UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

Flávio Frois de Oliveira

Densidade espectral da impureza
para o modelo de Anderson

São Carlos
2012

FLÁVIO FROIS DE OLIVEIRA

Densidade espectral da impureza para o modelo de Anderson

Dissertação Apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo para a obtenção do Título de Mestre em Ciências.

Área de Concentração: Física Básica

Orientador: Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

Versão Corrigida
(versão original disponível na Unidade que aloja o Programa)

São Carlos
2012

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Biblioteca e Informação do IFSC,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Frois de Oliveira, Flávio

Densidade Espectral da impureza para o modelo de Anderson / Flávio Frois de Oliveira; orientador Luiz Nunes de Oliveira - versão corrigida -- São Carlos, 2012.

143 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em Física Básica) -- Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2012.

1. SIAM. 2. Densidade Espectral. 3. Ressonância de Kondo. 4. Grupo de Renormalização Numérico. I. Nunes de Oliveira, Luiz, orient. II. Título.

*Aos meus pais,
pelo carinho e dedicação
sem o qual eu nunca teria conseguido,
eu dedico esta dissertação*

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer acima de tudo, aos meus pais, José Frois e Fátima por todo o carinho, apoio moral e financeiro que me deram. Sem contar as diversas vezes que me refugiei em minha cidade natal (Caraguatatuba) nos momentos críticos do mestrado. Sem isso, eu nunca teria conseguido finalizar essa dissertação. Espero em breve conseguir retribuir um ínfimo de toda dedicação cega e carinho que recebi. É com alegria que presto minha homenagem a eles e os ofereço essa dissertação.

Gostaria de agradecer ao meu orientador Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira, com o qual tive a imensa honra e prazer de trabalhar todos esses anos e pela dedicação, paciência e fantástico conhecimento com que me conduziu nesse trabalho de mestrado.

Ao Prof. Dr. Makoto Yoshida que confeccionou o código numérico (SIAM) com o qual diagonalizamos o Hamiltoniano de Anderson e obtivemos parte importante dos dados numéricos do trabalho. Embora eu não o conheça pessoalmente, mando meus sinceros agradecimentos.

A toda cortesia dos autores e editoras que foram muito gentis em autorizarem a utilização de suas figuras no capítulo 1 e 2. Em especial ao próprio Luiz Nunes e ao professor Xi Chen que gentilmente cedeu a Fig. 1.5

Agradeço ao meu irmão Eduardo, minha cunhada Ana e ao maior presente que pude receber deles, minha linda sobrinha Olívia, que tanto amo e sinto saudades. Também quero agradecer aos meus avós por parte de mãe (Santina e Fatura), e por parte de pai ,Dito Frois e Teresinha (*in memoriam*) que nunca deixaram de torcer por mim. Por fim, a todo o resto de minha família que de uma forma ou de outra, acreditaram em meu trabalho.

Agradeço a Fernando Henrique (Presidente), por disponibilizar o modelo Latex com o qual escrevi a dissertação, Rodrigo (Troféu) pelas boas discussões sobre Física. Alguns dos ex moradores de reps por onde passei, em especial ao Daniel(Boné) e Alexandre. Heloísa, que mesmo longe acreditou em mim, apoiou, dividiu e me ajudou a superar os piores momentos. Arthur, meu melhor amigo que cresceu comigo e que participou ativamente de diversos momentos de minha vida. Sidnei e Ana, pais do Arthur, que sempre foram tão gentis e me acolheram nas minhas idas e vindas de São Paulo (sem falar de todas nossas longas e boas conversas). Também agradeço a Cristine que que muito me apoiou nesses últimos meses e sempre se colocou a disposição para ajudar. Agradeço a Bia, que embora seja uma carioca *fake*, ainda é minha melhor amiga. E por fim a minha querida amiga Loriz.

Agradeço por fim, os funcionários da biblioteca e secretaria da pós (e graduação), não citarei nomes para não cometer nenhuma injustiça. E a Cris, querida secretaria do grupo. Eles, desde sempre se esforçaram ao máximo para resolver todos meus problemas práticos, com muito sucesso dentro das possibilidades.

RESUMO

OLIVEIRA, F. F. *Densidade espectral da impureza para o modelo de Anderson*. 2011. 143 p. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.

Obtemos a expressão da densidade espectral de uma impureza no modelo de Anderson assimétrico. No regime de Kondo de baixas energias o modelo de Anderson descreve sistemas quânticos com impurezas magnéticas em meios não magnéticos. Para energias características do orbital de impureza simples ou duplamente ocupado iguais a ε_f e $2\varepsilon_f + U$, respectivamente, o modelo é chamado simétrico para $2\varepsilon_f + U = 0$ e assimétrico quando $2\varepsilon_f + U \neq 0$. Para o caso simétrico existe uma expressão devido a Frota que descreve ressonância de Kondo na densidade espectral. Todavia, no caso assimétrico a expressão de Frota deixa de ser válida e é necessária uma nova abordagem. Nesta dissertação, a partir de dados numéricos obtidos pelo consagrado método do Grupo de Renormalização Numérico criado por Wilson em 1974 e de tópicos da física de muitos corpos estudamos a assimetria do modelo de Anderson no regime de Kondo e propomos uma expressão mais geral que a de Frota para a densidade espectral da impureza.

Palavras-chave: SIAM. Densidade espectral. Ressonância de Kondo. NRG

ABSTRACT

OLIVEIRA, F. F. *Spectral density for the impurity in Anderson model*. 2011. 143 p. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.

We propose an analytical expression for the impurity spectral density in the Kondo regime of the spin-degenerate asymmetric Anderson model. The Anderson model describes quantum systems of magnetic impurities in nonmagnetic metals. For characteristic energies of single and double impurity occupations ε_f and $2\varepsilon_f + U$, respectively, the model is particle-hole symmetric for $2\varepsilon_f + U = 0$ and asymmetrical $2\varepsilon_f + U \neq 0$. In the symmetric case, there is an expression due to Frota that describes the Kondo resonance in the spectral density. However, in the asymmetric case Frota's expression is not valid, and a new approach is necessary. In this work, starting with numerical data provided by the Numerical Renormalization Group method developed by Wilson in 1974, we study the asymmetric Anderson model in the Kondo regime and propose an expression for the impurity spectral density that is more general than Frota's.

Key-words: SIAM, Spectral density, Kondo resonance, NRG

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 – Mínimo para a resistividade do Au. O comportamento esperado para metais puros a baixas temperaturas era o de um decaimento proporcional à T^5 , só após alguns anos foi descoberto que o mínimo era devido a presença de impurezas magnéticas em pequenas concentrações no metal, no entanto, a origem do mínimo demorou ainda mais para ser explicada, até que, em 1964 Jun Kondo conseguiu descrever quantitativamente o mínimo(1).Reprinted from Haas et (2), Copyright (1934), with permission from Elsevier. 28

Figura 1.2 – Gráfico da densidade espectral da impureza para o modelo de Anderson com uma impureza como função da energia de excitação. Como parâmetros temos a semilargura da banda de condução é D , energia do orbital da impureza $\varepsilon_f = -0,1D$, semilargura do nível ressonante é $\Gamma = 0.01D$ e a repulsão de Coulomb no orbital duplamente preenchido é dada por $U = 0.15D$, o pico para $\varepsilon = 0$ é a ressonância de Kondo e está fitada pela função Eq. (1.3), os dois outros picos presentes aproximadamente nas energias $-\varepsilon_f - U$ (esquerda) e $-\varepsilon_f$ (direita) são as energias para adicionar e remover um elétron do orbital com ocupação simples. Figura adaptada de (3).Reprinted from (3), Copyright (1991), with permission from Elsevier. 31

Figura 1.3 – a - Perfil topográfico obtido através do STM, os pontos brilhantes (*bright spots*) são devido as impurezas de cobalto (Co) na superfície do Ouro (Au). b - Espectro para com e sem a impureza de Co no metal hospedeiro Au, no segundo caso (curva abaixo) a feição da curva é identificada como sendo a ressonância de Kondo. From (4). Reprinted with permission from AAAS. . . 32

Figura 1.4 – A -Ressonância de Kondo para CoPc(ftalocianina de Cobalto) e para d-CoPc em diferentes temperaturas. A molécula d-CoPc é obtida a partir da CoPc por eliminação de ligações de hidrogênio feitas por indução da ponta do STM (veja os lobos de CoPc que dissociados formam a molécula d-CoPc em B), ao contrário de CoPc a molécula d-CoPc tem ressonância de Kondo a baixa temperatura.B - Figura topográfica tridimensional de CoPc e d-CoPc junto com os correspondentes espectros $\frac{dI}{dV}$ medidos em seus centros. From (5). Reprinted with permission from AAAS. 33

Figura 1.5 – Ressonância de Kondo em molécula de MnPc (ftalocianina de manganês) adsorvida em filmes finos de Pb:a - Moléculas de MnPc montadas em Pb, na imagem inserida ten-se a estrutura molecular de MnPc. b - Esquema mostrando como a molécula de MnPc pode ser movida para várias espessuras de Pb por manipulação da ponta do STM.c - Ressonâncias de Kondo na molécula de MnPc para diversas espessuras do filme de Pb na temperatura de $T = 0.4K$. As curvas vermelhas nos gráficos são dadas pela curva proporcional à expressão de Frota Eq. (1.3) $D(\epsilon) \propto \Re \left(\sqrt{\frac{i\Gamma_K}{\epsilon + i\Gamma_K}} \right)$. Figura retirada de Fu et al. (6) com permissão do autor. 33

Figura 1.6 – Variação de LDOS com a distância lateral da ponta. a - Topografia à corrente constante em STM (1.8nm x 1.8nm,2nA) da impureza de Fe na quarta camada de profundidade. Para a voltagem *bias* negativa a densidade espectral logo acima da impureza é reduzida. Com o aumento da voltagem, a região logo acima da impureza passa a ter uma aparência de platô. b -Seção da condutância diferencial ao longo da direção [010]. A dependência do deslocamento de fase com a energia pode ser observada. A risca vertical preta indica que o deslocamento de fase médio é menor que π . c - Spectro(rox) para 4 distâncias diferentes (A-D marcada com triângulos pretos em (b)), nessas curvas, a linha preta é dada pela equação Eq. (1.4). Reprinted by permission from Macmillan Publishers Ltd: NATURE PHYSICS (7), copyright (2011). 35

- Figura 2.1 – Representação esquemática do modelo de Anderson com uma impureza. A banda de condução é representada por uma banda de largura $2D$ semipreenchida centrada no nível de Fermi $\varepsilon_F = 0$. O estado da impureza pode ter quatro configurações: vazia (representada como f^0 com número de ocupação $n_f = 0$), semipreenchida com um elétron (f^1 e $n_f = 1$, com spin σ *up* ou *down*) ou duplamente ocupado(f^2 e $n_f = 2$) caso em que uma energia de repulsão Coulombiana de intensidade U . Os elétrons dos estados de condução e impureza estão acoplados por um termo de hibridização V que resulta num alargamento das energias da impureza dado por Γ e representado pela cor vermelha na figura. O modelo pode ser simétrico $\varepsilon_f = -\frac{U}{2}$ (o modelo tem simetria partícula-buraco) ou assimétrico $\varepsilon_f \neq -\frac{U}{2}$. Onde $\Delta = \varepsilon_f + U$. 39
- Figura 2.2 – Modelo de Anderson Simétrico. Neste caso $\varepsilon_f = -\frac{1}{2}$ e a simetria é claramente notada na figura, além disso, o Hamiltoniano permanece invariante sob a transformação $c_{k\sigma} \leftrightarrow c_{k\sigma}^\dagger$ e $c_{f\sigma} \leftrightarrow -c_{f\sigma}^\dagger$ e é dado por Eq. (2.7). Uma configuração especial ocorre quando Γ é grande de forma que as imprecisões na largura dos níveis de impureza(representando em vermelho) se cruzem quebrando então a simetria do modelo. 40
- Figura 2.3 – Representação do caso 1. 43
- Figura 2.4 – Densidade espectral para o caso $\Delta = \varepsilon_f + U = -0,05$, o pico na posição ε_2^* é devido a transição $f^2 \rightarrow f^1$, que representa um estado final onde um elétron do estado $n_f = 2$ é excitado para a banda de condução e o segundo elétron fica no estado de energia ε_f (figura adaptada da (8) sob permissão). 43
- Figura 2.5 – Representação do caso 2. 44
- Figura 2.6 – gráfico da densidade espectral para o caso $\Delta = \varepsilon_f + U = -0,005$, note dois picos, um localizado em ε_1^* representando a transição $f^2 \rightarrow f^0$ e o outro em ε_2^* devido a transição $f^1 \rightarrow f^0$. (figura adaptada da (8) sob permissão) . . . 44
- Figura 2.7 – Representação esquemática para o caso onde $\Delta = \varepsilon_f + U = 0,05$ (figura adaptada da (8) sob permissão). 45

Figura 2.8 – Densidade espectral para o caso $\Delta = 0,05$, nesta situação o estado inicial (f^1) tem degenerescência de spin e torna-se importante transições virtuais por via banda de condução entre os estados f^1 e f^2 , para temperaturas $T \ll T_K$ os elétrons da banda de condução interagem com o nível da impureza de forma a blindar este nível, o que causa a ressonância na energia ε_f de semilargura T_K , que é chamada de ressonância de Kondo.(figura adaptada da (8) sob permissão)	46
Figura 3.1 – Trajetórias na proximidade de um ponto fixo. (a) Quando todas trajetórias são convergentes para o ponto fixo dizemos que o ponto fixo é estável.(b)Quando existem trajetórias divergentes do ponto fixo o ponto fixo é classificado como instável	51
Figura 3.2 – Discretização logarítmica da banda de condução no espaço K onde $\Lambda > 0$	53
Figura 3.3 – Discretização logarítmica da banda de condução no espaço K onde $\Lambda > 0$ e z é um novo parâmetro inserido que pode variar entre 0 e 1.	54
Figura 3.4 – Representação da cadeia iterativa semi-infinita onde o primeiro sítio representa a impureza ($n = -1$) e os sítios seguintes representam a banda de condução, ao centro de cada sítio temos o Hamiltoniano para a sua iteração ($H_{-1}, H_0, \dots, H_{n+1}$), note que para passar do Hamiltoniano H_n ao H_{n+1} , precisamos adicionar um sítio a cadeia iterativa.	59
Figura 3.5 – Diagrama para o subespaço (Q, S) na iteração $N = -1$ (índice nos círculos), a carga Q é a ordenada no diagrama e o momento $2S$ é a abscissa. Ao lado de cada círculo temos os possíveis estados de ocupação nessa iteração, e no centro temos o índice que identifica o subespaço (Q, S) .	64
Figura 3.6 – Processo geral de formação de um subespaço de $N + 1$ (círculo) a partir dos autoestados de uma iteração N . Os <i>Kets</i> indicam o autoestado de $N + 1$ formados a partir do autoestado do subespaço N (retângulos) de origem da seta com o autoestado do novo sítio (veja o texto).	66

Figura 3.7 – Diagrama $(Q, 2S)$ para H_0 , as setas azuis indicam a origem dos autoestados de iteração $N = -1$ (semente, círculos na figura) para os novos subespaços de $N = 0$ representado pelos quadrados, os *Kets* mostrados são os autoestado da iteração $N + 1$ que combinam com o autoestado f_0 do novo sítio. Numa futura iteração $N = 1$, as setas agora teriam origem dos quadrados para os novos subespaços. O processo de construção se repete então até uma determinada iteração N 67

Figura 4.1 – Curvas para a variação dos autovalores η_i (com i inteiro entre 1 e 38) do Hamiltoniano H_N com as iterações $N \rightarrow N + 2$. No gráfico mostram-se quatro regiões distintas, N par entre 22 e 30 onde $H_N \rightarrow H_{FI}^*$ (ponto fixo de Acoplamento Forte), N par entre 16 e 6 onde $H_N \rightarrow H_{ML}^*$ (ponto fixo de Momento Local) as regiões N par entre 22 e 16 e $N = 4$ onde ocorre *crossover* de um ponto fixo para outro. Mais informações no texto. 82

Figura 5.1 – 5.1A - Linha de fluxo $\frac{\eta_{20}}{D} \times N$, a curva é obtida a partir de 1000 pontos de uma interpolação dos 130 pontos η_{20} calculados para N par. 5.1B - Curva $\frac{\|\langle F_{20}|c_f|I_{20}\rangle\|^2}{\left|\frac{d\eta_{20}}{dz}\right|} \times N$ respectiva de η_{20}/D obtida por interpolação como 5.1A, a partir dessa curva obteremos um termo do somatório em Eq. (5.5). 88

Figura 5.2 – Intersecção(bola verde) entre a curva de fluxo 5.1A (vermelha) e a reta de ordenada $\varepsilon = 10^{-5}D$ (azul). A partir da intersecção é obtido um ponto da curva de $\frac{\|\langle F_l|c_f|I\rangle\|^2}{\left|\frac{d\eta_l}{dz}\right|}$ (Fig. 5.1B) usado no somatório em Eq. (5.5). Esse método de intersecção é repetido para as curvas provenientes de cada termo do somatório Eq. (5.5), variando os ε 's e N 's que definem a janela no gráfico (cruzamento entre as retas pontilhadas magentas e cinzas). Para todas as janelas $N \rightarrow N + 2$ com N par, varremos todo o espectro de energia e construímos o gráfico da densidade espectral $\rho(\varepsilon)$ (veja o texto). 90

Figura 5.3 – Densidade espectral do Modelo de Anderson Simétrico. A abcissa foi escolhida de forma alargar o gráfico próximo a $\varepsilon = 0$. As bolas azuis são os dados obtidos pelo método explicado no texto e a curva vermelha é o gráfico da expressão fenomenológica de Frota Eq. (5.1). 92

Figura 5.4 – Densidade espectral para o modelo de Anderson assimétrico. A - Gráfico nas escala linear onde as bolas azuis são os pontos obtidos numericamente e foram plotados juntamente com a curva vermelha dada expressão de Frota $\rho_f^S(\varepsilon) = \frac{2}{\pi\Gamma} \Re \sqrt{\frac{i\Gamma_K}{\varepsilon + i\Gamma_K}}$, os parâmetros usados estão indicados no gráfico. B - Gráfico na escala logarítmica para o lado dos buracos (correspondendo ao lado esquerdo do gráfico em A). C - Gráfico na escala logarítmica para o lado das partículas (correspondendo ao lado direito do gráfico em A). As diferenças dos pontos com relação a curva vermelha são bem perceptíveis e pode-se concluir que a expressão simétrica encontrada por Frota deixa de ser válida nesse caso(vide o texto). 94

