970	629701	6.297×10^6	...
28	0.507	6.297	62.970	629.704	6297	62970	629704	6.30×10^6	...

Tabela 4.4: Autovalores do Hamiltoniano de nível ressonante para N par e canal ímpar

N	$\hat{\eta}_{0o}^*$	$\hat{\eta}_{1o}^*$	$\hat{\eta}_{2o}^*$	$\hat{\eta}_{3o}^*$	$\hat{\eta}_{4o}^*$	$\hat{\eta}_{5o}^*$	$\hat{\eta}_{6o}^*$	$\hat{\eta}_{7o}^*$	$\hat{\eta}_{8o}^*$
3	-0.097	1.085	10.151						
5	-0.272	1.508	11.194	101.51					
7	-0.322	1.891	15.233	111.94	1015.1				
9	-0.328	1.973	19.006	152.33	1119.4	10151			
11	-0.328	1.982	19.812	190.06	1523.3	11194	101513		
15	-0.329	1.983	19.912	199.13	1981.2	19006	152329	1.119×10^6	1.015×10^6
17	-0.329	1.983	19.913	199.13	1990.3	19812	190061	1.523×10^6	...
21	-0.329	1.983	19.913	199.13	1991.3	19903	198120	1.901×10^6	...
23	-0.329	1.983	19.913	199.13	1991.3	19913	199120	1.990×10^6	...
25	-0.329	1.983	19.913	199.13	1991.3	19913	199129	1.991×10^6	...
27	-0.329	1.983	19.913	199.13	1991.3	19913	199130	1.991×10^6	...
29	-0.329	1.983	19.913	199.13	1991.3	19913	199130	1.991×10^6	...

Tabela 4.5: Autovalores do Hamiltoniano de nível ressonante para N ímpar e canal ímpar.

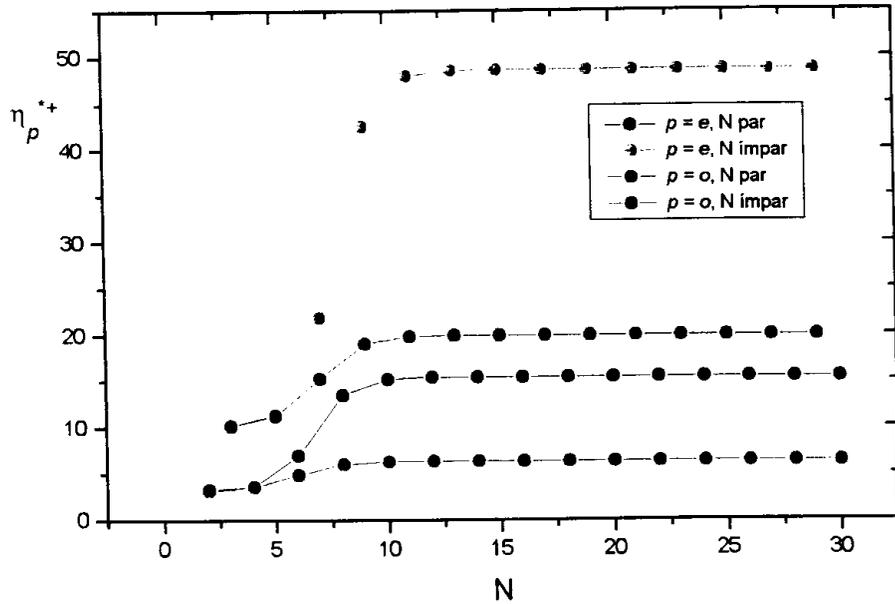


Figura 4-2: Diagrama do Fluxo do Modelo do nível ressonante mostrando a evolução de um autovalor η_{2p}^{*+} para N par e ímpar e canal par e um autovalor $\hat{\eta}_{2p}^{*+}$ para N par e ímpar e canal ímpar. O *crossover* ocorre na mesma faixa do número de iteração N para cada paridade da impureza. Vê-se claramente que para cada canal temos pontos fixos diferentes, devido a assimetria natural do modelo.

mesmo ponto, $R = 0$, temos $A_e = 1$ e $A_o = 0$, mostrando um comportamento de banda livre para o Hamiltoniano do canal ímpar.

Na Figura (4-2), podemos ver que as impurezas quebram a invariância por mudança de escala de energia, ou seja, H_{NR} não é um ponto fixo de T^2 . Vemos na figura duas regiões distintas, separadas por uma região de *crossover*. Para $N > 10$ as impurezas estão fortemente acopladas a banda de condução. No caso em que $R = 0$, H_o permanece indefinidamente com os pontos fixos da banda de condução.

Capítulo 5

Resultados e Conclusões

Este capítulo apresenta os resultados numéricos do cálculo da densidade.

Para se obter esses espectros foi necessário fazer algumas modificações no Hamiltoniano do modelo, pois na forma original, Eq.(2.5), conduz a resultados lentamente convergentes para o limite do contínuo, $\Lambda \rightarrow 1$. O GRN propõe uma discretização logarítmica da banda, permitindo que trunquemos o Hamiltoniano sem afetar diretamente o acoplamento com as impurezas. Feita a correção, primeiramente diagonalizamos o Hamiltoniano da Eq.(3.24). Em seguida, pela expressão

$$\rho_{dp}(\varepsilon) = \frac{u_{jp}^2}{|dE_{jp}/dz|} \Big|_{E_{jp}=\varepsilon}, \quad (5.1)$$

onde u_{jp} é a projeção do autovetor sobre o operador d_p da impureza, calculamos numericamente a densidade espectral.

Conforme visto no Apêndice B, as defasagens na banda de condução, devidas ao acoplamento com as impurezas, obedecem a uma equação simples, Eq.(B.48). Infelizmente, cálculos numéricos conduzidos com valores realistas para o parâmetro Λ mostram que a constante γ_{0p} no lado direito daquela equação varia em função de z . Embora pequena, como podemos observar para γ_{0e} na Figura (5-1), essa variação afeta a precisão do cálculo, introduzindo erros da ordem

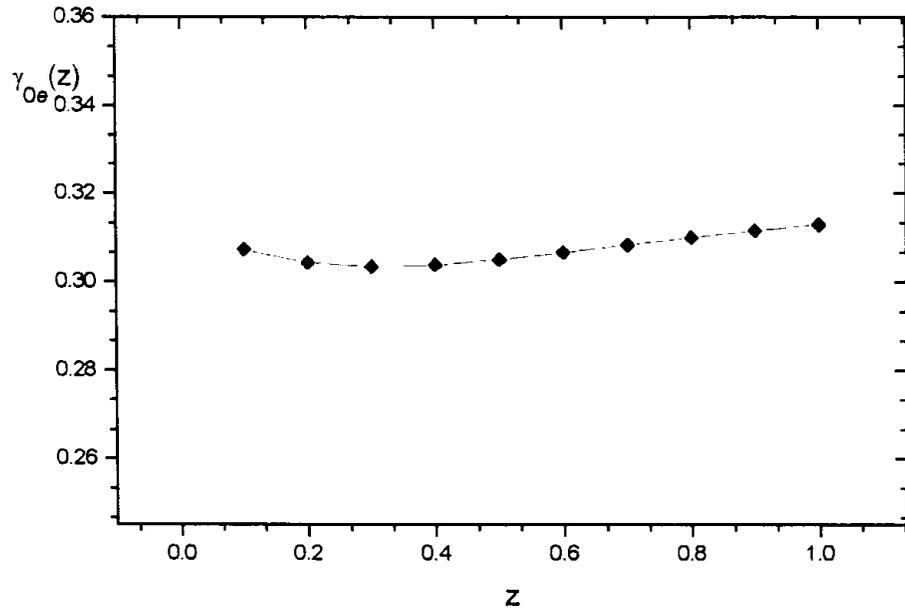


Figura 5-1: Comportamento de γ_{0e} em função de z . Apesar da dependência ser muito suave, ela se torna progressivamente relevante à medida que nos aproximamos de níveis de baixa energias.

de até 5% nas densidades espectrais.

Para eliminarmos esses desvios e conduzir rapidamente esses resultados ao limite do contínuo somamos à energia da impureza uma função de z de tal forma que o lado direito da Eq.(B.48) se torne independente de z

$$\varepsilon_d \longrightarrow \varepsilon_{dp}(z) = \varepsilon_{dp} \mp \Gamma_p \left[\cot(\pi\gamma_{0pz}) \pm \cot(\pi\gamma_{0pz=1}) \right]. \quad (5.2)$$

Uma vez que podemos facilmente calcular a constante γ_{0p} para qualquer Λ e z , tal correção pode ser facilmente implementada, mesmo no caso $U \neq 0$.

A Figura (5-2) mostra a densidade espectral assim calculadas para os canais par (ρ_e) e

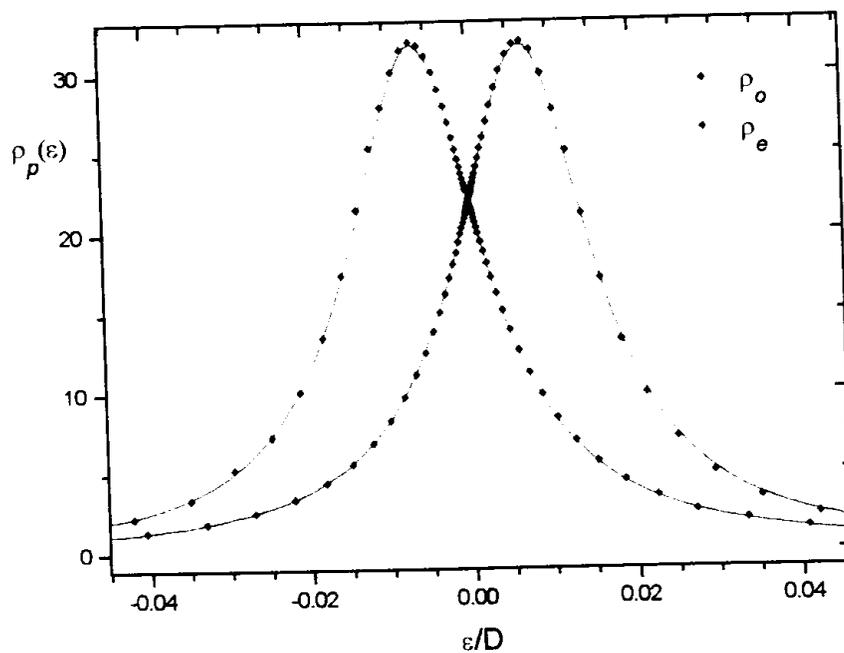


Figura 5-2: Densidades espectrais par (ρ_e) e ímpar (ρ_o). Os símbolos representam os resultados numéricos e a linha sólida a expressão analítica, dada pela Eq.(3.43). No cálculo utilizamos: $\Lambda = 10$, $k_F R = \pi$, $\Gamma = 0.01D$ e $\epsilon_d = 0$. Com $k_F R = \pi$, as larguras par e ímpar do nível ressonante são iguais, $\Gamma_e = \Gamma_o$. Se o modelo fosse simétrico, teríamos um pico centrado em $\epsilon_d = 0$. Neste caso $\Gamma_e = \Gamma_o$.

ímpar (ρ_o). Os parâmetros utilizados foram: $\Lambda = 10$, $k_F R = \pi$, $\Gamma = 0.01$ e $\varepsilon_d = 0$. Como podemos observar aparecem dois picos, de largura $\Gamma_e = \Gamma_o$ com $\Gamma_p = \left(1 \pm \frac{\sin(k_F R)}{k_F R}\right) \Gamma$ e mesma altura $\frac{1}{\pi \Gamma_e} = \frac{1}{\pi \Gamma_o}$, deslocados simetricamente em relação ao nível de Fermi. De acordo com a Eq.(3.45), as Lorentzianas para cada canal (par e ímpar) estarão centradas, respectivamente em

$$\varepsilon_{de}^* = \varepsilon_d - \Gamma_e \cot(\pi \gamma_{0e}), \quad (5.3)$$

e

$$\varepsilon_{do}^* = \varepsilon_d + \Gamma_o \cot(\pi \gamma_{0o}). \quad (5.4)$$

Como $\varepsilon_d = 0$, $\Gamma_e = \left(1 + \frac{\sin(k_F R)}{k_F R}\right) \Gamma$; $\Gamma_o = \left(1 - \frac{\sin(k_F R)}{k_F R}\right) \Gamma$; $\gamma_{0e} = 0.6870$ e $\gamma_{0o} = 0.3130$ encontramos que $\varepsilon_{de}^* = 0.00663$ e $\varepsilon_{do}^* = -0.00663$, concordando com os resultados numéricos. Devemos salientar que a assimetria partícula-buraco do Hamiltoniano por nós estudado é o que separa a densidade par da ímpar, mesmo quando $\Gamma_e = \Gamma_o$. Na aproximação ECC, discutido na Seção(2.3.1), que força o modelo a ter simetria partícula-buraco, as Eqs.(5.3) e (5.4) perdem o segundo termo; assim $\varepsilon_{de}^* = \varepsilon_{do}^* = \varepsilon_d$. Nesse caso, as Lorentzianas estão centradas numa mesma energia e portanto coincidem.

Quando Γ é nulo, o espectro é constituído por uma função delta na energia ε_d que corresponde a transição do estado duplamente ocupado para o singelamente ocupado (ver Figura (2-3)). Quando Γ for não nulo, a função delta alarga-se e passa a ter então a forma da Figura (5-2). Essa figura mostra também a extensão da Fórmula de Langreth, Eq.(3.44), é exata para todo o espectro no caso $U = 0$. A boa concordância dos resultados numéricos com ela dá uma medida da precisão de nosso cálculo.