Figura 6.1 – Densidade espectral para o modelo de Anderson assimétrico. As bolas azuis são os pontos obtidos numericamente e foram plotados juntamente com a curva vermelha dada pela expressão Eq. (6.1). Os parâmetros estão indicados no gráfico. Assim como no gráfico Fig. 5.3, usamos um eixo horizontal dado por $\sqrt{\varepsilon}$ para alargar o pico de Kondo e facilitar a visualização. A Eq. (6.1) descreve muito melhor os resultados numéricos do que a curva sólida na Fig. 5.4A 102

Figura 6.2 – Densidade espectral para o modelo de Anderson assimétrico na escala logarítmica. 6.2A - Gráfico para o lado dos buracos(lado esquerdo de 6.1). 6.2B - Lado das partículas (lado direito de 6.1). Comparando esses gráficos com os 5.4B e 5.4C temos que mesmo havendo oscilações nos dados numéricos que dificultam um pouco a interpretação, no geral, o acordo entre a curva proposta Eq. (6.1) e os pontos numéricos é bom, praticamente não existindo o deslocamento para esquerda dos pontos numéricos azuis para os pontos da curva vermelha proposta. 103

Figura 6.3 – Gráficos comparativos entre as expressões dos casos simétrico e assimétrico. Os parâmetros são os mesmos de todos os gráficos assimétricos anteriores. 6.3A - Densidade espectral na escala linear, note que assim como afirmado 5.4A ρ_f^{AS} é ligeiramente rotacionado no sentido horário comparado à ρ_f^S que é simétrico com relação ao eixo passando em $E_F = 0$. 6.3B - Um *zoom* do gráfico 6.3A já é o suficiente para mostrar que discrepância entre as curvas está presente em praticamente todo o espectro de energias além de enfatizar o descrito para 6.3A. 6.3C - Escala logarítmica para a parte das partículas mostra o deslocamento no sentido esquerdo da região de *crossover* da curva assimétrica com relação a simétrica. Para as regiões próximas aos pontos fixos, é notável que a curva assimétrica se encontra abaixo da simétrica para a FI e que ambas se cruzam invertendo a situação em LM. 6.3D- Gráfico loglog no qual podemos ver o exato ponto onde ρ_f^S e ρ_f^{AS} se cruzam, todavia para a região de cruzamento ambas as curvas já não descrevem corretamente os pontos obtidos numericamente (veja Fig. 5.4C e Fig. 6.2B). 104

Figura 6.4 – Erro entre os dados numéricos do caso assimétrico e as expressões de ρ_f . **A-** Gráfico para o lado dos buracos (lado esquerdo de 6.1). **B -** Gráfico para o lado das partículas (lado esquerdo de 6.1). Em geral nota-se que os erros da expressão ρ_f^{As} (bolas azuis) por nós proposta é menor que o erro para a fórmula de Frota (bolas vermelhas) para praticamente todas as ordens de ε . 105

Figura C.1 – Gráfico para calcular ω_1 . Nesse gráfico, cada ponto representa a energia para um dos valores $N = 21, 23, 25, 27$, e 29 calculados pela diagonalização do modelo com potencial espalhador $\tilde{W} = 0.09184$, como coeficiente angular, foi obtido o valor de $\omega_1 \simeq -575915.14094$ 131

LISTA DE SIGLAS

AF	Acoplamento Forte
FI	<i>Frozen Impurity</i>
LM	Local Moment
NRG	Numerical Renormalization Group
OL	Orbital Livre
QD	<i>Quantum Dot</i> (Ponto Quântico)
RKKY	Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida
SIAM	<i>Single-Impurity Anderson Model</i> (nome do programa que usamos para diagonalizar o Hamiltoniano de Anderson.)
STM	<i>Scanning Tunneling Microscopy</i>

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 – Tabela 1: Autoestados do Hamiltoniano H_{-1}	61
Tabela 3.2 – Autoestados e Energias separado por setores (Q, S) no Hamiltoniano H_0 no Modelo de Anderson Simétrico.(Tabela adaptada da referência (9)).	63
Tabela 4.1 – Informações sobre o Hamiltoniano da Banda Livre H_N^0 adaptado de Krishnamurthy et al. (10). Na tabela $H_N^0, Q_N^0, S_N^0, f_{0\sigma}$ e $f_{1\sigma}$ estão escritos usando os elementos da matriz $\mathbb{M}(\alpha_{nj})$ e dos operadores de criação e destruição para buracos h ou partículas g , note que para $N+1$ ímpar existe o operador g_0 que cria(destrói) uma partícula no estado central. Mais abaixo na tabela, temos os limites para N grande e $j \gg 1$ das energias $(\eta_j), \hat{\eta}_j$ além dos elementos de matriz $\alpha_{0j}, \alpha_{1,j}, \dots$ etc.	73
Tabela A.1 – Tabela para cálculo dos coeficientes de Clebsch e Gordan.	117
Tabela B.1 – Estados e energias de $H_{N,FI}^{eff} (\tilde{W} < 0)$.(Tabela adaptada da (9)).	125

SUMÁRIO

1	Introdução	27
2	Modelo de Anderson	37
2.1	Características Gerais	37
2.2	Modelo de Anderson Simétrico	40
2.3	Limite de Kondo.	41
2.4	Densidade Espectral no Modelo de Anderson	42
3	O Grupo de Renormalização Numérico	49
3.1	O Grupo de Renormalização	50
3.2	Introdução ao Grupo de Renormalização Numérico.	52
3.3	Discretização da Banda de Condução	53
3.4	Definição da Base Discreta	55
3.5	Truncamento	57
3.6	Diagonalização	59
3.7	Cálculos Analíticos para H_{-1} e H_0	61
3.8	Cálculo Computacional para H_N	64
4	Pontos fixos para o Modelo de Anderson.	71
4.1	Hamiltoniano de Banda Livre	71
4.2	Hamiltoniano da Banda Livre com um Potencial Espalhador	74
4.3	Modelo do Nível Ressonante	76
4.4	Pontos Fixos do Modelo de Anderson Simétrico	77
4.5	Pontos Fixos do Modelo de Anderson Assimétrico	79
4.6	Níveis de Energia para o Hamiltoniano H_N	81
5	Densidade Espectral no Modelo de Anderson Simétrico	85
5.1	Cálculo Numérico da Densidade Espectral.	86
5.2	Caso Simétrico	92

5.3	Comparação entre os Casos Simétrico e Assimétrico	93
5.4	Expressão Para $\rho_f(\varepsilon)$ no Modelo de Anderson Assimétrico	95
6	Resultados	101
6.1	Densidade Espectral no Modelo de Anderson Assimétrico	101
7	Conclusão	107
	Referências	111
	Apêndice A Cálculo dos Elementos Invariantes	115
	Apêndice B Hamiltonianos Efetivos	123
	Apêndice C Determinação Numérica das Constantes Γ_K	
	e δ	127
C.1	Cálculo de δ	127
C.2	Cálculo de Γ_K	128
	Apêndice D Auto-Operadores do Hamiltoniano de Anderson Assimétrico	133
	Apêndice E Função de Green Para o Hamiltoniano de Anderson	137
	Apêndice F Densidade Espectral nos Pontos Fixos	141

Introdução

Nas últimas décadas tem havido um grande interesse em sistemas físicos relacionados com impurezas magnéticas em meios não magnéticos. Uma impureza magnética, tanto pode ser um metal de transição com o seu último orbital semi preenchido, um íon de Fe que interage com os elétrons de condução em um metal hospedeiro de Au, por exemplo, como pode ser um ponto quântico entre dois fios quânticos (um conjunto que descreveremos mais adiante).

Sistemas como os descritos acima podem ser representados pelo modelo de Anderson* (11). Esta dissertação irá focar no modelo de Anderson para uma impureza, mais especificamente a densidade espectral em baixas energias, bem menores que a largura de banda.

A manifestação de impurezas magnéticas diluídas em metais tem sido notada há mais de 70 anos, desde o início dos anos 30 quando de Haas et al. (2) encontraram uma anomalia ao medir a resistividade a baixas temperaturas em metais supostamente puros em que se esperava um decaimento com a temperatura regido por um termo T^5 .

*Proposto por Anderson em 1961 inicialmente para representar impurezas magnéticas em metais.

Figura 1.1 – Mínimo para a resistividade do Au. O comportamento esperado para metais puros a baixas temperaturas era o de um decaimento proporcional à T^5 , só após alguns anos foi descoberto que o mínimo era devido a presença de impurezas magnéticas em pequenas concentrações no metal, no entanto, a origem do mínimo demorou ainda mais para ser explicada, até que, em 1964 Jun Kondo conseguiu descrever quantitativamente o mínimo(1). Reprinted from Haas et (2), Copyright (1934), with permission from Elsevier.

Embora pouco tempo depois tenha-se descoberto que essa anomalia era devido a impurezas magnéticas diluídas na liga metálica, ainda se passaram anos sem uma explicação plausível para o fenômeno, até que Kondo em 1964 (1) usou um Hamiltoniano que considerava um termo de acoplamento $H_{int} = J\vec{S}_1 \cdot \vec{s}_c(0)$, controlado pela constante $J > 0$ (acoplamento antiferromagnético) entre o momento magnético local $\vec{S}_1$ da impureza simples e o spin dos elétrons de condução na impureza $\vec{s}_c(0)$. Por meio de cálculos perturbativos de segunda ordem na interação, Kondo mostrou que a resistividade devido interação entre os elétrons e o spin da impureza é dado, por

$$R_{spin} = \frac{3\pi m c_{imp} J^2 S(S+1)(V/N)}{2e^2 \hbar E_F} \left\{ 1 + \left(\frac{3zJ}{E_F} \right) \log(T) \right\} \quad (1.1)$$

onde z é o número de elétrons de condução por átomo, m é a massa, V denota o volume do cristal e E_F é a energia de Fermi. Para a resistividade total do metal Kondo escreveu a expressão fenomenológica a seguir

$$R(T) = aT^5 + c_{imp}R_0 - c_{imp}R_1 \log(T) \quad (1.2)$$

com c_{imp} sendo a concentração da impureza. Na Eq. (1.2) o primeiro termo é a contribuição de fônons, o segundo termo independe da temperatura e o terceiro vem da contribuição de segunda ordem no espalhamento do spin de condução, devido ao momento local da impureza. Derivando obtém-se para a temperatura mínima $T_{min} \sim c_{imp}^{1/5}$, em concordância com os resultados.

Todavia, para $T \rightarrow 0$ o termo dependente da temperatura em Eq. 1.1 diverge, representando uma quebra no tratamento perturbativo. É necessária uma nova abordagem para baixas energias. Tais termos logarítmicos também apareceram no cálculo da suscetibilidade, calor específico e outras propriedades físicas. Este novo problema ficou conhecido como "Problema de Kondo" e atraiu a atenção da comunidade científica da época. Neste contexto foi definida a temperatura T_K que marca o ponto de mínimo na resistividade.

Pouco depois foi mostrado (12) que as divergências devido aos termos logarítmicos estão ligadas a um espalhamento ressonante na energia de Fermi. Como consequência para a densidade espectral surge uma ressonância estreita centrada no nível de Fermi, que passou a ser chamada de Ressonância de Abrikosov-Suhl ou Ressonância de Kondo e representa a "impressão digital" (7) do efeito Kondo que foi confirmada experimentalmente décadas depois.

O problema de Kondo ficou sem solução até que K. G. Wilson (13, 14) nos anos de 1974 e 1975 criou um método não perturbativo totalmente original, o Grupo de Renormalização numérico (Numerical Renormalization Group (NRG)), que tomou como base a teoria de grupo de renormalização, que já se mostrara poderosa ao tratar fenômenos críticos. Com esse método numérico, Wilson conseguiu calcular a susceptibilidade magnética da impureza em função da temperatura.

O NRG (detalhes no capítulo 3) parte de uma discretização logarítmica da banda de condução o qual visa preservar a invariância de escala da banda de condução. Permitindo, após uma transformação de Lanczos, escrever o Hamiltoniano do sistema como uma cadeia

iterativa tal que para cada iteração sejam adicionadas energias de escalas menores sem que sejam necessárias aproximações nos termos dependentes da impureza, o que garante uma boa descrição do efeito da impureza sobre a banda de condução do metal.

Originalmente o NRG foi aplicado para propriedades termodinâmicas. Em 1980 Krishna-murthy et al. (10, 9) descreveram diversas características do sistema (tais como o comportamento nos pontos fixos) e calcularam suscetibilidade magnética no modelo de Anderson com uma impureza. Em 1983 através do método de Bethe Ansatz (15, 16, 17, 18) foram obtidos resultados analíticos que confirmaram os cálculos de Wilson e de Krishna-murthy et al.

O sucesso estrondoso das primeiras aplicações do NRG motivaram uma série de novos trabalhos como estudos no problema de duas impurezas e cálculos de propriedades dinâmicas. O problema de duas impurezas foi investigado usando NRG primeiramente por Jones et al. (19, 20, 21). Esse problema considera duas impurezas localizadas no meio metálico e separadas por uma distância R , e neste modelo, além da interação antiferromagnética entre os elétrons do meio metálico e a impureza, surge um acoplamento dipolar entre os spins das impurezas, chamado interação Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY).

Os cálculos de propriedades dinâmicas foram realizadas primeiramente por Oliveira e Wilkins (22, 23) nos anos de 1981 e 1985. Eles que calcularam a absorção e fotoemissão na temperatura zero, o que significa considerar apenas transições do estado fundamental no problema da absorção de raios-X.

Em 1986, Frota e Oliveira, introduziram um novo parâmetro na discretização logarítmica usada por Wilson, o que permitiu obter a curva para a densidade espectral no modelo de Anderson com uma impureza para o caso simétrico (no qual existe uma simetria entre estados de partículas e estados de buraco). Nesse mesmo artigo foi proposto uma expressão universal para essa densidade espectral no regime de Kondo como função da semilargura média da ressonância de Kondo Γ_K e da taxa de troca Γ como mostrado abaixo.

$$\rho_f^S(\varepsilon) = \frac{2}{\pi\Gamma} \Re \sqrt{\frac{i\Gamma_K}{\varepsilon + i\Gamma_K}} \quad (1.3)$$

E embora a Eq. (1.3) seja eficiente no caso simétrico, ela deixa de ser válida no caso assimétrico, sendo necessária uma nova expressão para este caso, o que é o principal objetivo nessa dissertação.

Figura 1.2 – Gráfico da densidade espectral da impureza para o modelo de Anderson com uma impureza como função da energia de excitação. Como parâmetros temos a semilargura da banda de condução é D , energia do orbital da impureza $\varepsilon_f = -0,1D$, semilargura do nível ressonante é $\Gamma = 0.01D$ e a repulsão de Coulomb no orbital duplamente preenchido é dada por $U = 0.15D$, o pico para $\varepsilon = 0$ é a ressonância de Kondo e está fitada pela função Eq. (1.3), os dois outros picos presentes aproximadamente nas energias $-\varepsilon_f - U$ (esquerda) e $-\varepsilon_f$ (direita) são as energias para adicionar e remover um elétron do orbital com ocupação simples. Figura adaptada de (3). Reprinted from (3), Copyright (1991), with permission from Elsevier.

Os cálculos de funções espectrais para temperaturas finitas é relativamente mais complicada, uma vez que agora é possível ocorrer excitações entre estados fora do estado fundamental. Assim, não se dispõe de cálculo preciso da densidade espectral ou de expressão analítica. Houve, no entanto, progresso na direção do cálculo de propriedades de transporte, o que permitiu uma grande gama de aplicações[†]. Entre os desenvolvimentos

[†]Um bom sumário para todas as aplicações do NRG é encontrado na referência (24)

estão o uso de matriz densidade com NRG (25), adaptações do NRG para cálculos do modelo de Anderson na presença de impurezas (26), cálculos de grandezas fora equilíbrio (27, 28, 29) e o cálculos usando a teoria dinâmica de campo médio(30)(DMFT).

Já no final do século XX e início do século XXI, ocorreu um grande boom no estudo de sistemas quânticos de impurezas, isto graças a evolução da nanotecnologia que permitiu a fabricação de dispositivos utilizando pontos quânticos (*Quantum Dot* (QD)) e dos avanços da Spectroscopia de Tunelamento por varredura (*Scanning Tunneling Microscopy* (STM)) com o qual os físicos experimentais passaram a ter acesso individual às impurezas com uma alta resolução espacial e de energia (31, 32).

Figura 1.3 – a - Perfil topográfico obtido através do STM, os pontos brilhantes (*bright spots*) são devido as impurezas de cobalto (Co) na superfície do Ouro (Au). b - Espectro para com e sem a impureza de Co no metal hospedeiro Au, no segundo caso (curva abaixo) a feição da curva é identificada como sendo a ressonância de Kondo. From (4). Reprinted with permission from AAAS.

Dentro da área de principal interesse desta dissertação, ressonância de Kondo na densidade espectral, diversos trabalhos foram feitos. Podemos destacar trabalhos no sentido de controlar o efeito Kondo por ligações químicas(5) (Fig. 1.4), manipular o efeito Kondo através da espessura do filme no qual a impureza é adsorvida(6)(Fig. 1.5) ou ao colocar o átomo da impureza dentro de uma estrutura ressonante(33). Nesse caso, a impureza é posta em um dos centros de uma elipse formada por pontos quânticos e induz o surgimento de duas ressonâncias de Kondo, uma devido a interação com os átomos da banda

de condução na posição da impureza e outra no outro foco (mesmo não havendo impureza lá) devido a simetria da elipse em um efeito chamado miragem quântica.

Figura 1.4 – A -Ressonância de Kondo para CoPc(ftalocianina de Cobalto) e para d-CoPc em diferentes temperaturas. A molécula d-CoPc é obtida a partir da CoPc por eliminação de ligações de hidrogênio feitas por indução da ponta do STM (veja os lobos de CoPc que dissociados formam a molécula d-CoPc em B), ao contrário de CoPc a molécula d-CoPc tem ressonância de Kondo a baixa temperatura. B - Figura topográfica tridimensional de CoPc e d-CoPc junto com os correspondentes espectros $\frac{dI}{dV}$ medidos em seus centros. From (5). Reprinted with permission from AAAS.