Na Figura (5-3) temos uma situação muito semelhante à anterior. Os parâmetros utilizados foram: $\Lambda = 10$, $k_F R = 2$, $\Gamma = 0.01$ e $\varepsilon_d = 0$. Neste caso, $\Gamma_e > \Gamma_o$, o canal par está mais

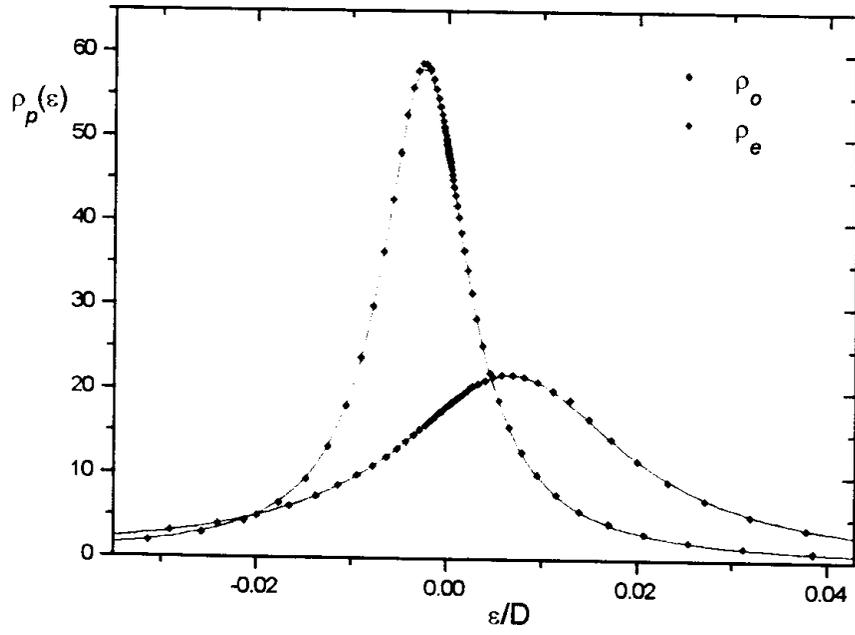


Figura 5-3: Densidades espectrais par (ρ_e) e ímpar (ρ_o). Os símbolos representam os resultados numéricos e a linha sólida a expressão analítica, dada pela Eq.(3.43). Os parâmetros utilizados: $\Lambda = 10$, $k_F R = 2$, $\Gamma = 0.01D$ e $\varepsilon_d = 0$. Note que à medida que aproximamos as impurezas o canal par (ρ_e) se acopla mais fortemente a banda de condução.

acoplado à banda, resultando em um tempo de transição, $\tau_p = \hbar/\Gamma_p$, menor. Assim temos uma altura menos acentuada para a sua densidade. Vê-se novamente que a Eq.(3.44) concorda perfeitamente com os resultados numéricos.

Para finalizar o trabalho, devemos enfatizar que os resultados numéricos encontrados aqui comprovam a eficácia do Grupo de Renormalização para calcular propriedades de excitação mesmo com parâmetro de discretização $\Lambda = 10$. Na prática, valores grandes para o parâmetro de discretização implicam em substancial redução do tempo de computação necessário para diagonalização de Hamiltonianos de muitos corpos.

Esse tempo cresce em proporção a $e^{-1/\ln\Lambda}$; a diagonalização do modelo de duas impurezas com $U = 0$, por exemplo, é inviável para $\Lambda < 8$. Essa observação enfatiza a afirmação feita no Capítulo I de que experiência adquirida com o cálculo ajudou a resolver o problema correlacionado^[4].

Apêndice A

Tridiagonalização da Banda de Condução

Esta seção segue a referência[22]. Consideremos uma banda de condução discretizada dada por

$$H_{BC} = \sum_{m=1}^M E_m a_m^\dagger a_m, \quad (\text{A.1})$$

onde $a_m (m = 1, \dots, M)$ são operadores de fermi. As energias E_m são arbitrárias, porém devem ser não degeneradas. O acoplamento entre a banda de condução e o estado de impureza é descrito pelo operador

$$f_0 = \sum_{m=1}^M \alpha_m a_m, \quad (\text{A.2})$$

onde os coeficientes α_m devem ser todos diferentes de zero e o operador f_0 deve ser normalizado.

Precisamos para construir uma transformação de base exata transformar a banda de condução na forma tridiagonal

$$H_{BC} = \sum_{n=0}^{M-2} \left[\eta_n f_n^\dagger f_n + t_n (f_n^\dagger f_{n+1} + h.c.) \right] + \eta_{M-1} f_{M-1}^\dagger f_{M-1}, \quad (\text{A.3})$$

com f_0 dado pela Eq.(A.2). Os $f_n (n = 1, \dots, M - 1)$ não são definidos; na prática somente

necessitamos determinar os coeficientes diagonais ($\eta_n(n = 0, \dots, M - 1)$) e codiagonais ($t_n(n = 0, \dots, M - 2)$). Nas próximas seções discutiremos o formalismo necessário para determinação desses coeficientes e uma forma prática para seu cálculo.

A.1 Procedimento Formal

Para calcular os coeficientes usaremos o formalismo das quadraturas Gaussianas^[23]. Fundamental no formalismo é a definição de um produto interno. Dado duas funções f e g , definidas no domínio da energia, definimos o produto

$$\langle f|g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} W(\epsilon) f(\epsilon) g(\epsilon) d\epsilon, \quad (\text{A.4})$$

onde a função peso $W(\epsilon)$ deve ser normalizada. Podemos encontrar um conjunto de polinômios (i) que inclui exatamente um polinômio de ordem j , chamado p_j , para cada $j = 0, 1, \dots$, e (ii) todos sejam exatamente ortogonais sobre uma especificada função peso $W(\epsilon)$. Um procedimento construtivo para encontrar este conjunto é a relação de recorrência^[23]

$$\begin{aligned} p_{-1}(\epsilon) &\equiv 0 \\ p_0(\epsilon) &\equiv 1 \\ p_{j+1}(\epsilon) &= (\epsilon - a_j)p_j(\epsilon) - b_j p_{j-1}(\epsilon) \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

onde

$$\begin{aligned} a_j &= \left[\frac{\langle \epsilon p_j | p_j \rangle}{\langle p_j | p_j \rangle} \right] & j = 0, 1, \dots \\ b_j &= \left[\frac{\langle p_j | p_j \rangle}{\langle p_{j-1} | p_{j-1} \rangle} \right] & j = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

O coeficiente b_0 é arbitrário; podemos tomá-lo com zero. A fim de aplicar o formalismo, definimos um Hamiltoniano truncado

$$H_N = \sum_{n=0}^{N-2} \left[\eta_n f_n^\dagger f_n + t_n (f_n^\dagger f_{n+1} + h.c.) \right] + \eta_{N-1} f_{N-1}^\dagger f_{N-1} \quad (1 \leq N \leq M). \quad (\text{A.7})$$

Para $N = M$, o Hamiltoniano $H_N = H_M$ deve coincidir com o Hamiltoniano da Eq.(A.1). Na representação matricial escrevemos H_N como

$$H_N = \sum_{i,j=0}^{N-1} f_i^\dagger [\mathcal{H}_N]_{ij} f_j. \quad (\text{A.8})$$

Para cada matriz \mathcal{H}_N encontramos um conjunto de polinômios

$$P_N = \det [\mathcal{H}_N - I\epsilon], \quad (\text{A.9})$$

onde I é a matriz identidade e P_N é conhecido como polinômio característico. Por conveniência definimos $H_0 \equiv 0$ e $P_0(\eta) \equiv 1$.