Figura 1.5 – Ressonância de Kondo em molécula de MnPc (ftalocianina de manganês) adsorvida em filmes finos de Pb: a - Moléculas de MnPc montadas em Pb, na imagem inserida tem-se a estrutura molecular de MnPc. b - Esquema mostrando como a molécula de MnPc pode ser movida para várias espessuras de Pb por manipulação da ponta do STM. c - Ressonâncias de Kondo na molécula de MnPc para diversas espessuras do filme de Pb na temperatura de $T = 0.4K$. As curvas vermelhas nos gráficos são dadas pela curva proporcional à expressão de Frota Eq. (1.3) $D(\epsilon) \propto \Re \left(\sqrt{\frac{i\Gamma_K}{\epsilon + i\Gamma_K}} \right)$. Figura retirada de Fu et al. (6) com permissão do autor.

Por fim é importante falar sobre o trabalho de Prüser et al (7), já em 2011, que trata dependência espacial da ressonância Kondo por meio de medidas de STM em uma superfície de Cu com impurezas de Fe ou Co. Prüser et al conseguiram medir o efeito de impurezas localizadas várias camadas abaixo da superfície, para diversas profundidades e distâncias laterais em relação à posição da impureza, como mostra a Fig. 1.6. Para analisar os resultados experimentais, os autores empregaram a seguinte expressão para a densidade de estados no local em que se encontra a ponta de prova

$$\Delta LDOS(\varepsilon, r) \propto \Im \left[i e^{i\phi_q(r)} \sqrt{\frac{i\Gamma_F}{\varepsilon - \varepsilon_K + i\Gamma_F}} \right] \quad (1.4)$$

sendo $\phi_q(r) = K_F r$ onde $r = |\vec{x} - \vec{x}_{imp}|$, com $\vec{x}_{imp}$ a posição da impureza, ε_K posição da ressonância de Kondo e Γ_F proporcional à largura da ressonância. Esta expressão apresentou resultados satisfatórios nas aplicações do artigo.

A Eq. (1.4) leva em conta que a ponta do STM está em uma posição $\mathbf{x}' = (x, y, h)$, a uma altura h acima da estrutura cristalina, enquanto a impureza está localizada no ponto $\mathbf{x} = (0, 0, -d)$, a uma profundidade d abaixo da superfície do cristal. Assim, a corrente que chega à ponta de prova é proporcional à parte imaginária da função de Green que se obtém multiplicando-se i vezes a raiz quadrada à direita na Eq. (1.3) pelo propagador livre $G^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \varepsilon)^\dagger$ desde a posição da impureza até a posição da ponta de prova. O propagador livre foi aproximado por $G^0(r) \approx e^{i\phi_q(r)}$ independente da energia, já que os momentos dos elétrons envolvidos é praticamente igual a k_F .

Cabem duas críticas à obtenção da Eq. (1.4) na Ref. (7). Em primeiro lugar, em vez de ser derivada, a igualdade é escrita por analogia com uma expressão formal para a densidade espectral obtida a partir de tratamento perturbativo, que não é válido no regime Kondo. Além disso, a analogia toma por base a Eq. (1.3), que somente é válida para o modelo simétrico de Anderson.

[‡]O propagador livre $G^0(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \varepsilon)$ descreve como um elétron de energia ε se propaga de um ponto $\mathbf{x}$ do espaço a um ponto $\mathbf{x}'$.

Figura 1.6 – Variação de LDOS com a distância lateral da ponta. a - Topografia à corrente constante em STM (1.8nm x 1.8nm, 2nA) da impureza de Fe na quarta camada de profundidade. Para a voltagem *bias* negativa a densidade espectral logo acima da impureza é reduzida. Com o aumento da voltagem, a região logo acima da impureza passa a ter uma aparência de platô. b - Seção da condutância diferencial ao longo da direção [010]. A dependência do deslocamento de fase com a energia pode ser observada. A risca vertical preta indica que o deslocamento de fase médio é menor que π . c - Spectro(roxos) para 4 distâncias diferentes (A-D marcada com triângulos pretos em (b)), nessas curvas, a linha preta é dada pela equação Eq. (1.4). Reprinted by permission from Macmillan Publishers Ltd: NATURE PHYSICS (7), copyright (2011).

Essa retrospectiva mostra que há interesse em uma generalização da expressão de Frota para a densidade espectral. Aqui nesta dissertação estaremos focados na obtenção de uma expressão universal para a densidade espectral da impureza, válida em todo o regime de Kondo.

O trabalho todo é dividido em 7 capítulos, sendo os três primeiros relacionados a introdução, teoria do NRG, pontos fixos e características do modelo de Anderson; e os quatro finais usados para a demonstração da expressão proposta da densidade espectral, técnica numérica, resultados numéricos e conclusões finais. Além disso, cálculos e alguns detalhes adicionais serão expostos numa série de apêndices.

Modelo de Anderson

2.1 Características Gerais

O modelo de Anderson(11) descreve a presença de impurezas magnéticas diluídas em baixas concentrações em um metal hospedeiro ou sistemas equivalentes (como explicado no capítulo 1). É representado por um Hamiltoniano de muitos corpos escrito composto por três termos:

1. Um termo que denota a banda de condução do metal hospedeiro, como uma banda semi-preenchida de largura $2D$ centrada no nível de Fermi $E_F = 0$ com elétrons não interagentes de energia $\varepsilon_{\vec{k}}$ e momento $\vec{k}$, isotrópica ($\varepsilon_{\vec{k}} = \varepsilon_k$) com relação de dispersão linear $\varepsilon_k = \nu_F k$, onde ν_F é a velocidade de Fermi.

$$H_{bc} = \sum_k \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \quad (2.1)$$

Aqui $c_{k\sigma}^\dagger(c_{k\sigma})$ cria(destrói) um elétron de spin $\sigma = \pm \frac{1}{2}$ na banda de condução.

2. Um segundo termo representando o orbital da impureza localizado com quatro configurações eletrônicas possíveis(vide Fig. 2.1), vazio (energia nula), preenchido por um elétron com degenerescência de spin σ^* (energia ε_f) e preenchido com 2 elétrons de spins opostos. No último caso existe uma interação repulsiva de Coulomb entre

*Muitas vezes para facilitar a notação não escreveremos este índice em operadores de criação(destruição). Fica nesse caso o índice subentendido.

os dois elétrons com intensidade U , resultando na energia $2\varepsilon_f + U$. O sub-índice f denota o orbital da impureza.

$$H_{imp} = \varepsilon_f c_f^\dagger c_f + U c_{f\uparrow}^\dagger c_{f\uparrow} c_{f\downarrow}^\dagger c_{f\downarrow} \quad (2.2)$$

3. E por último um termo de hibridização entre os elétrons banda de condução e orbital localizado da impureza (interação $s - d$), caracterizado pelo elemento de matriz não diagonal V ,

$$H_{sd} = V \sum_k (c_k^\dagger c_f + c_f^\dagger c_k) \quad (2.3)$$

Esse termo permite trocas entre os elétrons da banda de condução e os elétrons do nível localizado da impureza. Embora o acoplamento devesse depender de k , a teoria do grupo de renormalização mostra que essa dependência não afeta o comportamento universal das propriedades físicas do modelo(10). Assim, sem prejudicar nossa análise, podemos dessa forma, escrever o Hamiltoniano de Anderson como:

$$H_A = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k + \varepsilon_f c_f^\dagger c_f + U c_{f\uparrow}^\dagger c_{f\uparrow} c_{f\downarrow}^\dagger c_{f\downarrow} + V \sum_k (c_k^\dagger c_f + c_f^\dagger c_k) \quad (2.4)$$

E o sistema pode ser representado em forma esquemática como na Fig. 2.1.

Figura 2.1 – Representação esquemática do modelo de Anderson com uma impureza. A banda de condução é representada por uma banda de largura $2D$ semipreenchida centrada no nível de Fermi $\varepsilon_F = 0$. O estado da impureza pode ter quatro configurações: vazia (representada como f^0 com número de ocupação $n_f = 0$), semipreenchida com um elétron (f^1 e $n_f = 1$, com spin σ *up* ou *down*) ou duplamente ocupado (f^2 e $n_f = 2$) caso em que uma energia de repulsão Coulombiana de intensidade U . Os elétrons dos estados de condução e impureza estão acoplados por um termo de hibridização V que resulta num alargamento das energias da impureza dado por Γ e representado pela cor vermelha na figura. O modelo pode ser simétrico $\varepsilon_f = -\frac{U}{2}$ (o modelo tem simetria partícula-buraco) ou assimétrico $\varepsilon_f \neq -\frac{U}{2}$. Onde $\Delta = \varepsilon_f + U$.

A taxa de transição entre os elétrons da banda de condução e da impureza obtida da regra ouro de Fermi e é dada por $\Gamma = \pi \rho V^2$ (34), onde ρ é a densidade de estados no nível de Fermi, constante, Γ é a largura do nível da impureza, isto é, a incerteza da energia do elétron neste orbital.

Para facilitar a notação do Hamiltoniano Eq. (2.4), definimos o operador f_0 dado por:

$$f_0 \equiv \sum_k c_k \quad (2.5)$$

assim o Hamiltoniano de Anderson Eq. (2.4) assume a forma

$$H_A = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k + \varepsilon_f c_f^\dagger c_f + U c_{f\uparrow}^\dagger c_{f\uparrow} c_{f\downarrow}^\dagger c_{f\downarrow} + V (f_0^\dagger c_f + c_f^\dagger f_0) \quad (2.6)$$

2.2 Modelo de Anderson Simétrico

Um caso particularmente importante é $\varepsilon_f = -\frac{U}{2}$, ou seja, o orbital duplamente ocupado esta degenerado com o orbital vazio como mostrado na Fig. 2.2. Este é modelo de Anderson simétrico, no qual H_A apresenta simetria partícula buraco, isto é, o Hamiltoniano permanece invariante sob a transformação $c_{-k} \leftrightarrow c_k^\dagger$ e $c_f \leftrightarrow -c_f^\dagger$. Podemos assim modificar a energia do Hamiltoniano da impureza Eq. (2.2) trocando $\varepsilon_f \rightarrow -(\varepsilon_f + U)$ resultando no Hamiltoniano de Anderson escrito como :

$$H_A^S = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k + \frac{V}{N} (f_0^\dagger c_f + c_f^\dagger f_0) - \frac{U}{2} (c_{f\uparrow}^\dagger c_{f\uparrow} - c_{f\downarrow}^\dagger c_{f\downarrow})^2 \quad (2.7)$$

Figura 2.2 – Modelo de Anderson Simétrico. Neste caso $\varepsilon_f = -\frac{1}{2}$ e a simetria é claramente notada na figura, além disso, o Hamiltoniano permanece invariante sob a transformação $c_{k\sigma} \leftrightarrow c_{k\sigma}^\dagger$ e $c_{f\sigma} \leftrightarrow -c_{f\sigma}^\dagger$ e é dado por Eq. (2.7). Uma configuração especial ocorre quando Γ é grande de forma que as imprecisões na largura dos níveis de impureza (representando em vermelho) se cruzem quebrando então a simetria do modelo.

2.3 Limite de Kondo.

Como vimos na seção anterior, as escalas de energia U e Γ determinam o comportamento no Modelo de Anderson. Nesta dissertação, daremos ênfase ao caso $U \gg \Gamma$ $|\varepsilon_f|, \Gamma \ll D$ no qual o orbital da impureza a baixas energias está em uma das configurações f^1 (com *spin up* ou *down*). Com esses valores de U e Γ , transições virtuais entre os estados da banda de condução e a impureza são permitidas, resultando em um acoplamento antiferromagnético entre os elétrons da banda e o estado da impureza. O Hamiltoniano resultante fica da forma:

$$H_K = \sum_{k=0} \varepsilon_k c_k c_k^\dagger + 2J \sum_{\sigma\nu} f_{0\sigma}^\dagger \vec{\sigma}_{\sigma\nu} f_{0\sigma} \cdot \vec{S} \quad (2.8)$$

$\vec{S}$ é o operador de *spin* da impureza, $\vec{\sigma}$ tem como componentes as matrizes de Pauli $\vec{\sigma} = \sigma_x \hat{x} + \sigma_y \hat{y} + \sigma_z \hat{z}$ e J é uma constante de acoplamento antiferromagnético.

Este Hamiltoniano Eq. (2.8) foi diagonalizado pela primeira vez por Wilson (14). No limite de $U \gg \Gamma$ Schrieffer e Wolff (35) obtiveram a equivalência entre o Hamiltoniano de Anderson e o Hamiltoniano de Kondo e calcularam o acoplamento J como

$$J = \frac{2\Gamma}{\rho\pi} \frac{U}{|\varepsilon_f|(\varepsilon_f + U)} \quad (2.9)$$

onde ρ é a densidade de estados em torno da energia de Fermi, No regime de baixas energias aparece já em tratamento perturbativos uma temperatura característica T_K , dado por

$$T_K \sim \sqrt{\rho J} \exp\left(\frac{-1}{\rho J}\right) \quad (2.10)$$

Abaixo dessa temperatura estaremos dentro do regime de Kondo. Acima dela haverá uma transição entre esse regime com o de maiores energias. Aqui estaremos preocupados com o cálculo da densidade espectral no regime de Kondo.

Outro resultado importante é que para o sítio da impureza as energias de condução são deslocadas por uma fase δ . No caso simétrico $\delta = \frac{\pi}{2}$ enquanto que para o modelo de Anderson assimétrico $\delta < \frac{\pi}{2}$. Esta defasagem vem da Regra da Soma de Friedel (34)(36) que no modelo de Anderson foi obtida por Langret(37). Ela representa a conservação da neutralidade da carga no metal. Ao adicionarmos uma impureza em um gás de elétrons, temos que deslocar cargas eletrônicas e este deslocamento ocorre de maneira a cancelar exatamente a carga da impureza, este efeito resulta em um fator de fase δ para as energias.

2.4 Densidade Espectral no Modelo de Anderson

Apesar de parecer simples, o Modelo de Anderson guarda uma grande riqueza física devido às diferentes configurações que podem ter as energias características do sistema. Vamos aqui trabalhar com três casos específicos e mostraremos qualitativamente o que ocorre em cada caso com relação à densidade espectral. Para isso vamos usar os resultados obtidos por Oliveira e Frota (8)

O estado da impureza pode assumir qualquer uma das configurações $n_f = 0$ (configuração f^0), $n_f = 1(f^1)$ ou $n_f = 2(f^2)$ e Γ representa a taxa de hibridização da configuração f^1 com as configurações f^0 e f^2 . Vamos aqui calcular a taxa de transição entre o estado fundamental do sistema para qualquer estado final, pela regra de ouro de Fermi. A densidade espectral neste caso é:

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2}{\pi\Gamma} \sum_F \|\langle F|c_f|\Omega\rangle\|^2 \delta(E_F - E_\Omega - \varepsilon) \quad (2.11)$$

Onde E_Ω é a energia do estado fundamental do sistema de muitos corpos e E_F é a energia do estado final. Para valores negativos de ε basta substituir c_f por $c_f^\dagger$ e $-\varepsilon$ por ε em Eq. (2.11). Os resultados a serem analisados tem $\varepsilon_f = -0,1D$ e $\Gamma = 0,01D$ fixos para três valores da repulsão de Coulomb U dadas por $0,05D$, $0,105D$ e $0,15D$

($\Delta = -0,05; 0,005$ e $0,05$). Olhando agora para cada caso em detalhes:

Caso 1: $\Delta = -0,05D$

Para este Δ , a figura esquemática do Modelo de Anderson fica :

Figura 2.3 – Representação do caso 1.

Figura 2.4 – Densidade espectral para o caso $\Delta = \epsilon_f + U = -0,05$, o pico na posição ϵ_2^* é devido a transição $f^2 \rightarrow f^1$, que representa um estado final onde um elétron do estado $n_f = 2$ é excitado para a banda de condução e o segundo elétron fica no estado de energia ϵ_f (figura adaptada da (8) sob permissão).

Pela Fig. 2.3, o orbital semipreenchido ($n_f = 1$) é mais energético que a configuração duplamente preenchida ($n_f = 2$). Portanto, o pico da densidade espectral do gráfico Fig. 2.4 é devido a transição $f^2 \rightarrow f^1$ e tem o estado final com um elétron do estado $n_f = 2$ excitado para a banda de condução e outro no estado de energia ϵ_f .

Como é possível a transição para os dois elétrons do subnível f^2 então a semilargura central do pico será dada por Γ , e fica localizado na posição ϵ_2^* que foi conseguida do resultado de Haldane (38):

$$\varepsilon_2^* = \Delta = \Delta - \left(\frac{\Gamma}{\pi}\right) \ln\left(\frac{\varepsilon_f}{\Delta}\right) \quad (2.12)$$

Caso 2: $\Delta = 0,005D$

Neste caso 2.5, a diferença entre os estados de configuração f^1 e f^2 é pequena pois f^1 está $\frac{1}{2}\Gamma$ abaixo de f^2 . Nessas circunstâncias, os estados de configurações f^1 e f^2 são praticamente degenerados e o sistema está no regime de valência flutuante. O estado fundamental nesse caso é definido como uma combinação linear das configurações f^2 e f^1 .

Figura 2.5 – Representação do caso 2.

Figura 2.6 – gráfico da densidade espectral para o caso $\Delta = \varepsilon_f + U = -0,005$, note dois picos, um localizado em ε_1^* representando a transição $f^2 \rightarrow f^0$ e o outro em ε_2^* devido a transição $f^1 \rightarrow f^0$. (figura adaptada da (8) sob permissão)

No gráfico Fig. 2.6 é possível localizar dois picos, um na energia ε_1^* , com semilargura 2Γ , devido a transição $f^1 \rightarrow f^0$, e outro em ε_2^* , com semilargura Γ , devido a transição $f^2 \rightarrow f^1$. A semilargura dos dois picos vem da hibridização dos elétrons da banda de condução com a impureza. Após o orbital duplamente ocupado perder um de seus elétrons ele fica semipreenchido com um elétron de determinado *spin*. Passado um certo tempo

médio (dependente de Γ) um segundo elétron da banda de condução será excitado para o orbital da impureza. Pelo princípio de Pauli, o spin do elétron excitado deverá ser oposto ao do elétron já presente no orbital. Por essa razão a semilargura do pico é Γ .

Consideremos agora o orbital da impureza inicialmente ocupado por um elétron. Ao perder esse elétron, o orbital fica vazio e dessa vez não existirá restrição para o *spin* do próximo elétron a vir habitar este subnível; por este motivo, a semilargura para o pico neste caso é 2Γ .

Caso 3: $\Delta = 0,05D$

Este será o caso de maior importância na dissertação. Para ε_f e $(\Delta + U)$ na Fig. 2.7, os estados de ocupação f^0 e f^2 podem ser ignorados das possíveis configurações da impureza, ficando a impureza com a configuração simples (f^1).

Figura 2.7 – Representação esquemática para o caso onde $\Delta = \varepsilon_f + U = 0,05$ (figura adaptada da (8) sob permissão).

O gráfico da densidade espectral apresenta agora três picos, um localizado aproximadamente em $|\varepsilon_f + U|$ e outro em $|\varepsilon_f|$ sendo respectivamente a energia necessária para adicionar ($f^1 \rightarrow f^2$) e remover ($f^1 \rightarrow f^0$) um elétron no estado do estado de ocupação simples, além desses dois, surge um terceiro pico na origem (Ressonância de Kondo) o qual aparece quando a energia de excitação é tal que $\varepsilon \ll \Gamma$. Nesta região do espectro de energia o estado inicial (f^1) tem degenerescência de spin e torna-se importantes transições virtuais via banda de condução entre os estados f^1 e f^0 . Isso gera uma interação antiferromagnética efetiva entre os elétrons do orbital da impureza e a banda de condução que como resultado forma um estado fundamental singlete e um tripleto excitado com energia Γ_K .

Na prática, para temperaturas $T \ll T_K$ os elétrons da banda de condução interagem com o nível da impureza de forma a blindar este nível causando a ressonância na energia $E_F = 0$ de semilargura Γ_K (de expressão $\Gamma_K = \frac{T_K}{(2\pi \cdot 0,103)}$ obtida em (22)) e um deslocamento de fase de $\delta = \frac{\pi}{2}$ (no caso simétrico, e próximo a esse valor no caso assimétrico) para os elétrons da banda de condução.

Figura 2.8 – Densidade espectral para o caso $\Delta = 0,05$, nesta situação o estado inicial (f^1) tem degenerescência de spin e torna-se importantes transições virtuais por via banda de condução entre os estados f^1 e f^2 , para temperaturas $T \ll T_K$ os elétrons da banda de condução interagem com o nível da impureza de forma a blindar este nível, o que causa a ressonância na energia ε_f de semilargura T_K , que é chamada de ressonância de Kondo. (figura adaptada da (8) sob permissão)

Os valores de T_K e Γ_K podem ser obtidos de cálculos termodinâmicos para o modelo

de Kondo (22). Para o modelo com simetria partícula-buraco, a ressonância de Kondo é descrita pela lei universal obtida por Frota e Oliveira (8).

$$\rho_f^S(\varepsilon) = \frac{2}{\pi\Gamma} \Re \sqrt{\frac{i\Gamma_K}{\varepsilon + i\Gamma_K}} \quad (2.13)$$

Esta função descreve a ressonância de Kondo com o pico centrado em $\varepsilon = 0$, para o caso assimétrico essa expressão falha, sendo necessárias correções como será proposto neste trabalho.

O Grupo de Renormalização Numérico

O Grupo de Renormalização Numérico (NRG do inglês *Numerical Renormalization Group*) é um método não perturbativo desenvolvido por Wilson (14), (13) no início dos anos 70 e inicialmente aplicado para o problema de Kondo com $S = \frac{1}{2}$ (14). Wilson teve sucesso no cálculo da suscetibilidade magnética e calor específico para o espectro completo de temperaturas. Logo após esta aplicação, Krishna-murthy et al. (10),(9) aplicaram o NRG no Modelo de Anderson com uma impureza e obtiveram, com isso, a suscetibilidade magnética e o calor específico para o modelo. Atualmente, o NRG é um método amplamente usado para cálculos envolvendo sistemas de impurezas quânticas.

A chave do sucesso na aplicação do NRG está na sua eficiência em abordar o espectro contínuo em diferentes escalas de energia, permitindo, assim, ir através de uma certa sequência de passos de grupo de renormalização desde altas energias, na ordem da largura de banda, até energias baixas, tais como a temperatura de Kondo.

No resto do capítulo apresentaremos conceitos básicos sobre o Grupo de Renormalização (GR) e a aplicação do Grupo de Renormalização Numérico para o Hamiltoniano de Anderson.

3.1 O Grupo de Renormalização

Considerado o Hamiltoniano* $H(\mathbf{K})$ especificado por um conjunto de parâmetros $\mathbf{K} = (K_1, K_2, \dots)$, o grupo de renormalização é um mapeamento R do Hamiltoniano $H(\mathbf{K})$ e suas variáveis $\mathbf{K}$ em outro Hamiltoniano com a mesma forma com um novo conjunto de parâmetros $\mathbf{K}'$. Isto pode ser expressado de forma mais formalizada abaixo

$$R\{H(\mathbf{K})\} = H(\mathbf{K}'), \quad (3.1)$$

ou de forma abreviada:

$$R(\mathbf{K}) = \mathbf{K}'. \quad (3.2)$$

Supondo por exemplo que o Hamiltoniano inicial $H(\mathbf{K})$ esteja em uma determinada escala de energias, pode-se obter um Hamiltoniano efetivo válido para uma escala de energia reduzida. Esta transformação, geralmente não linear, é caracterizada por um parâmetro α (34) o qual dá a razão entre a nova escala de energia a escala anterior. α é uma variável contínua satisfazendo a propriedade :

$$R_{\alpha'}\{R_{\alpha}(\mathbf{K})\} = R_{\alpha+\alpha'}(\mathbf{K}) \quad (3.3)$$

Pode-se aplicar em sequência a transformação R_{α} :

$$R_{\alpha'}\{R_{\alpha}(\mathbf{K})\} = R_{\alpha+\alpha'}(\mathbf{K}) \quad (3.4)$$

Onde os parâmetros $\{\mathbf{K}, \mathbf{K}', \mathbf{K}'', \mathbf{K}''', \dots\}$ formam uma trajetória no espaço dos parâmetros $\mathbf{K}$. Caso em determinado momento em Eq. (3.3) apareça um $\mathbf{K}^*$ invariante sob transformação R_{α} tal que:

$$R_{\alpha}(\mathbf{K}^*) = \mathbf{K}^*, \quad (3.5)$$

este é chamado de ponto fixo no Hamiltoniano H .

*As explicações mostradas aqui podem ser consultadas com maior detalhe na referência (34).

Nas proximidades do ponto fixo as trajetórias geradas pela transformação Eq. (3.3) tendem a ser atraídas ou repelidas pelo ponto fixo cujo comportamento pode ser determinado pela linearização de R nas proximidades desse ponto.

O ponto pode ser classificado em estável, instável ou marginal. O ponto fixo é dito estável quando as trajetórias são atraídas para o ponto em sua proximidade. Quando existem trajetórias divergentes o ponto fixo é chamado instável e, por último, o ponto fixo ainda pode ser classificado como marginal. Neste caso, não é possível determinar a trajetória em sua proximidade com a linearização de R e é necessário um tratamento não linear.

Figura 3.1 – Trajetórias na proximidade de um ponto fixo. (a) Quando todas trajetórias são convergentes para o ponto fixo dizemos que o ponto fixo é estável. (b) Quando existem trajetórias divergentes do ponto fixo o ponto fixo é classificado como instável

Uma trajetória pode passar nas proximidades de dois pontos fixos. Neste caso, a região de transição entre esses dois pontos fixos é chamada de *crossover*, o que nesta dissertação será verificado na prática quando estivermos estudando os pontos fixos do Hamiltoniano de Anderson .

Na próxima seção será apresentado uma introdução sobre a aplicação do grupo de renormalização numérico, método computacional que deriva das ideias de grupo de renormalização.

3.2 Introdução ao Grupo de Renormalização Numérico.

No início dos anos 70, Wilson, usando os conceitos básicos do Grupo de Renormalização criou o método não perturbativo do Grupo de Renormalização Numérico (NRG). Por se tratar de um método não perturbativo o NRG tem a vantagem de poder ser usado em problemas que envolvem contribuições finitas de várias ordens de grandeza no espectro contínuo de energias, por exemplo (que foi usado em (14)), em integrais logaritmicamente divergentes (que aparece no problema de Kondo por exemplo) tais como :

$$\int_C^\infty \frac{dE}{E} \quad (3.6)$$

onde C é uma constante de energia. Problemas no qual aparecem integrais como a Eq. (3.6) não podem ser tratadas por métodos perturbativos, uma vez que a contribuição para qualquer valor de E_0 tal que $E_0 > C$ e $E_0 < \infty$ a integral

$$\int_{E_0}^{2E_0} \frac{dE}{E} \quad (3.7)$$

tem como resposta $\ln 2$, ou seja, independe da ordem de grandeza.

A aplicação do Grupo de Renormalização Numérico em problemas envolvendo impurezas em metais deve seguir basicamente os seguintes procedimentos:

1. Divisão do espectro contínuo de energia no Hamiltoniano que representa os elétrons da banda de condução do metal hospedeiro (discretização logarítmica).
2. Obtenção de uma cadeia semi-infinita que represente a banda discretizada.
3. Encontrar uma relação de recorrência para a cadeia semi-infinita.
4. Diagonalização iterativa para a cadeia semi-infinita usando a relação de recorrência e assim calcular os autoestados e autovalores do Hamiltoniano de (1).

Nas próximas seções serão abordados detalhes de cada um desses passos na aplicação do Grupo de Renormalização Numérico para o caso do Hamiltoniano de Anderson com uma impureza.

3.3 Discretização da Banda de Condução

Para resolver o Hamiltoniano Eq. (2.4) usando o método do NRG conforme os passos apresentados na seção 3.2, é necessário discretizar o contínuo de energias da banda de condução uma vez que não é possível trabalhar computacionalmente com um número infinito de estados.

Intuitivamente uma discretização linear poderia ser uma boa opção, mas esta é ineficaz pelo fato de que problemas de impurezas quânticas necessitam de escalas de energias menores em torno do nível de Fermi.

Supondo por exemplo, que a subdivisão de uma discretização linear na banda de condução de largura $2D$ como na Fig. 2.1 tenha largura de $10^{-5}D$, como a discretização deve abordar tanto energias de baixa ordem de grandeza perto do nível de Fermi até energias na ordem de grandeza da semi-largura da banda (1D), seriam então necessárias 10^5 subdivisões, o que é computacionalmente inviável para a diagonalização numérica do Hamiltoniano.

Wilson então propôs uma discretização logarítmica da banda de condução (14) caracterizada por um parâmetro $\Lambda > 0$ e mostrado na figura a seguir:

Figura 3.2 – Discretização logarítmica da banda de condução no espaço K onde $\Lambda > 0$

Esta discretização abrange todas as ordens de grandeza presentes na banda e tem

rápida convergência para as energias em torno do nível de Fermi, além disso, para o limite $\Lambda \rightarrow 1$ se recupera a banda contínua de energia.

A discretização logarítmica foi primeiramente usada por Wilson no cálculo de propriedades estáticas do Hamiltoniano de Kondo (14) seguido por Krishna-morthy et al. , que a aplicaram no cálculo da suscetibilidade magnética e calor específico no Modelo de Anderson (10),(9).

Do sucesso inicial do NRG no cálculo de propriedades estáticas, a discretização logarítmica de Wilson apresentou limitações no cálculo de propriedades dinâmicas. Para a densidade espectral, por exemplo, a aplicação da discretização logarítmica para o cálculo da regra de ouro de Fermi leva a um espectro discreto e com pouca semelhança ao espectro contínuo esperado. Este problema foi efetivamente solucionado pela adição de um segundo parâmetro $z = [0, 1)$ por (8),(39), e esta será a discretização utilizada neste trabalho.

Figura 3.3 – Discretização logarítmica da banda de condução no espaço K onde $\Lambda > 0$ e z é um novo parâmetro inserido que pode variar entre 0 e 1.

Na discretização da Fig. 3.3 a banda de condução é representada por uma sequência de intervalos com $n = 0, 1, 2, \dots$; de modo que para um $k > 0$ o primeiro intervalo na banda será $1 > \Lambda^{-z}$ e o n -ésimo $\Lambda^{-n-z} > k > \Lambda^{-1-n-z}$ e com $k < 0$ o primeiro intervalo é $-1 < -\Lambda^{-z}$ e o n -ésimo $-\Lambda^{-n-z} < k < -\Lambda^{-1-n-z}$. Note em 3.3 que para retornar a discretização proposta por Wilson (Fig. 3.2) basta fazer $z = 1$.

Na prática, a adição do parâmetro z permite que em uma determinada subdivisão da discretização logarítmica seja calculada uma média entre as medidas feitas para cada valor de z entre 0 e 1 de modo a alargar a aplicação do parâmetro Λ . Com essa discretização, foi possível obter o gráfico esperado para densidade espectral no regime de Kondo, além de mostrar uma melhor eficiência para o cálculo de propriedades termodinâmicas (40)(41),(42).

3.4 Definição da Base Discreta

Após realizar a discretização logarítmica da banda de condução será preciso definir os novos operadores discretos que substituirão os operadores contínuos $c_k^\dagger$ e c_k do Hamiltoniano Eq. (2.4). Podemos então definir para cada intervalo da Fig. 3.3 um conjunto completo de funções de onda dadas nas fronteiras da banda por :

$$\Psi_l^\pm(k) = \begin{cases} \frac{1}{(1-\Lambda^{-z})^{1/2}} \exp(\pm i\omega_0 lk) & \text{se } \pm \Lambda^{-z} < \pm k < \pm 1 \\ 0 & \text{outros intervalos} \end{cases} \quad (3.8)$$

Com $\omega_0 = \frac{2\pi}{1-\Lambda^{-z}}$, e para os intervalos internos na banda de condução :

$$\Psi_{ln}^\pm(k) = \begin{cases} \frac{\Lambda^{\frac{(n+z)}{2}}}{(1-\Lambda^{-1})^{1/2}} \exp(\pm i\omega_n lk) & \text{se } \pm \Lambda^{-n-z-1} < \pm k < \pm \Lambda^{-n-z} \\ 0 & \text{outros intervalos} \end{cases} \quad (3.9)$$

Onde $\omega_n = \frac{2\pi\Lambda^{n+z}}{1-\Lambda^{-1}}$ é a frequência fundamental de Fourier para o intervalo em n e l é o índice da série de Fourier que recebe todos os valores inteiros entre $-\infty$ e ∞ . Pode-se agora expandir o operador contínuo c_k nesta base,

$$c_k = \sum_l [a_l \Psi_l^+(k) + b_l \Psi_l^-(k)] + \sum_{ln} [a_{ln} \Psi_{ln}^+(k) + b_{ln} \Psi_{ln}^-(k)] \quad (3.10)$$

com,

$$a_{nl} = \int_{-1}^1 dk [\Psi_{nl}^+(k)]^* c_k ; b_{nl} = \int_{-1}^1 dk [\Psi_{nl}^-(k)]^* c_k \quad (3.11)$$

operadores a_{nl} e b_{nl} formam um conjunto completo e discretos de operadores de elétrons que obedecem as relações de anticomutação. Expandindo agora o Hamiltoniano da banda de condução em termos desses operadores e considerando para o nosso modelo a dispersão linear $\varepsilon_k = Dk$ tem-se no espaço dos momentos :

$$\begin{aligned} D \int_{-1}^1 k c_k^\dagger c_k dk &= D \left[\frac{1}{2} (1 + \Lambda^{-z}) \sum_l (a_l^\dagger a_l - b_l^\dagger b_l) + \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} \sum_{ln} \Lambda^{-(n-z)} (a_{ln}^\dagger a_{ln} - b_{ln}^\dagger b_{ln}) \right. \\ &\quad + \frac{1 - \Lambda^{-z}}{2\pi i} \sum_{l \neq l'} \sum_n \frac{1}{l + l'} (a_l^\dagger a_{l'} - b_l^\dagger b_{l'}) e^{\frac{2\pi(l-l')}{1-\Lambda^{-1}}} \\ &\quad \left. + \frac{1 - \Lambda^{-z}}{2\pi i} \sum_{l \neq l'} \sum_n \frac{\Lambda^{-(n+z)}}{l + l'} (a_{ln}^\dagger a_{l'n} - b_{ln}^\dagger b_{l'n}) e^{\frac{2\pi(l-l')}{1-\Lambda^{-1}}} \right] \quad (3.12) \end{aligned}$$

onde foi explícito o valor de ω_0 , continuando

$$\int_{-1}^1 c_k dk = (1 - \Lambda^{-z})^{\frac{1}{2}} (a_0 + b_0) - (1 - \Lambda^{-1})^{\frac{1}{2}} \sum_n \Lambda^{\frac{-n+z}{2}} (a_{0n} + b_{0n}) \quad (3.13)$$

De Eq. (3.13) e Eq. (2.3) vê-se que a impureza se acopla diretamente com os operadores a_{0n} e b_{0n} . Além disso, o segundo termo de Eq. (3.12) é multiplicado por $(1 - \Lambda^{-1})$ o que é desprezível para o limite contínuo ($\Lambda \rightarrow 1$).

É útil agora desprezar de Eq. (3.12) os termos no qual $l \neq 0$, isto porque estamos preocupados com os estados diretamente acoplados com a impureza. Esta aproximação já foi largamente testada e mostrou-se muito boa, inclusive para Λ maiores (40). Depois da aproximação H_{bc} fica (de agora em diante será omitido o índice 0 de a_0 e b_0):

$$\frac{H_{bc}}{D} \approx \left(\frac{1 + \Lambda^{-z}}{2}\right)(a^\dagger a - b^\dagger b) + \left(\frac{1 + \Lambda^{-1}}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^{-(n+z)} (a_n^\dagger a_n - b_n^\dagger b_n) \quad (3.14)$$

E a partir de Eq. (3.13) defina-se:

$$f_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-1}^1 c_k dk = \left(\frac{1 - \Lambda^{-z}}{2}\right)^{\frac{1}{2}} (a + b) + \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^{-\frac{n+z}{2}} (a_n + b_n) \quad (3.15)$$

Assim o termo de hibridização fica:

$$H_{sd} = V(f_0^\dagger c_f + c_f^\dagger f_0) \quad (3.16)$$

Após todas estas considerações escrevendo H_A usando todos os operadores que foram definidos,

$$\begin{aligned} \frac{H_A}{D} = & \left(\frac{1 + \Lambda^{-z}}{2}\right)(a_\sigma^\dagger a_\sigma - b_\sigma^\dagger b_\sigma) + \left(\frac{1 + \Lambda^{-1}}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^{-(n+z)} (a_{\sigma n}^\dagger a_{\sigma n} - b_{\sigma n}^\dagger b_{\sigma n}) \\ & + \frac{\varepsilon_f}{D} c_{f\sigma}^\dagger c_{f\sigma} + \frac{U}{D} c_{f\uparrow}^\dagger c_{f\uparrow} c_{f\downarrow}^\dagger c_{f\downarrow} \\ & + \left(\frac{2\Gamma}{\pi D}\right)^{\frac{1}{2}} (f_{0\sigma}^\dagger c_{f\sigma} + c_{f\sigma}^\dagger f_{0\sigma}) \end{aligned} \quad (3.17)$$

com $\Gamma = \pi V^2 \rho = \frac{\pi V^2}{D}$. Note que não foi necessário fazer nenhuma aproximação nos termos do Hamiltoniano dependentes da impureza. Isto garante cálculos precisos para as propriedades dependentes desses termos e é fundamental para os resultados buscados, todavia o Hamiltoniano Eq. (3.17) ainda tem termos infinitos, dessa forma, para diagonalizá-lo será necessário truncar (quebrá-lo de modo a deixá-lo finito sem perda de precisão), o que será visto na próxima seção.