Calculando o polinômio característico P_{N+1} a partir da matriz \mathcal{H}_N encontramos

$$P_{N+1}(\epsilon) = \det [\tilde{\mathcal{H}}_{N+1}] = \begin{vmatrix} \tilde{\eta}_0 & t_0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ t_0 & \tilde{\eta}_1 & t_1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & t_1 & \tilde{\eta}_2 & \ddots & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \ddots & \ddots & t_{N-2} & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & t_{N-2} & \tilde{\eta}_{N-1} & t_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & t_{N-1} & \tilde{\eta}_N \end{vmatrix}_{(N+1) \times (N+1)}. \quad (\text{A.10})$$

onde $\tilde{\eta}_N = \eta_N - \epsilon$. Usando a regra de Laplace temos

$$P_{N+1}(\epsilon) = \sum_{j=1}^{N+1} (-1)^{N+1+j} \left(\tilde{\mathcal{H}}_{N+1} \right)_{N+1,j} \det \left[\left(\tilde{\mathcal{H}}_{N+1} \right)_{N+1,j} \right], \quad (\text{A.11})$$

do que segue que

$$P_{N+1}(\epsilon) = \tilde{\eta}_N P_N(\epsilon) - t_{N-1} \det \left[\left(\tilde{\mathcal{H}}_{N+1} \right)_{N+1,N} \right].$$

Mas

$$\det \left[\left(\tilde{\mathcal{H}}_{N+1} \right)_{N+1,N} \right] = \begin{vmatrix} \tilde{\eta}_0 & t_0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ t_0 & \tilde{\eta}_1 & t_1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & t_1 & \tilde{\eta}_2 & \ddots & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \ddots & \ddots & t_{N-3} & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & t_{N-3} & \tilde{\eta}_{N-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & t_{N-2} & t_{N-1} \end{vmatrix}_{N \times N}, \quad (\text{A.12})$$

aplicando a regra de Laplace novamente temos

$$P_{N+1}(\epsilon) = (-1)^{N+N-1} t_{N-2} \det \left[\left(\tilde{\mathcal{H}}'_{N+1} \right)_{N,N-1} \right] + (-1)^{N+N} t_{N-1} \det \left[\left(\tilde{\mathcal{H}}''_{N+1} \right)_{N,N} \right]. \quad (\text{A.13})$$

Como

$$\det \left[\left(\tilde{\mathcal{H}}'_{N+1} \right)_{N,N-1} \right] = 0$$

e

$$\det \left[\left(\tilde{\mathcal{H}}''_{N+1} \right)_{N,N} \right] = P_{N-1},$$

encontramos que

$$P_{N+1}(\epsilon) = (\eta_N - \epsilon) P_N - t_{N-1}^2 P_{N-1}. \quad (\text{A.14})$$

Comparando a equação acima com a Eq.(A.5) temos

$$\eta_N = \frac{\langle \epsilon P_N | P_N \rangle}{\langle P_N | P_N \rangle} \quad (N = 0, \dots, M - 1) \quad (\text{A.15})$$

e

$$t_{N-1}^2 = \frac{\langle P_N | P_N \rangle}{\langle P_{N-1} | P_{N-1} \rangle} \quad (N = 1, \dots, M - 1) . \quad (\text{A.16})$$

Para o cálculo das equações acima é necessário que se conheça a função peso $W(\epsilon)$.

A.2 Função Peso

Definimos agora a função peso $W(\epsilon)$ apropriada ao nossos cálculos. Das Eqs.(A.1) e (A.2) segue que

$$\{ [H_{BC}, f_0^\dagger], f_0 \} = \sum_{m=1}^M E_m \alpha_m^2 \quad (\text{A.17})$$

e

$$\{ [H_{BC}, f_0^\dagger], [f_0, H_{BC}] \} = \sum_{m=1}^M E_m^2 \alpha_m^2. \quad (\text{A.18})$$

Por outro lado a Eq.(A.3) implica que

$$\eta_0 = \{ [H_{BC}, f_0^\dagger], f_0 \} \quad (\text{A.19})$$

e

$$t_0^2 = \{ [H_{BC}, f_0^\dagger], [f_0, H_{BC}] \} - \{ [H_{BC}, f_0^\dagger], f_0 \}^2. \quad (\text{A.20})$$

Para $N = 1$, a matriz \mathcal{H}_1 tem um único elemento, $\mathcal{H}_1 = \eta_0$, que é dado pela Eq.(A.15): uma vez que $P_0(\epsilon) = 1$,

$$\eta_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon W(\epsilon) d\epsilon . \quad (\text{A.21})$$

Assim substituindo η_0 na Eq.(A.19) encontramos

$$\left\{ \left[H_{BC}, f_0^\dagger \right], f_0 \right\} = \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon W(\epsilon) d\epsilon \quad (\text{A.22})$$

e comparando com Eq.(A.17) mostramos que

$$\sum_{m=1}^M E_m \alpha_m^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon W(\epsilon) d\epsilon. \quad (\text{A.23})$$

A segunda relação entre as energias da banda de condução e a função peso pode ser encontrada da Eq.(A.20). Para $N = 1$, a Eq.(A.16) é

$$t_0^2 = \frac{\langle P_1 | P_1 \rangle}{\langle P_0 | P_0 \rangle}. \quad (\text{A.24})$$

Lembrando que $P_0(\epsilon) = 1$ e $P_1(\epsilon) = \eta_0 - \epsilon$, temos

$$t_0^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon^2 W(\epsilon) d\epsilon - \eta_0^2. \quad (\text{A.25})$$

Comparando como as Eqs.(A.19) e (A.20) mostramos

$$\left\{ \left[H_{BC}, f_0^\dagger \right], [f_0, H_{BC}] \right\} = \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon^2 W(\epsilon) d\epsilon,$$

que com a Eq.(A.18) resulta em

$$\sum_{m=1}^M E_m^2 \alpha_m^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon^2 W(\epsilon) d\epsilon. \quad (\text{A.26})$$

Para satisfazer a normalização, $\int_{-\infty}^{\infty} W(\epsilon) d\epsilon = 1$, e as Eqs. (A.23) e (A.26), definimos a seguinte função peso como

$$W(\epsilon) = \sum_{m=1}^M \alpha_m^2 \delta(\epsilon - E_m). \quad (\text{A.27})$$

Observemos que essa não seria a única função peso adequada que satisfaça a Eq.(A.26), porém, como mostraremos na última parte deste apêndice, ela gera os coeficientes corretos do problema. Com isso estamos em condições de calcular as Eq.(A.15) e (A.16) descritas na seção anterior.

A.3 Procedimento Prático

Na prática podemos calcular os coeficientes η_n e t_n por um procedimento não iterativo que determina cada coeficiente de maneira independente. A definição da função peso reduz os n momentos de energia,

$$\phi_n = \langle \epsilon^n | P_0 \rangle = \langle \epsilon^{n-m} | \epsilon^m \rangle \quad (\text{A.28})$$

para uma soma de M termos:

$$\phi_n = \sum_{m=1}^M E_m^n \alpha_m^2. \quad (\text{A.29})$$

Na teoria das quadraturas Gaussianas os polinômios característicos formam um conjunto ortogonal, $\langle P_N | P_{N'} \rangle = 0$ ($N, N' = 0, \dots, M; N \neq N'$). Em particular, para n ($0 \leq n < N$), temos que ϵ^n é uma combinação linear de P_0, \dots, P_n sendo desta forma ortogonal ao mesmo.