3.5 Truncamento

Para diagonalizar numericamente o Hamiltoniano Eq. (3.17) será necessário truncar de forma a transformar a base B em uma base finita. Um truncamento direto para um determinado n não é recomendável pois afetaria a interação banda-impureza (veja a equação Eq. (3.15)). É proposto assim, uma nova base $f_{n\sigma}$ na qual $f_{0\sigma}$ esteja inserida e que é criada a partir de uma transformação unitária entre o conjunto de operadores $(a_{n\sigma}, b_{n\sigma})$ para um novo conjunto ortonormal $(f_{n\sigma})$. Além disso, é considerado para esta nova base um acoplamento apenas entre os primeiros vizinhos, ou seja, $f_{n\sigma}$ se acopla apenas com $f_{(n+1)\sigma}$ ou $f_{(n-1)\sigma}$ e $f_{0\sigma}$ acopla diretamente com a impureza. Assim, o Hamiltoniano da banda de condução fica escrito da seguinte forma tridiagonal:

$$H^0 = \frac{D(1 + \Lambda^{-1})}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n^z (f_n^\dagger f_{n+1} + f_{n+1}^\dagger f_n) \quad (3.18)$$

Onde é omitido o índice de spin σ por conveniência, nesta expressão ε_n^z deve ser calculada numericamente através de um método recursivo, como foi mostrado em Yoshida et al. (39) para $z = 1$ na discretização de Wilson, existe uma formula analítica (10) dada por:

$$\varepsilon_n^{z=1} = D\Lambda^{-\frac{n}{2}}(1 - \Lambda^{-n-1})(1 - \Lambda^{-2n-1})^{-\frac{1}{2}}(1 - \Lambda^{-2n-3})^{-\frac{1}{2}} \quad (3.19)$$

O qual para $n \gg 1$ para ser substituído por:

$$\varepsilon_n = \Lambda^{-\frac{n}{2}} \quad (3.20)$$

Com a nossa nova base é possível truncar o Hamiltoniano sem prejudicar os termos ligados à impureza $(\varepsilon_f, \Gamma, U)$. Isto permite controlarmos a precisão dos cálculos de forma que se escolhe um N (n onde a série será truncada) que inclua as escalas de energia de interesse. Para o cálculo da densidade espectral a escala de energia de interesse estará

entre $10^{-12}D$ e $10^{-1}D$.

Sendo então um ε dentro dessa escala de energia a soma na Eq. (3.18) o Hamiltoniano tal que para N grande :

$$\frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} D \Lambda^{(1-z) - \frac{N}{2}} \ll \varepsilon \quad (3.21)$$

Uma simplificação é dividir todos os elementos do Hamiltoniano pelo menor valor da energia na interação N ,

$$D_N = \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} D \Lambda^{\frac{-N-1}{2}} \quad (3.22)$$

Isto define uma escala dimensionada e é conveniente uma vez que faz com que o menor elemento da matriz do Hamiltoniano seja da ordem de 1 facilitando a interpretação dos dados. Aplicando essa simplificação:

$$H_N = \Lambda^{\frac{(N-1)}{2}} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n^z (f_n^\dagger f_{n+1} + f_{n+1}^\dagger f_n) + \tilde{\varepsilon}_f c_f^\dagger c_f + \tilde{U} c_{f\uparrow}^\dagger c_{f\uparrow} c_{f\downarrow}^\dagger c_{f\downarrow} + \tilde{\Gamma}^{\frac{1}{2}} (f_0^\dagger c_f + c_f^\dagger f_0) \right\} \quad (3.23)$$

Onde,

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}_f &= \varepsilon_f \frac{2}{D(1 + \Lambda^{-1})} \\ \tilde{U} &= U \frac{2}{D(1 + \Lambda^{-1})} \\ \tilde{\Gamma} &= \frac{2\Gamma}{\pi D} \frac{2}{(1 + \Lambda^{-1})} \end{aligned}$$

Olhando com o devido cuidado, será fácil concluir que é possível obter o Hamiltoniano H_N a partir de H_{N-1} . Escreve-se então o Hamiltoniano iterativo

$$H_N = \Lambda^{\frac{1}{2}} H_{N-1} + \varepsilon_{N-1}^z (f_{N-1}^\dagger f_N + f_N^\dagger f_{N-1}) \quad (3.24)$$

com $\varepsilon_N^z = \Lambda^{\frac{N}{2}} \varepsilon_N^z$.

É neste Hamiltoniano que se baseia a diagonalização numérica que será vista na seção (3.6). *Grosso modo*, diagonaliza-se o Hamiltoniano H_0 (somente a impureza) e, dos seus autovalores constrói-se H_1 a partir da equação Eq. (3.24), de H_1 constrói-se H_2 e assim por diante. É necessário redefinir a aplicação de Eq. (3.22) de modo que a menor energia para cada iteração N continue na ordem de 1. Este processo iterativo pode ser bem definido por uma corrente onde o primeiro sítio representaria a impureza, estaria ligado apenas ao segundo sítio (representando o primeiro sítio da banda de condução) que estaria ligado ao terceiro sítio e assim por diante como podemos ver na figura abaixo.

Figura 3.4 – Representação da cadeia iterativa semi-infinita onde o primeiro sítio representa a impureza ($n = -1$) e os sítios seguintes representam a banda de condução, ao centro de cada sítio temos o Hamiltoniano para a sua iteração ($H_{-1}, H_0 \dots, H_{n+1}$), note que para passar do Hamiltoniano H_n ao H_{n+1} , precisamos adicionar um sítio a cadeia iterativa.

Finalmente, depois de realizado todo este processo será possível diagonalizar o Hamiltoniano de Anderson. Vamos ver como isso é feito na próxima seção.

3.6 Diagonalização

Como citado anteriormente, sabendo os autovalores e autovetores do Hamiltoniano H_{N-1} é possível diagonalizar H_N usando a Eq. (3.24). Todavia, ao se aumentar a iteração em 1, o número de autoestados do Hamiltoniano H_N quadruplica, sendo um quarto desses estados dados pela iteração $N - 1$ e o restante vindo da aplicação dos operadores $f_{N\uparrow}^\dagger$, $f_{N\downarrow}^\dagger$ e $f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow}^\dagger$, isto porque, ao passar da iteração $N - 1$ a N adicionamos um sítio a mais no esquema da Fig. 2.1. É do produto tensorial dos novos estados com os anteriores da rede que surge o fator 4.

O número de autoestados crescem de forma rápida, sendo que para um determinado

N , o número de estados presentes será $2^{2(N+2)}$, de modo que para o programa usado nesta dissertação onde $N = 30$ teremos 2^{64} estados, ou seja, uma matriz de $2^{64} \times 2^{64}$ o que é impraticável de diagonalizar numericamente.

O que é feito então é beneficiar-se das simetrias presentes no Hamiltoniano diminuindo o tamanho das matrizes a serem computadas. O Hamiltoniano Eq. (3.24) tem simetria de carga (Q) e spin (S), os quais são definidos por:

$$Q_{N\sigma} = \sum_{n=0}^N (f_{n\sigma}^\dagger f_{n\sigma} - 1) + (c_{f\sigma}^\dagger c_{f\sigma} - 1) \quad (3.25)$$

$$\vec{S}_N = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N f_{n\sigma}^\dagger \vec{\sigma}_{\sigma\nu} f_{n\sigma} + \frac{1}{2} c_{f\sigma}^\dagger \vec{\sigma}_{\sigma\nu} c_{f\sigma} \quad (3.26)$$

$\vec{\sigma}(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ são as matrizes de Pauli, ambos os operadores comutam com H_N de maneira que os autoestados de H_N também sejam autoestados de $Q_N, (\vec{S}_N)^2$ e S_{Nz} e portanto serão designados pelos valores Q, S e S_z . Isto torna a matriz bloco diagonal, onde cada bloco é um subespaço de (Q, S, S_z) podendo ser diagonalizado separadamente, outra simplificação vem do fato das energias serem independentes de S_z . Com o auxílio do Teorema de Wigner-Eckart (43) podemos trabalhar em termos de coeficientes de Clebsch e Gordan e dos elementos de matriz reduzida (também chamada de invariantes) $\langle Q, S \| f_N^\dagger \| Q', S' \rangle$ ao invés de $\langle Q, S, S_z \| f_N^\dagger \| Q', S', S'_z \rangle$.

Mesmo após todo este tratamento, o programa ainda retornará um número grande de energias, das quais a maior não é de interesse prático (valores muito maiores dos quais consideramos para construir o gráfico da densidade). Escolhemos então uma energia de corte, para o qual valores superiores são descartados. No caso do programa usado aqui, energias superiores a $E > 70$ em unidades da energia dimensionada são descartadas. A partir desse método é que se obtém os valores das energias e autoestados para H_N e é dos elementos de matriz dos autoestados que será calculada o gráfico da densidade espectral.

Na próxima seção será apresentado como exemplo, o cálculo analítico de H_{-1} e H_0 (para $N > 0$ não é possível o cálculo analítico), este exemplo será útil para o entendimento do método usado aqui.

3.7 Cálculos Analíticos para H_{-1} e H_0

Vamos agora escrever o primeiro Hamiltoniano de Eq. (3.24) :

$$H_{-1} = \tilde{\varepsilon}_f c_{f\sigma}^\dagger c_{f\sigma} + \tilde{U} c_{f\uparrow}^\dagger c_{f\uparrow} c_{f\downarrow}^\dagger c_{f\downarrow} \quad (3.27)$$

Note que este Hamiltoniano se refere apenas à impureza como pode ser vista 3.4. A base dos possíveis estados do sítio da impureza é dada por $\psi_{c_f} = \{|\phi\rangle, c_{f\uparrow}^\dagger |\phi\rangle, c_{f\downarrow}^\dagger |\phi\rangle, c_{f\uparrow}^\dagger c_{f\downarrow}^\dagger |\phi\rangle\}$, podemos optar por uma forma mais visual de representar os estados de ψ_{imp} , de modo que fique : $\psi_{c_f} = \{|\phi\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle\}$ cujo a interpretação é clara. Escrevendo o Hamiltoniano H_{-1} nesta base, teremos uma matriz diagonal dada por :

$$H_{-1} = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{\varepsilon}_f & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{\varepsilon}_f & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (2\tilde{\varepsilon}_f + \tilde{U}) \end{vmatrix}$$

Este é um caso trivial. Note que esta matriz é diagonal e já temos os autoestados e energias. Podemos escrever estes autoestados na base (Q, S, S_z) da carga e do momento angular para o sítio.

Tabela 3.1 – Tabela 1: Autoestados do Hamiltoniano H_{-1} .

Q	S	S_z	Autovalor	Autovetor
-1	0	0	0	$ -1, 0, 0\rangle = \phi\rangle$
0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	ε_f	$ 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = c_{f\uparrow}^\dagger \phi\rangle$
0	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	ε_f	$ 0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = c_{f\downarrow}^\dagger \phi\rangle$
1	0	0	$2\varepsilon_f + \tilde{U}$	$ 1, 0, 0\rangle = c_{f\uparrow}^\dagger c_{f\downarrow}^\dagger \phi\rangle$

Considerando agora o caso com $N = 0$, o que significa que adicionamos o primeiro sítio da banda de condução. O Hamiltoniano H_N não é mais trivial como H_0 e é dado por :

$$H_0 = \tilde{\varepsilon}_f c_{f\sigma}^\dagger c_{f\sigma} + \tilde{U} c_{f\uparrow}^\dagger c_{f\uparrow} c_{f\downarrow}^\dagger c_{f\downarrow} + \tilde{\Gamma}^{\frac{1}{2}} (f_{0\sigma}^\dagger c_{f\sigma} + c_{f\sigma}^\dagger f_{0\sigma}) \quad (3.28)$$

Com o primeiro sítio da banda de condução, surge agora um termo de troca comandado por $\tilde{\Gamma}$, que faz com que os elétrons possam passar de um sítio ao outro e a base de estados do Hamiltoniano será um produto tensorial entre a base de estados do sítio da impureza $\psi_{c_f} = \{|\phi\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle\}$ e o do primeiro sítio da banda de condução $\psi_{f_0} = \{|\phi\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle\}$, sendo assim agora o número de estados do sistema quadruplicará. Escrevendo a matriz desse Hamiltoniano na base (Q, S) teremos uma matriz não mais diagonal, por causa do termo de troca, mas agora bloco-diagonal, como mostramos abaixo, onde escrevemos os elementos bloco-diagonais em vermelho.

$$H_0 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{\Gamma}^{\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{\Gamma}^{\frac{1}{2}} & \tilde{\varepsilon}_f & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\Gamma}^{\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tilde{\Gamma}^{\frac{1}{2}} & \tilde{\varepsilon}_f & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\varepsilon}_f & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\varepsilon}_f & \tilde{\Gamma}^{\frac{1}{2}} & \tilde{\Gamma}^{\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\Gamma}^{\frac{1}{2}} & 0 & 0 & \tilde{\Gamma}^{\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\Gamma}^{\frac{1}{2}} & 0 & (2\tilde{\varepsilon}_f + \tilde{U}) & \tilde{\Gamma}^{\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\Gamma}^{\frac{1}{2}} & \tilde{\Gamma}^{\frac{1}{2}} & 0 & \tilde{\varepsilon}_f & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\varepsilon}_f & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\varepsilon}_f & \tilde{\Gamma}^{\frac{1}{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{\Gamma}^{\frac{1}{2}} & (2\tilde{\varepsilon}_f + \tilde{U}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & (2\tilde{\varepsilon}_f + \tilde{U}) & 0 \end{vmatrix}$$

Mesmo sendo uma matriz 16 x 16 ainda conseguimos diagonalizá-la analiticamente pois o maior bloco é de ordem 4. Temos da referência (10) uma Tabela com os autoestados e autovalores, assim como os parâmetros (Q, S) para cada autoestado.

Tabela 3.2 – Autoestados e Energias separado por setores (Q, S) no Hamiltoniano H_0 no Modelo de Anderson Simétrico. (Tabela adaptada da referência (9)).

Carga	$Spin$	Índice		
Q	S	r	Energia/ $\Lambda^{1/2}$	Estado
-2	0	1	$\frac{1}{2} \left(\tilde{U}^2 + 16\tilde{\Gamma} \right)^{1/2} + \frac{1}{2}\tilde{U}$	$ \phi\rangle$
-1	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{1}{2} \left(\tilde{U} + 16\tilde{\Gamma} \right)^{1/2} - \frac{1}{2} \left(\tilde{U}^2 + 4\tilde{\Gamma} \right)^{1/2}$	Diferentes combinações lineares de $f_0^\dagger \phi\rangle$ e $c_f^\dagger \phi\rangle$
		2	$\frac{1}{2} \left(\tilde{U} + 16\tilde{\Gamma} \right)^{1/2} + \frac{1}{2} \left(\tilde{U}^2 + 4\tilde{\Gamma} \right)^{1/2}$	
0	0	1	0	Diferentes combinações lineares de $f_{0\uparrow}^\dagger f_{0\downarrow}^\dagger \phi\rangle$, $c_{f\uparrow}^\dagger c_{f\downarrow}^\dagger \phi\rangle$ e $(f_0^\dagger c_f^\dagger)_s \phi\rangle$
		2	$\frac{1}{2} \left(\tilde{U}^2 + 16\tilde{\Gamma} \right)^{1/2} + \frac{1}{2}\tilde{U}$	
		3	$\frac{1}{2} \left(\tilde{U}^2 + 16\tilde{\Gamma} \right)^{1/2}$	
	1	1	$\frac{1}{2} \left(\tilde{U}^2 + 16\tilde{\Gamma} \right)^{1/2} - \frac{1}{2}\tilde{U}$	$(f_0^\dagger c_f^\dagger)_t \phi\rangle$
1	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{1}{2} \left(\tilde{U} + 16\tilde{\Gamma} \right)^{1/2} - \frac{1}{2} \left(\tilde{U}^2 + 4\tilde{\Gamma} \right)^{1/2}$	Diferentes combinações lineares de $f_0^\dagger (c_{f\uparrow}^\dagger c_{f\downarrow}^\dagger) \phi\rangle$ e $c_f^\dagger (f_{0\uparrow}^\dagger f_{0\downarrow}^\dagger) \phi\rangle$
		2	$\frac{1}{2} \left(\tilde{U} + 16\tilde{\Gamma} \right)^{1/2} + \frac{1}{2} \left(\tilde{U}^2 + 4\tilde{\Gamma} \right)^{1/2}$	
2	0	1	$\frac{1}{2} \left(\tilde{U}^2 + 16\tilde{\Gamma} \right)^{1/2} + \frac{1}{2}\tilde{U}$	$f_{0\uparrow}^\dagger f_{0\downarrow}^\dagger c_{f\uparrow}^\dagger c_{f\downarrow}^\dagger \phi\rangle$

3.8 Cálculo Computacional para H_N .

Como explicado na seção 3.6 para cada sítio adicionado a cadeia iterativa 3.4 os estados da iteração anterior N crescem por um fator 4, devido aos quatro possíveis estados de ocupação do novo sítio. Uma forma de sumarizar todos os estados de uma iteração é através de um diagrama[†] de Q e $2S$ que representa os subespaços $(Q, 2S)$ onde Q é definido pela expressão Eq. (3.25) e S por Eq. (3.26). Para H_{-1} este diagrama é mostrado na Fig. 3.5.