Assim

$$\begin{aligned} \langle P_N | P_0 \rangle &= 0 \\ \langle P_N | \epsilon \rangle &= 0 \\ &\vdots \\ \langle P_N | \epsilon^{N-1} \rangle &= 0, \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

podem ser expandidas desde que o polinômio $P_N(\epsilon)$ tenha a forma

$$P_N(\epsilon) = (-1)^N \left[\epsilon^N + \gamma_1 \epsilon^{N-1} + \dots + \gamma_N \right], \quad (\text{A.31})$$

onde $\gamma_n (n = 1, \dots, N)$ são constantes, e em particular^[24]

$$\gamma_1 = - \sum_{n=0}^{N-1} \eta_n. \quad (\text{A.32})$$

Utilizando a Eq.(A.31), as Eqs(A.30) podem ser escritas como

$$\begin{aligned} \phi_N + \gamma_1 \phi_{N-1} + \dots + \gamma_N \phi_0 &= 0 \\ \phi_{N+1} + \gamma_1 \phi_N + \dots + \gamma_N \phi_1 &= 0 \\ \vdots & \\ \phi_{2N-1} + \gamma_1 \phi_{2N-2} + \dots + \gamma_N \phi_{N-1} &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

Este sistema linear de N equações inhomogêneas com N variáveis $\gamma_n (n = 1, \dots, N)$ pode ser resolvido pela regra de Cramer. Em especial, considerando a igualdade que determina γ_1 e substituindo o resultado na Eq.(A.32), encontramos

$$\sum_{n=0}^{N-1} \eta_n = \frac{\tilde{\Delta}_N}{\Delta_N} \quad (1 \leq N \leq M) \quad (\text{A.34})$$

onde

$$\Delta_N = \det \begin{bmatrix} \phi_0 & \dots & \phi_{N-2} & \phi_{N-1} \\ \phi_1 & \dots & \phi_{N-1} & \phi_N \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_{N-1} & \dots & \phi_{2N-3} & \phi_{2N-2} \end{bmatrix} \quad (\text{A.35})$$

e

$$\tilde{\Delta}_N = \det \begin{bmatrix} \phi_0 & \dots & \phi_{N-2} & \phi_N \\ \phi_1 & \dots & \phi_{N-1} & \phi_{N+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_{N-1} & \dots & \phi_{2N-3} & \phi_{2N-1} \end{bmatrix}. \quad (\text{A.36})$$

Da Eq.(A.34) obtemos uma expressão explícita que determina todos os coeficientes diagonais

η_N (a exceção de η_0)

$$\eta_N = \frac{\tilde{\Delta}_{N+1}}{\Delta_{N+1}} - \frac{\tilde{\Delta}_N}{\Delta_N} \quad (1 \leq N \leq M). \quad (\text{A.37})$$

Em particular o coeficiente η_0 é dado por

$$\eta_0 = \phi_1. \quad (\text{A.38})$$

Para os coeficientes codiagonais temos, Eq.(A.16), que

$$\langle P_N | P_N \rangle = \prod_{n=0}^{N-1} t_n^2 \quad (1 \leq N \leq M). \quad (\text{A.39})$$

Como o polinômio P_N é ortogonal a ϵ^n ($n = 1, \dots, N-1$), podemos reescrever a equação acima como

$$\langle P_N | \epsilon^N \rangle = (-1)^N \prod_{n=0}^{N-1} t_n^2 \quad (1 \leq N \leq M), \quad (\text{A.40})$$

substituindo a Eq.(A.31) para P_N encontramos

$$\phi_{2N} + \gamma_1 \phi_{2N-1} + \dots + \gamma_N \phi_N - \prod_{n=0}^{N-1} t_n^2 = 0 \quad (1 \leq N \leq M). \quad (\text{A.41})$$

Combinando esta equação com as Eqs.(A.30) obtemos um sistema de $N+1$ equações inhomogêneas com $N+1$ variáveis $\gamma_1, \dots, \gamma_N$ e $\prod_{n=0}^{N-1} t_n^2$. A última é determinada pela regra de Cramer, resultando em

$$\prod_{n=0}^{N-1} t_n^2 = \frac{\Delta_{N+1}}{\Delta_N}, \quad (\text{A.42})$$

onde Δ_N é um determinante $N \times N$ definido pela Eq.(A.35). Assim a equação que calcula os coeficientes codiagonais t_N é dada por

$$t_N = \frac{\sqrt{\Delta_{N+2} \Delta_N}}{\Delta_{N+1}} \quad (1 \leq N \leq M-2). \quad (\text{A.43})$$

O método prático para determinar os coeficientes diagonais e codiagonais consiste em: (i) calcular E_{mp} , α_{mp} e β_{mp} dados pelas Eqs.(3.5) e (3.12), (ii) em seguida os momentos ϕ_{np} dados por

$$\phi_{np} = E_p^n [\alpha_{mp}^2 + (-1)^n \beta_{mp}^2] + \sum_m E_{mp}^n [\alpha_{mp}^2 + (-1)^n \beta_{mp}^2] \quad (\text{A.44a})$$

e os determinantes Δ_N e $\tilde{\Delta}_N$, Eqs.(A.35) e (A.36) respectivamente, e (iii) finalmente os coeficientes η_{np} e t_{np} dados pelas Eqs.(A.37) e (A.43).

A.4 Autovalores do Hamiltoniano tridiagonal e as energias da banda de condução

Para provar que a função peso definida na Eq.(A.27) é adequada ao nosso problema vamos mostrar que os autovalores da matriz tridiagonal (A.3) são exatamente as energias E_m da Eq.(A.1).

Usando a definição da função peso

$$W(\epsilon) = \sum_{m=1}^M \alpha_m^2 \delta(\epsilon - E_m)$$

teremos

$$\langle P_N | \epsilon^n \rangle = \sum_{m=1}^M P_N(E_m) E_m^n \alpha_m^2. \quad (\text{A.45})$$

Com isso o sistema de equações (A.30) para o caso particular $N = M$, torna-se

$$\begin{aligned}
\sum_{m=1}^M P_M(E_m) \alpha_m^2 &= 0, \\
\sum_{m=1}^M P_M(E_m) E_m^1 \alpha_m^2 &= 0, \\
\sum_{m=1}^M P_M(E_m) E_m^2 \alpha_m^2 &= 0, \\
&\vdots \\
\sum_{m=1}^M P_M(E_m) E_m^{M-1} \alpha_m^2 &= 0.
\end{aligned}$$

onde P_M é o polinômio característico da matriz \mathcal{H}_M que representa o Hamiltoniano tridiagonal.

Para que esse sistema admita soluções triviais o determinante

$$\det \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ E_0 & E_1 & \cdots & E_M \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ E_0^{M-1} & E_1^{M-1} & \cdots & E_M^{M-1} \end{bmatrix} \quad (\text{A.46})$$

deve ser igual a zero. Esse determinante, conhecido como determinante de Vandermond ou alternado^[24], somente se anularia se dois ou mais elementos da segunda coluna forem iguais. Como supomos que as energias E_M são não-degeneradas garantimos que todos esses elementos são diferentes entre si. Assim o sistema acima tem somente a solução trivial

$$P_M(E_m) \alpha_m^2 = 0.$$

Como todos os coeficientes α_m são diferentes de zero, temos que $P_M(E_m) = 0$, ou seja, que as energias E_m da banda de condução são os zeros do polinômio característico de \mathcal{H}_M , que é a representação matricial do Hamiltoniano tridiagonal

Apêndice B

Diagonalização

O Hamiltoniano truncado obtido na seção(3.3) do Capítulo III pode ser diagonalizado numericamente, pois possui um número finito de termos. Assim, sendo bem semelhante ao de um nível ressonante, não apresenta dificuldades significativas na sua diagonalização. Reescrevendo a Eq.(3.24) temos

$$H_{Np} = \Lambda^{(N-1)/2} \left\{ \sum_{n=0}^{N-1} \left[\eta_{np} f_{np}^\dagger f_{np} + t_{np} (f_{np}^\dagger f_{(n+1)p} + h.c.) \right] + \tilde{\epsilon}_d d_p^\dagger d_p + \frac{\tilde{V}}{N_p} (f_{0p}^\dagger d_p + h.c.) \right\}. \quad (\text{B.1})$$