Figura 3.5 – Diagrama para o subespaço (Q, S) na iteração $N = -1$ (índice nos círculos), a carga Q é a ordenada no diagrama e o momento $2S$ é a abscissa. Ao lado de cada círculo temos os possíveis estados de ocupação nessa iteração, e no centro temos o índice que identifica o subespaço (Q, S) .

Os subespaços de H_{-1} em Fig. 3.5 é chamado de semente do processo iterativo, no cálculo computacional é desta semente que parte todo o processo de construção e diagonalização do Hamiltoniano como foi explicado na seção 3.6.

Para cada subespaço $(Q, 2S)$ na Fig. 3.5 teremos uma matriz com os autoestados e autovalores (que também serão autoestados e autovalores do Hamiltoniano). Sendo H_{-1} um caso trivial, a maior matriz presente será uma 2×2 no subespaço $(0, 1)$.

[†]multiplicamos S por 2 apenas para não trabalhar com valores fracionários

A partir dos estados de uma iteração N obtemos os estados da iteração $N + 1$, considerando por exemplo um estado $|Q, S, S_z, r, u\rangle_{N+1}$ de um subespaço (Q, S) na iteração $N + 1$ (onde o índice r designa o autoestado no subespaço e u a sua origem como será explicado) veremos as quatro formas de se obter este estado através de estados existentes da iteração N combinados com as possíveis ocupações do sítio adicionado na iteração $N + 1$:

Ao combinarmos caso exista um estado $|Q - 1, S, S_z, r\rangle_N$ do subespaço $(Q - 1, S)$ da iteração N com o orbital duplamente preenchido do novo sítio de $N + 1$ obtemos o estado $|Q, S, S_z, r, N\rangle_{N+1}$, onde o índice N significa que o novo autoestado teve sua origem de um autoestado do subespaço ao sul.

$$|Q, S, S_z, r, N\rangle_{N+1} = f_{N+1, \uparrow}^\dagger f_{N+1, \downarrow}^\dagger |\phi\rangle_{N+1} |Q - 1, S, S_z, r\rangle_N \quad (3.29)$$

Da mesma forma, caso exista um estado $|Q + 1, S, S_z, r\rangle_N$ do subespaço $(Q + 1, S)$ da iteração N com o orbital vazio do novo sítio de $N + 1$, obtemos o estado $|Q, S, S_z, r, S\rangle_{N+1}$ onde o índice S no *ket* indica que o novo autoestado teve sua origem de um autoestado de um subespaço ao norte.

$$|Q, S, S_z, r, S\rangle_{N+1} = |\phi\rangle_{N+1} |Q + 1, S, S_z, r\rangle_N \quad (3.30)$$

Note que quando combinamos com o estado vazio e duplamente preenchido do orbital que chamamos aqui de f_{N+1} modificamos a carga e não o momento angular total. Desse modo, já mostramos duas formas de se obter o estado $|Q, S, S_z, r, u\rangle_{N+1}$ as outras duas formas serão através de mudanças no momento angular total S do subespaço de N para $N + 1$ combinando os estados com o orbital semipreenchido. Note que neste caso deve surgir coeficientes de Clebsch e Gordan.

$$|Q, S, S_z, r, L\rangle_{N+1} = \sqrt{\frac{S+S_z}{2S}} f_{N+1,\uparrow}^\dagger |\phi\rangle_{N+1} \left| Q, S - \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2}, r \right\rangle_N + \sqrt{\frac{S-S_z}{2S}} f_{N+1,\downarrow}^\dagger |\phi\rangle_{N+1} \left| Q, S - \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}, r \right\rangle_N \quad (3.31)$$

e

$$|Q, S, S_z, r, O\rangle_{N+1} = -\sqrt{\frac{S-S_z+1}{2S+2}} f_{N+1,\uparrow}^\dagger |\phi\rangle_{N+1} \left| Q, S + \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2}, r \right\rangle_N + \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+2}} f_{N+1,\downarrow}^\dagger |\phi\rangle_{N+1} \left| Q, S + \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}, r \right\rangle_N \quad (3.32)$$

Onde o estado de Eq. (3.31) teve origem a partir de um subespaço $(Q, 2S-1)$ de N por isso o índice O de Oeste e o estado de Eq. (3.32) teve origem a partir de um subespaço $(Q, 2S+1)$ de N , logo o índice L de Leste. Uma forma de entender o processo feito é através do diagrama abaixo onde o último índice u de $|Q, S, S_z, r, u\rangle_{N+1}$ indica o sentido da flecha entre os subespaços (veja a Fig. 3.6).

Figura 3.6 – Processo geral de formação de um subespaço de $N+1$ (círculo) a partir dos autoestados de uma iteração N . Os *Kets* indicam o autoestado de $N+1$ formados a partir do autoestado do subespaço N (retângulos) de origem da seta com o autoestado do novo sítio (veja o texto).

Construindo os estados dessa maneira, podemos mostrar que da semente na Fig. 3.5 podemos encontrar o subespaços da iteração $N = 0$, como mostramos agora na Fig 3.7.

Figura 3.7 – Diagrama $(Q, 2S)$ para H_0 , as setas azuis indicam a origem dos autoestados de iteração $N = -1$ (semente, círculos na figura) para os novos subespaços de $N = 0$ representado pelos quadrados, os *Kets* mostrados são os autoestados da iteração $N + 1$ que combinam com o autoestado f_0 do novo sítio. Numa futura iteração $N = 1$, as setas agora teriam origem dos quadrados para os novos subespaços. O processo de construção se repete então até uma determinada iteração N

Assim conseguimos montar a base para a matriz H_{N+1} a partir da base da matriz H_N . O que precisamos antes de diagonalizar é calcular os elementos do Hamiltoniano dentro dos vários subespaços (Q, S) . Para isto usamos o fato de que os elementos de matriz independem de S_z a não ser por um coeficiente de Clebsch e Gordan. Usando então o teorema de Wigner-Eckart (43)

$${}_N \langle Q', S', S'_z, r' | f_{N\sigma}^\dagger | Q, S, S_z, r \rangle_N = \left(S', S'_z | S, S_z, \frac{1}{2}, \sigma \right)_N \langle Q', S', r | f_N^\dagger | Q, S, r' \rangle_N \quad (3.33)$$

Onde $(S', S'_z | S, S_z, \frac{1}{2}, \sigma)$ é o coeficiente de Clebsch e Gordan e o elemento ${}_N \langle Q', S', r | f_N^\dagger | Q, S, r' \rangle_N$ é o elemento de matriz invariantes que independem de S_z .

Vamos então calcular os elementos do Hamiltoniano H_{N+1} , dentro de um determinado subespaço (Q, S) da iteração $N + 1$, da equação Eq. (3.24)

$$H_{N+1} = \Lambda^{\frac{1}{2}} H_N + \varepsilon_N^z \left(f_{N\sigma}^\dagger f_{N+1,\sigma} + f_{N+1,\sigma}^\dagger f_{N\sigma} \right) \quad (3.34)$$

e para dois estados dentro do subespaço (Q, S) :

$${}_{N+1} \langle Q, S, S_z, r, u | H_{N+1} | Q', S', S'_z, r', u' \rangle_{N+1} = \Lambda^{\frac{1}{2}} {}_{N+1} \langle Q, S, S_z, r, u | H_N | Q', S', S'_z, r', u' \rangle_{N+1} + \varepsilon_{N+1}^z \left\langle Q, S, S_z, r, u \left| \left(f_{N\sigma}^\dagger f_{N+1,\sigma} + f_{N+1,\sigma}^\dagger f_{N\sigma} \right) \right| Q', S', S'_z, r', u' \right\rangle_{N+1} \quad (3.35)$$

Os elementos de matriz acima dependem do índice u e u' que dão a origem desses autoestados. Sendo assim, o primeiro termo de Eq. (3.35) é simples e dado pelas energias já calculada na iteração anterior. Já o segundo termo é mais difícil de se calcular.

Escrevendo as autofunções dependentes da iteração N em Eq. (3.29), Eq. (3.30), Eq. (3.31), (3.32) como respectivamente $|N\rangle_N$, $|S\rangle_N$, $|L\rangle_N$, $|O\rangle_N$, podemos calcular o elemento de matriz do Hamiltoniano H_{N+1} entre os estados de um determinado subespaço equação Eq. (3.35). Assim, omitindo a parte trivial do cálculo (que é o cálculo entre os operadores $f_{N+1\sigma}$ e $f_{N+1\sigma}^\dagger$ e os estados do sítio adicionado f_{N+1} , junto com o cálculo do primeiro termo de Eq. (3.35)), notamos que das 16 combinações de *bra-ket* nesse cálculo

apenas 8 termos dependentes de $f_{N\sigma}$ serão não nulos (${}_N\langle S|f_{N\sigma}^\dagger|O\rangle_N, {}_N\langle S|f_{N\sigma}^\dagger|L\rangle_N, {}_N\langle L|f_{N\sigma}^\dagger|N\rangle_N, {}_N\langle O|f_{N\sigma}^\dagger|N\rangle_N$ e suas combinações conjugadas). O cálculo desses elementos utilizará dos invariantes (veja no apêndice A), então, após calcularmos a energia e os autoestados de uma iteração o programa deve calcular e armazenar os elementos invariantes que serão usados na próxima iteração. No caso simples da primeira iteração (semente), temos que inicialmente dar ao programa além dos autoestados e energias da semente os dois primeiros invariantes $\langle 0, \frac{1}{2}, 1 \| c_f^\dagger \| -1, 0, 1 \rangle = 1, \langle 1, 0, 1 \| c_f^\dagger \| 0, \frac{1}{2}, 1 \rangle = -\sqrt{2}$.

Ao utilizarmos os elementos invariantes poupamos o computador de armazenar dados referentes a S_z . Na prática o programa constrói as iterações a partir dos diagramas de $(Q, 2S)$ começando da semente H_{-1} pré calculada e seguindo o diagrama 3.5 e menor Q para o maior, o programa constrói e diagonaliza cada subespaço gerando os autovalores e autovetores e tomando o cuidado de guardar os invariantes para a próxima iteração. Esse processo se repete até um determinado $N_{\max}$ da nossa escolha.

Pontos fixos para o Modelo de Anderson.

Vamos de começo estudar aqui três Hamiltonianos: o Hamiltoniano da banda livre, da banda livre com um Potencial Espalhador e por ultimo o Hamiltoniano do modelo de nível Ressonante que serão importantes no seguimento da dissertação. Logo a seguir, vamos estudar os pontos fixos da Hamiltoniano de Anderson simétrico e assimétrico, variando os valores de $\tilde{\Gamma}$ e $\tilde{U}$ comparando com o resultado de H_N para $N \rightarrow \infty$ e avaliando os Hamiltonianos efetivos obtido em cada caso.

4.1 Hamiltoniano de Banda Livre

O Hamiltoniano da banda livre é aquele no qual temos apenas a banda de condução sem a presença da impureza. Embora simples ele é importante pois auxiliará no entendimento dos pontos fixos do Hamiltoniano de Anderson. O Hamiltoniano de banda livre é dado por :

$$H_N^0 = \Lambda^{\frac{(N-1)}{2}} \sum_{n=0}^{N-1} \Lambda^{-\frac{n}{2}} \varepsilon_n \left(f_n^\dagger f_{n+1} + f_{n+1}^\dagger f_n \right) \quad (4.1)$$

que é um Hamiltoniano na forma quadrática e pode ser diagonalizado numericamente com esforço computacional insignificante. Para isso escrevemos o Hamiltoniano em uma

forma matricial como

$$H_N^0 = f^\dagger \mathcal{H}_N^0 f \quad (4.2)$$

onde $f = (f_0^\dagger, f_1^\dagger, \dots, f_N^\dagger)$ é um vetor linha e a matriz $\mathcal{H}_N^0$ tem os termos não nulos dados por

$$(\mathcal{H}_N^0)_{n,n+1} = (\mathcal{H}_N^0)_{n+1,n} = \Lambda^{\frac{(N-1-n)}{2}} \varepsilon_n \quad (4.3)$$

de tal modo que se $\mathbb{M}$ é uma matriz real ortogonal que diagonaliza $\mathcal{H}_N^0$. Teremos então $\mathcal{H}_N^0 \mathbb{M} = \mathbb{M} \eta^N$, com η^N uma matriz diagonal constituída pelos autovalores de $\mathcal{H}_N^0$. Podemos agora definir um novo operador $g_l = \sum_n (\mathbb{M})_{nl} f_n$ com a relação inversa $f_n = \sum_l (\mathbb{M})_{nl} g_l$ e escrever a matriz H_N^0 em termos desses operadores

$$H_N^0 = \sum_l \eta_l^N g_l^\dagger g_l \quad (4.4)$$

Com os autovalores η_l e a matriz $\mathbb{M}$ calculados numericamente. Pela simetria partícula-buraco presente em H_N^0 os autovalores η deverão ser simétricos de modo que caso $(N+1)$ seja par, haverá $\frac{(N+1)}{2}$ autovalores $\eta_j (j = 1, 2, \dots, \frac{(N+1)}{2})$ positivos definidos como energias de partículas, e $\frac{(N+1)}{2}$ autovalores $-\eta_j$ negativos simétricos a η_j com relação ao zero e definidos como energias de buracos. Quando $(N+1)$ é ímpar, surge um autovalor centrado em zero denotado $\hat{\eta}_0$ e nos autovalores restantes temos para cada um dos $\frac{N}{2}$ $\hat{\eta}_j$ positivos (partícula) um simétrico $-\hat{\eta}_j$ negativo (buraco). Com essa simetria entre os autovalores é interessante redefinir cada operador g_l com autovalor negativo como um operador h_l , separando os operadores de partícula e de buraco, assim, os operadores $g_l^\dagger$ criam um elétron no autoestado correspondente ao autovalor positivo η_l e $h_l^\dagger$ cria um buraco no autoestado associado a $-\eta_l$.

Aumentando consideravelmente o valor de N , os autovalores de H_N^0 tendem a valores limites distintos para $(N+1)$ par ou $(N+1)$ ímpar, respectivamente, η_j (designado por η_j^*) e $\hat{\eta}_j(\hat{\eta}_j^*)$. Com $j \gg 1$ essa dependência é dada por:

$$\eta_j^* = \Lambda^{j-1} \quad (4.5)$$

$$\hat{\eta}_j^* = \Lambda^{j-\frac{1}{2}} \quad (4.6)$$

Esses limites são distintos porque o par $(H^*, \hat{H}^*)$ é ponto fixo da transformação de grupo de renormalização τ^2 (de N para $N+2$), e não da transformação τ (de N para $N+1$). Por fim, com $N \rightarrow \infty$, H_N^0 vai para H^* se $(N+1)$ é par ou $\hat{H}^*$ se $(N+1)$ ímpar.

Os resultados para o Hamiltoniano da banda livre podem ser sumarizados em uma tabela, como na Tabela 4.1, reproduzida da (10) e que replicaremos abaixo. A tabela lista os α_{nj} que compõe a matriz $\mathbb{M}$. Para $(N+1)$ ímpar haverá um operador $g_{0\sigma}$ extra associado ao nível $\hat{\eta}_0$.

Tabela 4.1 – Informações sobre o Hamiltoniano da Banda Livre H_N^0 adaptado de Krishna-murthy et al. (10). Na tabela $H_N^0, Q_N^0, S_N^0, f_{0\sigma}$ e $f_{1\sigma}$ estão escritos usando os elementos da matriz $\mathbb{M}(\alpha_{nj})$ e dos operadores de criação e destruição para buracos h ou partículas g , note que para $N+1$ ímpar existe o operador g_0 que cria(destrói) uma partícula no estado central. Mais abaixo na tabela, temos os limites para N grande e $j \gg 1$ das energias $(\eta_j), \hat{\eta}_j$ além dos elementos de matriz $\alpha_{0j}, \alpha_{1j}, \dots$ etc.

$(N+1)$ par	$(N+1)$ ímpar
$H_N^0 = \sum_{j=1}^{(N+1)/2} \eta_j (g_{j\mu}^\dagger g_{j\mu} + h_{j\mu}^\dagger h_{j\mu})$	$H_N^0 = \hat{\eta}_0 g_{0\mu}^\dagger g_{0\mu} + \sum_{j=1}^{N/2} \hat{\eta}_j (g_{j\mu}^\dagger g_{j\mu} + h_{j\mu}^\dagger h_{j\mu})$
$Q_N^0 = \sum_{j=1}^{(N+1)/2} (g_{j\mu}^\dagger g_{j\mu} - h_{j\mu}^\dagger h_{j\mu})$	$Q_N^0 = (g_{0\mu}^\dagger g_{0\mu} - 1) + \sum_{j=1}^{N/2} (g_{j\mu}^\dagger g_{j\mu} - h_{j\mu}^\dagger h_{j\mu})$
$S_N^0 = \sum_{j=1}^{(N+1)/2} \frac{1}{2} [g_{j\mu}^\dagger \vec{\sigma}_{\mu\nu} g_{j\nu}^\dagger + h_{j\mu}^\dagger \vec{\sigma}_{\mu\nu} h_{j\nu}^\dagger]$	$S_N^0 = \frac{1}{2} g_{0\mu}^\dagger \vec{\sigma}_{\mu\nu} g_{0\nu} + \sum_{j=1}^{N/2} \frac{1}{2} [g_{j\mu}^\dagger \vec{\sigma}_{\mu\nu} g_{j\nu} + h_{j\mu}^\dagger \vec{\sigma}_{\mu\nu} h_{j\nu}^\dagger]$
$f_{0\mu} = \Lambda^{-[(N-1)/4]} \left\{ \sum_{j=1}^{(N+1)/2} \alpha_{0j} (g_{j\mu} + h_{j\mu}^\dagger) \right\}$	$f_{0\mu} = \Lambda^{-[(N-1)/4]} \left\{ \hat{\alpha}_{00} g_{0\mu} + \sum_{j=1}^{N/2} \hat{\alpha}_{0j} (g_{j\mu} + h_{j\mu}^\dagger) \right\}$
$f_{1\mu} = \Lambda^{-3[(N-1)/4]} \left\{ \sum_{j=1}^{(N+1)/2} \alpha_{1j} (g_{j\mu} - h_{j\mu}^\dagger) \right\}$	$f_{1\mu} = \Lambda^{-3[(N-1)/4]} \left\{ \sum_{j=1}^{N/2} \hat{\alpha}_{1j} (g_{j\mu} - h_{j\mu}^\dagger) \right\}$

Onde, para N grande e $j \gg 1$, temos

$\eta_j = \Lambda^{j-1}$	$\hat{\eta}_j = \Lambda^{(j-1/2)}$	
$\alpha_{0j} = \alpha_0 \Lambda^{(j-1)/2}$	$\alpha_0 = [\frac{1}{2} (1 - \Lambda^{-1})]^{1/2}$	$\hat{\alpha}_{1j} = \alpha_0 \Lambda^{(j-1/2)/2}$
$\alpha_{1j} = \alpha_1 \Lambda^{2[(j-1)/2]}$	$\alpha_1 = [\frac{1}{2} (1 - \Lambda^{-3})]^{1/2}$	$\hat{\alpha}_{1j} = \alpha_1 \Lambda^{3(j-1/2)/2}$

4.2 Hamiltoniano da Banda Livre com um Potencial Espalhador

Ao trabalharmos com o caso do modelo de Anderson Assimétrico, veremos que alguns pontos fixos do Hamiltoniano de Anderson tenderão aos mesmos pontos fixos de um modelo constituído pelo Hamiltoniano da Banda de condução somado a um potencial espalhador $\tilde{W}$ presente no primeiro sítio da rede. Por esta razão e dada a facilidade de se diagonalizar este modelo, vamos estudá-lo nesta seção .