Novamente é quadrático e agora separável em dois termos que comutam entre si, podemos escrevê-lo como um produto de matrizes

$$H_{Np} = \mathcal{F}_{Np}^\dagger [\mathcal{H}_{Np}] \mathcal{F}_{Np} \quad (\text{B.2})$$

onde \mathcal{F}_{Np} é um vetor de dimensão $N + 2$,

$$\mathcal{F}_{Np}^\dagger = \left[d_p^\dagger f_{0p}^\dagger f_{1p}^\dagger f_{2p}^\dagger \dots f_{Np}^\dagger \right] \quad (\text{B.3})$$

e \mathcal{H}_{Np} é uma matriz $(N+2) \times (N+2)$, cujos elementos diferentes de zero são

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}_{Np}]_{1,1} &= \Lambda^{(N-1)/2} \tilde{\varepsilon}_d, \\ [\mathcal{H}_{Np}]_{1,2} &= [\mathcal{H}_{Np}]_{2,1} = \Lambda^{(N-1)/2} \frac{\tilde{V}}{N_p}, \\ [\mathcal{H}_{Np}]_{n,n} &= \Lambda^{(N-1)/2} \eta_{(n-1)p}, \\ [\mathcal{H}_{Np}]_{n,n+1} &= [\mathcal{H}_{Np}]_{n+1,n} = \Lambda^{(N-1)/2} t_{(n-2)p}. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Escrevendo os operadores do modelo em termos dos operadores elétrons (g_{jp}) e buracos (h_{jp}) temos

$$\begin{aligned} H_{Np} &= \sum_{j=1}^{(N+1)/2} \eta_{jp}^* (g_{jp}^\dagger g_{jp} + h_{jp}^\dagger h_{jp}) + \Lambda^{(N-1)/4} \frac{\tilde{\Gamma}^{1/2}}{N_p} \sum_{j=1}^{(N+1)/2} [(\alpha_{0jp}^{*+} g_{jp} + \alpha_{0jp}^{*-} h_{jp}^\dagger) d_p + \\ &+ h.c.] + \Lambda^{(N-1)/2} \tilde{\varepsilon}_d d_p^\dagger d_p. \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

onde $\tilde{\Gamma} = \pi \rho \tilde{V}^2$ e define-se f_{0p} como

$$f_{0p} = \Lambda^{-(N-1)/4} \sum_{j=1}^{(N+1)/2} (\alpha_{0jp}^{*+} g_{jp} + \alpha_{0jp}^{*-} h_{jp}^\dagger) \quad (\text{B.6})$$

sendo

$$\alpha_{0jp}^{*+} = N_p \frac{\int_{\Lambda^{-\frac{N-1}{2}+j-z_p-1}}^{\Lambda^{-\frac{N-1}{2}+j-z_p}} A_p(\varepsilon) d\varepsilon}{(1-\Lambda^{-1})^{-1/2} \Lambda^{-\frac{N-1}{4}+\frac{j-z_p}{2}}} \quad (\text{B.7})$$

e

$$\alpha_{0jp}^{*-} = N_p \frac{\int_{-\Lambda^{-\frac{N-1}{2}+j-z_p}}^{-\Lambda^{-\frac{N-1}{2}+j-z_p-1}} A_p(\varepsilon) d\varepsilon}{(1-\Lambda^{-1})^{-1/2} \Lambda^{-\frac{N-1}{4}+\frac{j-z_p}{2}}}. \quad (\text{B.8})$$

Para $j \approx 1$ teremos o seguinte comportamento assintótico

$$\alpha_{0jp}^{*+} = \alpha_{0p}(k_F) \left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2} \right)^{1/2} \Lambda^{(j-z_p)/2} \quad (\text{B.9})$$

$$\alpha_{0jp}^{*-} = \alpha_{0p}(k_F) \left(\frac{1 - \Lambda^{-1}}{2} \right)^{1/2} \Lambda^{(j-z_p)/2}, \quad (\text{B.10})$$

onde $\alpha_{0p}(k_F)$ é dado por

$$\alpha_{0p}(k_F) = \left\{ \frac{2k_F R \Delta / D \left[1 \pm \frac{\sin(k_F R)}{k_F R} \right]}{2k_F R \Delta \pm [\text{Si}((\Delta + 1)k_F R) - \text{Si}((1 - \Delta)k_F R)]} \right\}^{1/2}. \quad (\text{B.11})$$

Como podemos ver, uma consequência imediata da assimetria do modelo é que os coeficientes dos operadores que o diagonalizam, Eqs.(B.7) e (B.8), são diferentes, ou seja, o acoplamento é diferente para cada canal.

Os operadores de elétrons são definidos como

$$\begin{aligned} a_{0p} &= d_p \\ a_{\ell p} &\equiv g_{\ell p}(\ell > 0) \\ a_{\ell p} &\equiv h_{-\ell p}^\dagger(\ell < 0). \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Redefinindo as energias dos estados de uma partícula por

$$\begin{aligned} \eta_{\ell p}^* &= -\eta_{-\ell p}^*(\ell < 0) \\ \eta_{0p}^* &= \tilde{\varepsilon}_d \Lambda^{(N-1)/2}, \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

podemos escrever Eq.(B.5) na seguinte forma

$$H_{Np} = \sum_j \eta_j^* a_{jp}^\dagger a_{jp} + \Lambda^{(N-1)/4} \frac{\tilde{\Gamma}^{1/2}}{N_p} \sum_j \left[(\alpha_{0jp}^{*+} a_{jp}^\dagger + \alpha_{0jp}^{*-} a_{-jp}^\dagger) a_{0p} + h.c. \right]. \quad (\text{B.14})$$

O Hamiltoniano H_{Np} está em uma forma bilinear, $H_{Np} = a^\dagger \mathbf{M} a$, logo existe uma matriz $(N + 2) \times (N + 2)$ que diagonaliza a matriz \mathbf{M} , similar aos operadores de H_{Np} na base a de

onde $\lambda_{\ell p}$ são autovalores de H_{Np} . Assim

$$\begin{aligned} u_{-\ell jp} &= \frac{\beta_{-\ell p}^{*-2}}{(\lambda_{jp} - \eta_{-\ell p}^*)} u_{0jp} \\ u_{\ell jp} &= \frac{\beta_{\ell p}^{*+2}}{(\lambda_{jp} - \eta_{\ell p}^*)} u_{0jp}, \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

substituindo (B.19) na Eq.(B.17) encontramos

$$\lambda_{jp} = \sum_{\ell} \frac{\beta_{-\ell p}^{*-2}}{(\lambda_{jp} - \eta_{-\ell p}^*)} + \sum_{\ell} \frac{\beta_{\ell p}^{*+2}}{(\lambda_{jp} - \eta_{\ell p}^*)} + \eta_{0p}^*, \quad (\text{B.20})$$

com

$$\beta_{jp}^{*-2} = \Lambda^{(N-1)/4} \frac{\tilde{\Gamma}^{1/2}}{N_p} \alpha_{0jp}^{*-2} \quad (\text{B.21})$$

e

$$\beta_{jp}^{*+2} = \Lambda^{(N-1)/4} \frac{\tilde{\Gamma}^{1/2}}{N_p} \alpha_{0jp}^{*+2}, \quad (\text{B.22})$$

temos

$$\lambda_{jp} = \eta_{0p}^* + \Lambda^{(N-1)/2} \tilde{\Gamma}_p X(\lambda_{jp}), \quad (\text{B.23})$$

onde

$$X(\lambda_{jp}) = \sum_{\ell=1}^{(N+1)/2} \left[\frac{\alpha_{0\ell p}^{*+2}}{(\lambda_{jp} - \eta_{\ell p}^*)} + \frac{\alpha_{0\ell p}^{*-2}}{(\lambda_{jp} + \eta_{\ell p}^*)} \right]. \quad (\text{B.24})$$

Necessitamos agora calcular o somatório da Eq.(B.24). Para tanto vamos colocá-lo em uma forma mais conveniente. Somando e subtraindo a expressão $\frac{\alpha_{0\ell p}^{*+2}}{(\lambda_{jp} + \eta_{\ell p}^*)}$ na equação anterior, obtemos

$$X(\lambda_{jp}) = \sum_{\ell=1}^{(N+1)/2} \left[\frac{\alpha_{0\ell p}^{*+2}}{(\lambda_{jp} - \eta_{\ell p}^*)} + \frac{\alpha_{0\ell p}^{*+2}}{(\lambda_{jp} + \eta_{\ell p}^*)} \right] + \sum_{\ell=1}^{(N+1)/2} \left[\frac{\alpha_{0\ell p}^{*-2} - \alpha_{0\ell p}^{*+2}}{(\lambda_{jp} + \eta_{\ell p}^*)} \right] \quad (\text{B.25})$$

$$X(\lambda_{jp}) = X_1(\lambda_{jp}) + \Delta X(\lambda_{jp}). \quad (\text{B.26})$$

Podemos dizer que a parte dominante é a proveniente do primeiro termo, pois, os coeficientes $\alpha_{0\ell p}^{*+2}$ e $\alpha_{0\ell p}^{*-2}$ são aproximadamente iguais diferindo apenas para ℓ próximos do limite superior [ver Eq.(B.7) e (B.8)]. Desta maneira o segundo termo pode ser considerado como uma correção. Vamos inicialmente calcular o primeiro termo.

Substituindo os limites assintóticos de $\alpha_{0\ell p}^{*+}$ e $\alpha_{0\ell p}^{*-}$ encontramos

$$X_1(\lambda_{jp}) = 2\lambda_{jp}\alpha_{0p}^2(k_F) \left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2}\right)^{(N+1)/2} \sum_{\ell=1} \left[\frac{\Lambda^{(\ell-z_p)}}{(\lambda_{jp}^2 - \eta_{\ell p}^{*2})} \right]. \quad (\text{B.27})$$

Como os termos dominantes na soma são aqueles com $\lambda_{jp} \simeq \eta_{\ell p} \gg 1$, podemos estender os limites superiores e inferiores para $\pm\infty$. Então

$$X_1(\lambda_{jp}) = 2\lambda_{jp}\alpha_{0p}^2(k_F) \left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2}\right) \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} \left[\frac{\Lambda^{(\ell-z_p)}}{(\lambda_{jp}^2 - \eta_{\ell p}^{*2})} \right], \quad (\text{B.28})$$

com $\eta_{\ell p}^* = \Lambda^{(\ell-z_p)}$. O somatório do lado direito é calculado por uma transformação de Sommerfeld-Watson^[25] resultando em

$$\sum_{\ell=-\infty}^{\infty} \frac{\Lambda^{(\ell-z_p)}}{(\lambda_{jp}^2 - \eta_{\ell p}^{*2})} = \frac{\pi \cot(\pi\gamma_{jp})}{2(\ln \Lambda)\lambda_{jp}} + \mathcal{O}(e^{-2\pi^2/\ln \Lambda}), \quad (\text{B.29})$$

o termo da ordem de $e^{-2\pi^2/\ln \Lambda}$ pode ser desprezado e a Eq.(B.28) será dada por

$$X_1(\lambda_{jp}) = \frac{\pi\alpha_{0p}^2(k_F)}{\ln \Lambda} \left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2}\right) \cot(\pi\gamma_{jp}). \quad (\text{B.30})$$

No segundo termo do lado direito da Eq.(B.25) não podemos usar os limites assintóticos pois dariam como resultado zero. Devemos desta maneira usar as expressões exatas para cada coeficiente. Levando em consideração que o termo $\Delta X(\lambda_{jp})$ é apenas uma correção podemos fazer a seguinte aproximação,

$$\int_a^b f(x)dx \sim f(x_m)\Delta x, \quad (\text{B.31})$$

onde $x_m = \frac{a+b}{2}$ e $\Delta x = a - b$. Assim temos

$$\int_{\Lambda^{-\frac{N-1}{2}-j-z_p-1}}^{\Lambda^{-\frac{N-1}{2}-j-z_p}} A_p(\varepsilon) d\varepsilon \sim A_p(\varepsilon_m) \Lambda^{-(N-1)/2} \Lambda^{(\ell-z_p)} (1 - \Lambda^{-1}). \quad (\text{B.32})$$

Portanto

$$\alpha_{0\ell p}^{*+} = N_p A_p(\varepsilon_m) (1 - \Lambda^{-1})^{1/2} \Lambda^{(\ell-z_p)/2} \quad (\text{B.33})$$

e

$$\alpha_{0\ell p}^{*-} = N_p A_p(-\varepsilon_m) (1 - \Lambda^{-1})^{1/2} \Lambda^{(\ell-z_p)/2}. \quad (\text{B.34})$$

Então substituindo as equações anteriores no segundo termo da Eq.(B.25) e escrevendo a dependência da energia em termos do momento absoluto encontramos

$$\Delta X(\lambda_{jp}) = \sum_{\ell=1}^{(N+1)/2} \frac{N_p^2 (1 - \Lambda^{-1}) \Lambda^{(\ell-z_p)/2}}{(\lambda_{jp} + \eta_{\ell p}^*)} \{ \mp [\cos(k_\ell R) \sin(k_F R)] k_\ell \pm \quad (\text{B.35})$$

$$[\sin(k_\ell R) \cos(k_F R)] k_F \} / (-k_F^2 + k_\ell^2) R. \quad (\text{B.36})$$

Como para $\ell \gg 1$, $\eta_{\ell p}^* \gg \lambda_{jp}$ vamos desprezar λ_{jp} no denominador. Assim

$$\Delta X = \mp N_p^2 (1 - \Lambda^{-1}) \sum_{\ell=1}^{(N+1)/2} \left\{ \sin(k_F R) \frac{k_\ell \cos(k_\ell R)}{(-k_F^2 + k_\ell^2) R} + \quad (\text{B.37})$$

$$- \cos(k_F R) k_F \frac{\sin(k_\ell R)}{(-k_F^2 + k_\ell^2) R} \right\} \quad (\text{B.38})$$

No limite $N \rightarrow \infty$ a soma pode ser transformada numa integral, resultando em

$$\Delta X = \mp \frac{N_p^2 (1 - \Lambda^{-1})}{\ln \Lambda(k_F R)} \left\{ \cos(k_F R) \text{Si} \left(\frac{DR}{v_F} \right) + \frac{1}{2} \text{Si}[(k_F v_F - D) R v_F] + \right. \quad (\text{B.39})$$

$$\left. - \frac{1}{2} \text{Si}[(k_F v_F + D) R v_F] \right\},$$

onde Si é a função integral sin [26].