Para um caso no qual os elétrons da banda de condução são espalhados por um potencial central $\tilde{W}$ presente no sítio ' $f_0^\dagger$ ', podemos representar o sistema pelo seguinte Hamiltoniano

$$H_N^0(\tilde{W}) = \Lambda^{\frac{(N-1)}{2}} \sum_{n=0}^{N-1} \Lambda^{-\frac{n}{2}} \varepsilon_n \left(f_{n\sigma}^\dagger f_{(n+1)\sigma} + f_{(n+1)\sigma}^\dagger f_{n\sigma} \right) + \Lambda^{\frac{(N-1)}{2}} \tilde{W} f_{0\sigma}^\dagger f_{0\sigma} \quad (4.7)$$

onde

$$\tilde{W} = \frac{4}{1 + \Lambda^{-1}} W \quad (4.8)$$

Escrevendo o Hamiltoniano Eq. (4.8) na mesma base $f = (f_{0\sigma}^\dagger, f_{1\sigma}^\dagger, \dots, f_{N\sigma}^\dagger)$ que usamos para diagonalizar H_N^0 então, teremos

$$H_N^0(\tilde{W}) = f^\dagger \mathcal{H}_N^0 f + \mathbb{W}_{\tilde{W}} \quad (4.9)$$

$\mathbb{W}_{\tilde{W}}$ é uma matriz de termos nulos com exceção a $(\mathbb{W}_{\tilde{W}})_{00} = \Lambda^{\frac{(N-1)}{2}} \tilde{W}$. O Hamiltoniano $H_N^0(\tilde{W})$ é portanto quadrático e pode ser diagonalizado analiticamente (10), de maneira bem semelhante a H_N^0 deve-se encontrar para N grande e $j \gg 1$ um ponto fixo em que os autovalores para N par e $j \gg 1$ são da forma

$$\eta_j^\pm = \Lambda^{j-\frac{1}{2} \pm \gamma} \quad (4.10)$$

e cujos autovalores para N ímpar são da forma

$$\hat{\eta}_j^\pm = \Lambda^{(j-1)\pm\gamma} \quad (4.11)$$

γ é a defasagem nos níveis de energia devido ao espalhamento $\tilde{W}$ e está relacionado a esse potencial por

$$\gamma = \frac{-\arctan\left(\pi\alpha_0^2\tilde{W}/\ln\Lambda\right)}{\pi} = \frac{\delta}{\pi} \quad (4.12)$$

aqui definimos o parâmetro $\delta = -\arctan\left(\pi\alpha_0^2\tilde{W}/\ln\Lambda\right)$, para a defasagem.

Dentro do regime de Kondo, pela transformação de Schrieffer-Wolff (como visto em 2.3) Hamiltoniano de Anderson com um potencial espalhador é levado para o Hamiltoniano de Kondo como:

$$H_J(\tilde{W}) = \Lambda^{\frac{(N-1)}{2}} \sum_{n=0}^{N-1} \Lambda^{-\frac{n}{2}} \varepsilon_n \left(f_{n\sigma}^\dagger f_{(n+1)\sigma} + f_{(n+1)\sigma}^\dagger f_{n\sigma} \right) + \Lambda^{\frac{(N-1)}{2}} \tilde{W} f_{0\sigma}^\dagger f_{0\sigma} + \Lambda^{\frac{(N-1)}{2}} \tilde{J} \sum_{\sigma,\nu} f_{0\sigma}^\dagger \vec{\sigma}_{\sigma\nu} f_{0\sigma} \cdot \vec{S} \quad (4.13)$$

onde $\tilde{J} = \frac{4}{1+\Lambda^{-1}}J$, onde J é definido em Eq. (2.9). Para eliminar o potencial espalhador em Eq. (4.13) projetamos H_J numa base tal que g_k são auto-operadores de Eq. (4.13).

$$H_J(\tilde{W}) = \sum_{\sigma,m=0}^{N-1} \epsilon_l g_{l\sigma}^\dagger g_{l\sigma} + J_{\tilde{W}} \sum_{\sigma,\nu} \phi_{0\sigma}^\dagger \vec{\sigma}_{\sigma\nu} \phi_{0\sigma} \cdot \vec{S} \quad (4.14)$$

Com $J_{\tilde{W}} = J \cos^2 \delta_{LM}$, com ϕ_0 sendo

$$\phi_0 = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l g_l \quad (4.15)$$

e também podemos definir

$$\phi_1 = \sqrt{\frac{3}{N}} \sum_l \frac{\epsilon_l}{D} g_l \quad (4.16)$$

No caso sem espalhamento $\tilde{W} = 0$ então $\phi_0 = f_0$, $\phi_1 = f_1$ e voltamos à equação Eq. (2.8). Com $\tilde{W} \neq 0$, no regime de Kondo, os elementos de matriz dos operadores ϕ_0 e ϕ_1 entre dois autoestados do Hamiltoniano H_N são funções universais de N , isto é, dependem apenas da diferença $N - N_K$, onde $k_B T_K = D\Lambda^{-(N_K-1)/2}$. Essa circunstância, descoberta

originalmente por Wilson(14), faz com que as propriedades físicas do Hamiltoniano de Kondo sejam funções universais da temperatura dividida pela temperatura de Kondo, ou da energia dividida por $k_B T_K$.

4.3 Modelo do Nível Ressonante

Quando $\varepsilon_f = 0$ e $U = 0$ no Hamiltoniano de Anderson Eq. (3.23) de modo que a única energia associada à impureza é $\tilde{\Gamma}$. A banda de condução se acopla a um nível ressonante, e o Hamiltoniano H_N^{NR} desse sistema fica :

$$H_N^{NR} = \Lambda^{\frac{(N-1)\sigma}{2}} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n^z (f_{n\sigma}^\dagger f_{(n+1)\sigma} + f_{(n+1)\sigma}^\dagger f_{n\sigma}) + \tilde{\Gamma}^{\frac{1}{2}} (f_{0\sigma}^\dagger c_f + c_{f\sigma}^\dagger f_{0\sigma}) \right\} \quad (4.17)$$

onde $\tilde{\Gamma} = \frac{2\Gamma}{\pi D (1+\Lambda^{-1})}$.

A presença da impureza desloca os níveis de energia. Para ε tal que para $|\varepsilon| < \Gamma$ haverá um forte deslocamento e com $|\varepsilon| \ll \Gamma$ a defasagem de fase será $\frac{\pi}{2}$. Podemos diagonalizar o Hamiltoniano (4.17) assim como feito com H_N^0

$$H_N^{NR} = v^\dagger \mathcal{H}^{NR} v \quad (4.18)$$

onde $v^\dagger = (c_{f\sigma}^\dagger, f_{0\sigma}^\dagger, f_{1\sigma}^\dagger, \dots, f_{N\sigma}^\dagger)$, definindo v , e $\mathcal{H}^{\mathcal{NR}}$ será uma matriz $(N+2) \times (N+2)$ definida por:

$$(\mathcal{H}^{NR})_{1,2} = (\mathcal{H}^{NR})_{2,1} = \Lambda^{\frac{(N-1)}{2}} \tilde{\Gamma}^{\frac{1}{2}} \quad (4.19)$$

$$(\mathcal{H}^{NR})_{n+1,n+2} = (\mathcal{H}^{NR})_{n+2,n+1} = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \tilde{\varepsilon}_{n-1}^z \quad (4.20)$$

Os autovalores do Hamiltoniano assim como os de H_N^0 são simétricos com relação a E_F e no caso de N ímpar haverá um estado a mais localizado em E_F . Nesse modelo teremos

dois pontos fixos que definem dois regimes a se notar e o *crossover* entre os dois pontos fixos é definida pela Γ .

Caso uma energia da banda de condução ϵ seja grande com relação a Γ (N pequeno), podemos desprezar o acoplamento entre a impureza e os estados de condução, o que reduz o Hamiltoniano Eq. (4.20) ao caso do Hamiltoniano H_N^0 Eq. (4.7), de banda livre, o qual define um ponto fixo conhecido como ponto fixo de orbital livre (OL). Para ϵ muito menor (N grande), de tal forma que $\epsilon \ll \Gamma$, definimos um novo ponto fixo no qual os estados da banda estão fortemente acoplados à impureza e as energias da banda de condução são deslocados com relação às energias no ponto fixo de orbital livre. Em especial, no limite $\Gamma \rightarrow \infty$, todos os estados de condução são deslocados por um fator $\frac{\pi}{2}$ com relação aos estados do ponto fixo de Orbital Livre (OL). O novo ponto fixo é chamado Acoplamento Forte (AF).

4.4 Pontos Fixos do Modelo de Anderson Simétrico

Depois de entendermos o Hamiltoniano de Banda Livre na seção 4.1, podemos agora abordar os principais pontos fixos para o Hamiltoniano H_N (equação Eq. (3.23)), no modelo de Anderson simétrico. O processo para encontrar os pontos fixos será o de variar os valores de $\tilde{\Gamma}$ e $\tilde{U}^*$. Para o caso simétrico o Hamiltoniano iterativo é

$$H_N = \Lambda^{\frac{(N-1)}{2}} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n^z (f_n^\dagger f_{n+1} + H.c) + \tilde{\varepsilon}_f c_f^\dagger c_f + \tilde{U} c_{f\uparrow}^\dagger c_{f\uparrow} c_{f\downarrow}^\dagger c_{f\downarrow} + \tilde{\Gamma}^{\frac{1}{2}} (f_0^\dagger c_f + H.c) \right\} \quad (4.21)$$

Partindo desse Hamiltoniano tem-se os seguintes pontos fixos:

*Os resultados tanto dessa seção quanto da próxima, são baseados na classificação de pontos fixos feita nas referências (10)(9)

Ponto Fixo de Orbital Livre. H_{OL}^*

Para $\tilde{\Gamma} = 0$ e $\tilde{U} = 0$, na Eq. (4.4) com $N \rightarrow \infty$ o Hamiltoniano é denotado por $H_{N,OL}$ igual ao Hamiltoniano da banda livre H_N^0 somado ao orbital da impureza.

Existe um ponto fixo bifurcado para a transformação τ^2 (um ramo para $N + 1$ par e outro para $N + 1$ ímpar) as bifurcações são respectivamente H_{OL}^* e $\hat{H}_{OL}^*$ e seus estados são obtidos combinando H^* e $\hat{H}^*$ (Hamiltonianos da banda livre com $N \rightarrow \infty$) com cada um dos quatro estados da impureza ($|\Phi\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle$). Para $N \rightarrow \infty$, $H_{N,OL}$ vai para H_{OL}^* ($N + 1$ par) e $\hat{H}_{N,OL}$ vai para $\hat{H}_{OL}^*$ ($N + 1$ ímpar).

Ponto Fixo de Momento Local. H_{ML}^*

Considerando agora $\tilde{\Gamma}$ fixo e $\tilde{U}$ muito maior do que as energias de interesse, nesse caso, da Eq. (4.4) vemos que o estado no qual o orbital da impureza está duplamente ocupado ($n_f = 2$) se torna energeticamente inacessível assim como para ε_f negativo, podemos descartar o estado de ocupação vazia ($n_f = 0$) ficando apenas os estados da impureza ocupadas por um elétron.

Quando $\tilde{\Gamma} = 0$. A impureza se desacoplada da banda de condução e fazendo $\tilde{U} \rightarrow \infty$ em (4.4) o Hamiltoniano de ponto fixo $H_{N,ML}^*$ é justamente o Hamiltoniano da banda de condução livre H_N^0 (Eq. (4.1)) somado a um momento local desacoplado. Sendo os Hamiltonianos nesse ponto fixo denotados por H_{ML}^* e $\hat{H}_{ML}^*$, e resultam do limite $N \rightarrow \infty$ onde $H_{N,ML}^*$ vai para H_{ML}^* se $(N + 1)$ par e $\hat{H}_{N,ML}$ vai para $\hat{H}_{ML}^*$ se $(N + 1)$ ímpar.

Ponto Fixo de Acoplamento Forte. H_{AF}^*

Considerando agora $\tilde{\Gamma} \rightarrow \infty$ com $\tilde{U}$ fixo, $\tilde{\Gamma}$ tem energia maior que a escala de interesse podendo ignorar-se os estados hibridizados. Assim os estados da impureza são reduzidos ao estado fundamental. Os elétrons da banda de condução se acoplam fortemente com o orbital da impureza, blindando-os. Na prática é como se o operador de banda de condução " f_0 " se ligasse fortemente ao orbital da impureza " c_f " assim se excluindo ambos do sistema, ficamos então com um novo Hamiltoniano de banda livre como dado abaixo:

$$H_{N,FA}^* = \Lambda^{\frac{(N-1)}{2}} \left\{ \sum_{n=1}^{N-1} \Lambda^{-\frac{n}{2}} \varepsilon_n (f_n^\dagger f_{n+1} + H.c) \right\} \quad (4.22)$$

Definindo f_1 como um novo f_0 , f_2 como um novo f_1 e assim por diante, chega-se ao caso do Hamiltoniano da banda Livre Eq. (4.1), onde $\varepsilon_{n'} = \varepsilon_{(n+1)}$ e o ponto fixo $H_{N,AF}^*$ vai para H_{AF}^* para N par e $\hat{H}_{N,AF}^*$ vai para $\hat{H}_{AF}^*$ para N ímpar. Aqui vamos usar a denominação inglesa *Frozen Impurity* (FI) recebida por este ponto fixo.

Este ponto fixo será de importância central nesta dissertação pois estaremos interessados em estudar a densidade espectral para o regime de baixas energias. Com uma energia de excitação $\varepsilon \ll k_B T_K$ o Hamiltoniano se aproxima do ponto fixo FI. Aumentando esta energia de excitação teremos uma região de *crossover* entre os pontos fixos FI e Local Moment (LM) por volta de $\varepsilon \sim k_B T_K$ e no próximo ao ponto fixo ML teremos $k_B T_K \ll \varepsilon \ll \min(|\varepsilon_f|, \varepsilon_f + U, D)$ como definido na (44).

4.5 Pontos Fixos do Modelo de Anderson Assimétrico

Para o modelo de Anderson assimétrico os três pontos fixos discutidos para o caso simétrico reaparecem. Além disso, devido à assimetria, haverá novos pontos fixos, um

relacionado com o ponto fixo AF discutido na seção anterior, o ponto fixo de Orbital Vazio e o da Valência Flutuante. Vamos aqui discutir apenas esses dois novos pontos fixos.

O método aqui é o mesmo que o da seção anterior, substituindo os valores 0 ou ∞ nos parâmetros Γ , ε_f , U e analisar como o modelo se comporta para cada uma dessas situações.

Ponto Fixo da Valência Flutuante. H_{VF}^*

Este ponto fixo é obtido com $\tilde{\Gamma} = \varepsilon_f = 0$ e $\tilde{U} \rightarrow \infty$ o qual corresponde ao caso com ocupação da impureza dada por $n_f = 0$ e $n_f = 1$ degenerados e desacoplados da banda de condução. O estado duplamente ocupado ($n_f = 2$) pode ser desconsiderado (esse estado está fora das energias de interesse aqui).

O Hamiltoniano no ponto fixo será dado pelo Hamiltoniano da banda livre H_N^0 somado ao grau de liberdade da impureza (que tem apenas os possíveis estados $|\Phi\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$). Para $N \rightarrow \infty$, $H_{N,VF}^*$ vai para H_{VF}^* para $N + 1$ par, e $\hat{H}_{N,VF}^*$ vai para $\hat{H}_{VF}^*$ no caso de $N + 1$ ímpar.

Ponto Fixo do Orbital Vazio. H_{OV}^*

Este ponto fixo é obtido com $\tilde{\Gamma} = \tilde{U} = 0$ e $\varepsilon_f = \infty$, o que remove os estados da impureza com ocupação $n_f = 1$ e $n_f = 2$.

Para $N \rightarrow \infty$ o Hamiltoniano H_{OV}^* será o Hamiltoniano da banda livre adicionado a um estado vazio de carga $Q = -1$ (pela definição da Eq. (3.25)).

4.6 Níveis de Energia para o Hamiltoniano H_N

Como vimos nas seções anteriores, os pontos fixos são todos obtidos a partir de escolhas de valores especiais nos parâmetros $\tilde{\Gamma}$, $\tilde{U}$ e $\tilde{\varepsilon}_f$. Agora vamos dar uma olhada cuidadosa nos autovalores η_i do Hamiltoniano H_N (equação Eq. (3.23)) e notar que dependendo do valor N o Hamiltoniano H_N estará próximo de um ponto ou em uma região de *crossover*. Este comportamento acontece para quaisquer valores dos parâmetros $\tilde{\Gamma}$ e $\tilde{U}$ e mudanças nesses valores apenas muda o N onde começa e termina o *crossover* entre dois pontos fixos.

A explicação dessa dependência entre N e os pontos fixos, vem do fato que para cada N par(ímpar) na transformação de grupo de renormalização τ^2 do Hamiltoniano H_N este alcança uma ordem de grandeza menor na energia, assim como explicado na seção 3.7. Abaixo mostramos para os parâmetros do caso assimétrico $\Gamma = 0.006D$, $U = 0.3D$ e $\varepsilon_f = -0.05D$ o gráfico dos autovalores η_i de H_N , onde o índice i varia de baixo para cima no eixo vertical do gráfico e identifica η_i , pela interação N par que abrange cada janela demarcada pelas linhas pontilhadas:

Figura 4.1 – Curvas para a variação dos autovalores η_i (com i inteiro entre 1 e 38) do Hamiltoniano H_N com as iterações $N \rightarrow N + 2$. No gráfico mostram-se quatro regiões distintas, N par entre 22 e 30 onde $H_N \rightarrow H_{FI}^*$ (ponto fixo de Acoplamento Forte), N par entre 16 e 6 onde $H_N \rightarrow H_{ML}^*$ (ponto fixo de Momento Local) as regiões N par entre 22 e 16 e $N = 4$ onde ocorre *crossover* de um ponto fixo para outro. Mais informações no texto.