Substituindo Eq.(B.30) e Eq.(B.39) na Eq.(B.26) obtemos,

$$X(\lambda_{jp}) = \frac{\pi\alpha_{0p}^2(k_F)}{\ln \Lambda} \left(\frac{1 - \Lambda^{-1}}{2} \right) \left[\cot(\pi\gamma_{jp}) \mp C_p \right], \quad (\text{B.40})$$

onde

$$C_p = \frac{N_p^2}{\pi\alpha_{0p}^2(k_F)(k_F R)} \left\{ 2 \cos(k_F R) \text{Si} \left(\frac{DR}{v_F} \right) + \text{Si}[(k_F v_F - D)Rv_F] \right. \quad (\text{B.41})$$

$$\left. - \text{Si}[(k_F v_F + D)Rv_F] \right\}. \quad (\text{B.42})$$

Assim a Eq.(B.23) fica

$$\frac{\lambda_{jp} - \eta_{0p}^*}{\Lambda^{(N-1)/2}\tilde{\Gamma}} = \frac{\pi\alpha_{0p}^2(k_F)}{N_p^2 \ln \Lambda} \left(\frac{1 - \Lambda^{-1}}{2} \right) \left[\cot(\pi\gamma_{jp}) \mp C_p \right]. \quad (\text{B.43})$$

Como $\frac{\alpha_{0p}^2(k_F)}{N_p^2} = 2A_p^2$ podemos escrever a equação anterior na forma

$$\frac{\lambda_{jp} - \eta_{0p}^*}{\Lambda^{(N-1)/2}\tilde{\Gamma}} = 2A_p^2 \frac{(1 - \Lambda^{-1})\pi}{\ln \Lambda} \left[\cot(\pi\gamma_{jp}) \mp C_p \right]. \quad (\text{B.44})$$

Para $\tilde{\Gamma} \rightarrow \infty$ temos que

$$\cot(\pi\gamma_{0p}) = C_p. \quad (\text{B.45})$$

Portanto,

$$\frac{\lambda_{jp} - \eta_{0p}^*}{\Lambda^{(N-1)/2}\tilde{\Gamma}} = 2A_p^2 \frac{(1 - \Lambda^{-1})\pi}{\ln \Lambda} \left[\cot(\pi\gamma_{jp}) \mp \cot(\pi\gamma_{0p}) \right]. \quad (\text{B.46})$$

Após um pouco de álgebra podemos escrever que

$$\cot(\pi\gamma_{jp}) = \frac{(E_{jp} - \varepsilon_d)}{\tilde{\Gamma}_p} \pm \cot(\pi\gamma_{0p}), \quad (\text{B.47})$$

onde:

$$E_{jp} = \pm \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} D \Lambda^{-(N-1)/2+1-z_p} \lambda_{jp},$$

$$\bar{\Gamma}_p = \Gamma_p / A_\Lambda,$$

$$\Gamma_p = \left(1 \pm \frac{\sin(k_F R)}{k_F R} \right) \Gamma$$

e

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

sendo Γ definido no Capítulo I.

De (B.47) obtemos a defasagem γ_{jp} ,

$$\gamma_{jp} = \frac{1}{\pi} \arctan \left[\frac{\bar{\Gamma}_p}{(E_{jp} - \varepsilon_d) \pm \bar{\Gamma}_p \cot(\pi \gamma_{0p})} \right]. \quad (\text{B.48})$$

Bibliografia

- [1] D.C. Langreth, **Phys Rev**, 150, 516 (1966). A extensão desse trabalho para o modelo de duas impurezas resulta na Eq.(3.43).
- [2] H.O.Frota, L.N. Oliveira, **Phys Rev B**, 33, 7871 (1986).
- [3] K.G. Wilson, **Rev. Mod. Phys.** 773 (1975).
- [4] Paula, C.A. *Densidade Espectral para o modelo de Anderson de duas impurezas Tese de Doutorado*, 1998, USP - Instituto de Física de São Carlos, SP.
- [5] M. Yoshida, M, A. Whitaker e L.N. Oliveira, **Phys. Rev. B** 41, 9043 (1990).
- [6] O. Sakai, V. Shemizu, and T. Kasuya, **J. Phys. Soc. Jpn**, 58, 388 (1990).
- [7] P.W. Anderson, **Phys. Rev.** 124, 41 (1961).
- [8] K, J. **Prog. of Teory Phys.** v.32, p. 37, 1964.
- [9] N. E. Bickers, **Rev. Mod. Phys.**59, 846 (1987).
- [10] M. Salomaa, **Z Phys. B** 25, 49 (1976).
- [11] K. Schonhammer, O. Gunnarsson, **Solid State Com.** 23, 691 (1977).
- [12] Alexander e P.W.Anderson, **Phys.Rev.** 133, A 1594 (1964).

- [13] I. Affleck e A. W. W. Ludwig, **Phys. Rev.** **68**, 1046 (1992).
- [14] B.A. Jones; C.M. Varma; J.W. Wilkins, **Phys. Rev. Lett**, 61, 125 (1988).
- [15] B. A. Jones and C.M. Varma, **Phys. Rev. Lett**, 58, 843 (1987).
- [16] J. Gan, **Phys. Rev. B**, 51 8282 (1995).
- [17] C. Sire; C.M. Varma; H.R. Krishna-murthy, **Phys. Rev. B**, 48, 138333 (1993).
- [18] J. B. Silva, W.L.C.Lima, W.C. Oliveira, J.L.N. Mello, L.N. Oliveira, and J. W. Wilkins, **Phys. Rev. Lett** **76**, 275 (1996).
- [19] Silva J.B *Novo método do grupo de renormalização numérica aplicado ao cálculo da susceptibilidade magnética no modelo de Anderson de duas impurezas* **Tese de Doutorado** 1994, USP - Instituto de Física de São Carlos, SP.
- [20] Frota. H. O *Fotoemissão no Modelo de Anderson para Compostos de Terras-Raras* **Tese de Doutorado**, 1985, USP - Instituto de Física de São Carlos, SP
- [21] Krishna- murthy H.R; Wilkins J.W., Wilson K.G. *Renormalization-group approach to the Anderson model of dilute magnetic alloys I. Static properties for the symmetric case.* **Phys. Rev. B**; 21 (03), 1003, 1980.
- [22] Lima, Washington L. C., *Assimetria partícula-buraco no modelo de Kondo de duas impurezas* , **Tese de Doutorado** 1997, USP - Instituto de Física de São Carlos, SP.
- [23] Press W. H.; Teukolsky S.A.; Vetterling W.T.; Flannery B. P. *Numerical recipes in C.* Cambridge University Press, p.147 - 156, 1992.
- [24] A.C. Aitken, *Determinants and Matrices* (Interscience, New York, 1951), 7th edition

- [25] Mathews. J & Walker, RL., *Mathematical Methods of Physics*, 2 nd. Edition, 1973, W. A. Benjamin. Menlo Park, California, 73-75.
- [26] Spiegel, MR., “ *Manual de Fórmulas e tabelas Matemáticas*”, Mc-Graw-Hill, 1973, Brasil.