No gráfico Fig. 4.1 mostramos quatro regiões nas curvas e que mostram apenas os dois pontos fixos de interesse na dissertação, assim temos os pontos fixos de Acoplamento Forte FI e o de momento local LM e a região de *crossover* que é a passagem de um ponto fixo ao outro e uma quarta região representando um segundo *crossover*. Analisando o gráfico dos N maiores para os N menores, temos que para os parâmetros do gráfico os autovalores do Hamiltoniano H_N para N par entre os valores de 22 a 30 se aproxima aos valores dos autovalores do Hamiltoniano H_{FI}^* . Por isso notamos pouca variação em η_i com a variação de N o que caracteriza o platô nessa região.

Para caso de N entre 16 e 22, ocorre agora uma região de *crossover* os autovalores η_i variam muito com uma passagem de N para $N + 2$ e levam os autovalores de um patamar maior no ponto fixo FI para um patamar menor no ponto fixo LM. Com N entre 6 e 16, os autovalores de H_N estão agora próximo ao valor dos autovalores do Hamiltoniano efetivo

H_{ML}^* o que cria um segundo patamar. Por fim note a janela $N = 4$ onde é mostrado um segundo *crossover* que marcaria a passagem para um outro ponto fixo não mostrado no gráfico.

Comparando a duas regiões de ponto fixo em 4.1 notamos que os autovalores η_i tem variações maiores na região próxima do ponto fixo ML . Isto ocorre porque a partir da região de *crossover* entre os pontos fixos FI e ML aparecem diversos fenômenos de *avoided-crossing* (que pode ser facilmente notada no gráfico) que seriam, *grosso modo*, o cruzamento entre duas curvas η_i e η_{i+1} .

Na realidade as duas curvas não chegam realmente a se cruzar mas sim a se aproximar de tal forma que os autovalor de uma curva troca com o da curva vizinha na iteração $N + 2$ seguinte. Este fenômeno adicionam imprecisões na hora em que formos construir o gráfico da densidade espectral no capítulo seguinte.

Densidade Espectral no Modelo de Anderson Simétrico

Para ilustrar o método usado no cálculo da densidade espectral iremos aplica-lo na prática para um caso conhecido. Escolhemos então o Modelo de Anderson Simétrico com uma impureza para este fim.

Estamos interessados aqui no regime de Kondo ($\Gamma \ll \frac{-\varepsilon_f}{2}, \varepsilon_f + U$), assim, as configurações duplamente ocupada do orbital da impureza representado por (f^2) e vazia (f^0) são praticamente excluídas do estado fundamental, restando dois estados de ocupação única (f^1) que se acoplam fortemente com os estados da banda de condução gerando uma interação antiferromagnética entre o momento localizado da impureza e os *spins* da banda de condução.

Este regime é caracterizado pela ressonância de Kondo centrada no nível de Fermi e de largura Γ_K no gráfico da densidade espectral. Frota e Oliveira (8) deduziram uma função universal que descreve esta fenômeno, dada por :

$$\rho_f^S(\varepsilon) = \frac{2}{\pi\Gamma} \text{Re} \sqrt{\frac{i\Gamma_k}{\varepsilon + i\Gamma_K}} \quad (5.1)$$

que é uma função da energia ε com Γ sendo a largura do nível da impureza e Γ_K a largura da ressonância de Kondo dada por $\Gamma_k \simeq \frac{T_k}{2\pi 0.103}$ (T_k é a temperatura de Kondo).

Além disso, pela regra da soma de Friedel (37), que relaciona a defasagem nas energias

com o número médio de ocupação no orbital da impureza $\langle n_f \rangle$, temos a expressão de Langreth para a densidade espectral no nível de Fermi, dada por

$$\rho(0) = \frac{2}{\pi\Gamma} \sin\left(\frac{\pi\langle n_f \rangle}{2}\right)^2 \quad (5.2)$$

onde para o regime de Kondo com ocupação simples, que concorda com a expressão Eq. (5.1) com $\varepsilon = 0$.

$$\rho(0) = \frac{2}{\pi\Gamma} \quad (5.3)$$

Estes resultados conhecidos servirão para testar o método de cálculo da densidade espectral, comparando os pontos que obteremos com a expressão Eq. (5.1) e nosso pico para a densidade espectral do caso simétrico com Eq. (5.2). E além disso, usaremos Eq. (5.1) como ponto de partida na obtenção da expressão fenomenológica da densidade espectral do caso assimétrico que será feito mais adiante.

5.1 Cálculo Numérico da Densidade Espectral.

Como vimos no capítulo 2, a densidade espectral, que segundo a regra de ouro de Fermi, que representa a taxa de transição entre os elétrons da impureza e do metal hospedeiro é dada por:

$$\rho(\varepsilon)^z = \frac{2}{\pi\Gamma} \sum_l |\langle F_l | c_f | I \rangle|^2 \delta(E_{F_l}^z - E_I^z - \varepsilon) \quad (5.4)$$

onde E_I^z é a energia do estado $|I\rangle$, inicial, e $E_{F_l}^z$ do estado $|F_l\rangle$, final, do sistema de muitos corpos com o parâmetro z fixo na discretização da banda de condução. No caso de valores negativos de ε basta substituir c_f por $c_f^\dagger$ e $-\varepsilon$ por ε em Eq. (5.4).

A equação Eq. (5.4) tem como resultado valores discretos para a densidade espec-

tral, devido à discretização logarítmica da banda de condução com um parâmetro z fixo (para $z = 1$ se equivale a discretização inicial proposta por Wilson). Logo o gráfico da densidade espectral será discreto, o que dificulta sua interpretação.

Para conseguirmos obter um contínuo em Eq. (5.4), vamos integrar esta equação no parâmetro z variando em um intervalo unitário $z \in [z_0, z_0 + 1)$ (z_0 real, no nosso programa usamos $z_0 = 0.5$).

Integrando então a equação Eq. (5.4) na variável z , temos :

$$\begin{aligned} \rho(\varepsilon)^z &= \int \rho_z(\varepsilon) dz \\ &= \frac{2}{\pi\Gamma} \sum_l \int |\langle F_l | c_f | I \rangle|^2 \delta(E_{F_l}^z - E_I^z - \varepsilon) \\ &= \frac{2}{\pi\Gamma} \sum_l \frac{|\langle F_l | c_f | I \rangle|^2}{\left| \frac{d\varepsilon}{dz} \right|} \end{aligned} \quad (5.5)$$

onde foi usada a propriedade da delta de Dirac:

$$\delta[\phi(x)] = \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{\left| \frac{d\phi(x)}{dx} \right|_{x=x_i}} \quad (5.6)$$

Precisamos realizar a somatório presente em Eq. (5.5). Para isso, vamos utilizar um método gráfico que será explicado de agora em diante.

Com os dados do programa *Single-Impurity Anderson Model* (SIAM) temos o espectro de energias $\eta(N) = \eta_0(N), \dots, \eta_l(N), \dots, \eta_{MAX}(N)$ e os respectivos elementos $\langle F_l | c_f | I \rangle$ para cada sítio da cadeia iterativa da Fig. 3.4. O índice l organiza os autoestados $\eta_l(N)$ em ordem crescente dentro da iteração N .

Escolhendo uma paridade para N —aqui usaremos N par— e partindo de $N_{MIN} = 6$ * até o valor $N_{MAX} = 30$, teremos como resultado l_{MAX} grupos de dados, o que resulta em uma família de energias [†].

*Para $N < 6$ não temos estados suficientes para trabalhar, por isso é razoável começar por $N_{MIN} = 6$

[†]Aqui $l_{MAX} = 70$ mas este valor pode variar conforme o espectro obtido pelo programa SIAM.

Podemos fazer os gráfico de $\eta_l(N)$ contra uma abscissa variando linearmente com N dentro da paridade escolhida, formando o que é chamado de linhas de fluxo. Da mesma forma, para cada linha de fluxo na energia, podemos montar o gráfico para $\frac{\|\langle F_l | c_f | I \rangle\|^2}{\left| \frac{d\eta_l}{dz} \right|}$ contra a mesma abscissa, onde a derivada $\left| \frac{d\eta_l}{dz} \right|$ é calculada de forma direta usando o espectro de energias que temos para z e o espectro de energias calculado pelo NRG usando a variável $z + dz$ com $dz = 10^{-5}D$ no nosso caso.

Como temos um número limitado de pontos para η_l e consequentemente para $\frac{\|\langle F_l | c_f | I \rangle\|^2}{\left| \frac{d\eta_l}{dz} \right|}$ (130 pontos, ou seja, para cada um dos 13 N 's pares entre $N = 6$ á $N = 30$, 10 valores de z entre $z = 0.5$ e $z = 1.5$) devemos portanto usar uma interpolação (aqui escolhida com 1000 pontos) de modo a aumentar nossa liberdade com relação ao número de pontos dos gráficos e torná-los manejáveis para nossas próximas etapas. Mostramos agora como exemplo a linha de fluxo $\frac{\eta_{20}}{D}$ (onde D é a largura da banda) e o seu correspondente gráfico $\frac{\|\langle F_{20} | c_f | I_{20} \rangle\|^2}{\left| \frac{d\eta_{20}}{dz} \right|}$ mostrado abaixo.

Figura 5.1 – 5.1A - Linha de fluxo $\frac{\eta_{20}}{D}$ X N , a curva é obtida a partir de 1000 pontos de uma interpolação dos 130 pontos η_{20} calculados para N par. 5.1B - Curva $\frac{\|\langle F_{20} | c_f | I_{20} \rangle\|^2}{\left| \frac{d\eta_{20}}{dz} \right|}$ X N respectiva de η_{20}/D obtida por interpolação como 5.1A, a partir dessa curva obteremos um termo do somatório em Eq. (5.5).

No gráfico Fig. 5.1A, temos na escala semilogarítmica uma linha de fluxo. Não é possível reconhecer as regiões dos pontos fixos devido à abscissa usada. Caso usássemos a energia dimensionada $D_{N,z} = (\frac{1+\Lambda^{-1}}{2})\Lambda^{(\frac{N-1}{2})+1-z}$ com N par, as curvas ficariam como na Fig. 4.1 e observaríamos duas regiões aplainadas próximas aos dois pontos fixos e uma região de *crossover* intermediária mostrando a passagem de um ponto fixo ao outro.

As outras linhas de fluxo não representadas são retas praticamente paralelas à reta em 5.1A e localizadas abaixo, para $l < 20$, e acima para $l > 20$. É importante frisar que em nenhum momento essas retas se cruzam pois não existe degenerescência dentro de uma mesma iteração. Mesmo assim, em muitas ocasiões duas curvas se aproximam até uma distância mínima e depois se afastam o que geralmente acarreta em *Avoided Crossing* como podem ser notado na Fig. 4.1.

Já no gráfico Fig. 5.1B, temos a curva $\frac{\|\langle F|c_f|I \rangle\|^2}{|\frac{d\varepsilon}{dz}|}$ correspondente à Fig. 5.1A. Ao contrário das linhas de fluxo, as curvas de $\frac{\|\langle F_l|c_f|I \rangle\|^2}{|\frac{d\eta_l}{dz}|}$ guardam pouca semelhança e cada uma das curvas é um termo do somatório na equação Eq. (5.5). Nosso próximo passo é selecionar a partir das curvas $\frac{\|\langle F_l|c_f|I \rangle\|^2}{|\frac{d\eta_l}{dz}|}$ um ponto do gráfico da densidade espectral $\rho(\varepsilon)$.

Para isso, vamos usar os gráficos de linhas de fluxo. Considerando uma única energia ε , como por exemplo $\varepsilon = 10^{-5}D$, fazemos o gráfico da linha de fluxo como em Fig. 5.1A mas agora inserimos uma reta fixa para a ordenada ε que escolhemos, como é visto no gráfico Fig. 5.2 a seguir:

Figura 5.2 – Intersecção(bola verde) entre a curva de fluxo 5.1A (vermelha) e a reta de ordenada $\epsilon = 10^{-5}D$ (azul). A partir da intersecção é obtido um ponto da curva de $\frac{\|\langle F_l | c_f | I \rangle\|^2}{\left| \frac{d\eta_l}{dz} \right|}$ (Fig. 5.1B) usado no somatório em Eq. (5.5). Esse método de intersecção é repetido para as curvas provenientes de cada termo do somatório Eq. (5.5), variando os ϵ 's e N 's que definem a janela no gráfico (cruzamento entre as retas pontilhadas magentas e cinzas). Para todas as janelas $N \rightarrow N + 2$ com N par, varremos todo o espectro de energia e construímos o gráfico da densidade espectral $\rho(\epsilon)$ (veja o texto).

A intersecção que é representada pela bola verde (destacada pela seta) no encontro entre a curva azul ($\epsilon = 10^{-5}D$) com a curva vermelha (linha de fluxo) nos dá um ponto no qual vamos calcular um dado no gráfico da densidade espectral. Temos também em 5.2 duas retas verticais pontilhadas de cor magenta e duas horizontais cinzas que definem uma janela entre a iteração $N = 16$ e $N = 18$ no eixo x e duas energias no eixo y (no caso $3.10^{-6}D$ e $2.10^{-5}D$) no qual se encontra a intersecção. O gráfico da densidade espectral será construído ao percorrermos cada um dos intervalos de $N \rightarrow N + 2$ partindo de $N = 6$ e simultaneamente escolhendo ϵ 's pertencentes ao respectivo intervalo de energias que definem a janela(um detalhe interessante é que o intervalo em no eixo y aproximadamente abrange uma ordem de grandeza na energia).

Este processo gráfico é equivalente à seleção de energias realizada pela função delta

na Eq. (5.5) para um termo do somatório. Após selecionar um ponto na curva da energia escolhemos o ponto correspondente no gráfico de $\frac{\|\langle F|c_f|I\rangle\|^2}{|\frac{d\varepsilon}{dz}|}$, o que computacionalmente significa encontrar o índice do vetor que guarda as coordenadas do gráfico da energia em que ocorre da intersecção com ε e com este índice selecionar o termo $\frac{\|\langle F|c_f|I\rangle\|^2}{|\frac{d\varepsilon}{dz}|}$ no vetor que guarda as ordenadas do gráfico.

Por fim, para realizar o somatório em Eq. (5.5) repetimos o processo descrito acima para toda a família de curvas $l = 1, 2, \dots, l_{MAX}$, somando os valores de $\frac{\|\langle F|c_f|I\rangle\|^2}{|\frac{d\varepsilon}{dz}|}$ encontrados em cada intersecção, isto calcula a densidade espectral para uma determinada energia ε . Como estamos interessados no gráfico da densidade espectral e não apenas em um ponto do gráfico, devemos realizar este processo para um conjunto de valores de ε , tanto para ε positivo (representando o lado das partículas) quanto para valores de ε negativo (lado dos buracos). Fazendo isso, finalmente chegamos ao gráfico da densidade espectral, o qual vamos mostrar junto com a expressão fenomenológica Eq. (5.1) na próxima seção.

5.2 Caso Simétrico

Figura 5.3 – Densidade espectral do Modelo de Anderson Simétrico. A abcissa foi escolhida de forma alargar o gráfico próximo a $\varepsilon = 0$. As bolas azuis são os dados obtidos pelo método explicado no texto e a curva vermelha é o gráfico da expressão fenomenológica de Frota Eq. (5.1).

Os pontos azuis na Fig. 5.3 foram obtidos a partir do processo que explicamos na seção 5.1, e tem como parâmetros $\varepsilon_f = -0.15D$, $U = 0.3D$ e $\Gamma = 0.01$. Por se tratar do modelo com simétrico, obviamente o gráfico é simétrico com relação a energia de Fermi $\varepsilon = E_F = 0$, por essa razão fizemos um gráfico espelhado, calculamos os pontos do lado das partículas e os reutilizamos para o lado dos buracos.

A aparência alargada do gráfico se deve à escala reduzida no eixo horizontal. Com essa escala, podemos então comparar melhor nossos dados com a curva universal Eq. (5.1) em vermelho. Para essa curva além do parâmetro $\Gamma = 0.01D$ (mesma dos pontos) foi usado $\Gamma_K \simeq 1.98 \times 10^{-07} D$ calculado a partir dos dados do nosso programa (veja maiores detalhes no apêndice C). Sendo assim, não existe ajuste na curva universal do gráfico Fig. 5.3. O

acordo entre os dados e a curva universal é satisfatório para energias $\varepsilon < \Gamma_K$ (o que determina o regime de Kondo). Para energias maiores ($\varepsilon > \Gamma_K$) a própria expressão 5.4 deixa de ser válida e outros efeitos começam a entrar em cena de forma que a discrepância notada é aceitável.

Usando agora a expressão 5.3 para a densidade espectral em $\varepsilon = 0$, substituindo Γ e π , temos para a densidade espectral neste ponto.

$$\rho(0) \simeq 63.662D^{-1} \quad (5.7)$$

Com os dados do gráfico Fig. 5.3 para nossa menor energia $\varepsilon_{min} \simeq 8.991 \times 10^{-12}D$, foi $\rho(\varepsilon_{min}) \simeq 63.660D^{-1}$, ou seja uma diferença $\Delta \simeq 0.002D^{-1}$ com relação ao valor na Eq. (5.7), o que mostra um acordo importante entre nossos dados e a teoria. A pequena discrepância entre os valores pode ser explicado pela própria imprecisão numérica e também pelo argumento de que com ε_{min} podemos ainda não ter chegado rigorosamente no ponto fixo de FI .

5.3 Comparação entre os Casos Simétrico e Assimétrico

Nesta seção vamos começar a abordar o caso assimétrico do modelo de Anderson. Para isso, inicialmente testaremos a expressão de Frota Eq. (5.1) com os pontos obtidos de um caso assimétrico. Não existe nenhuma razão para a Eq. (5.1) ser exata neste caso e mostraremos que realmente não é.

Mostramos a seguir os gráficos da densidade espectral para um caso assimétrico na escala linear e logarítmica. Neles usamos os parâmetros $U = 0.3D$, $\epsilon_f = -5.10^{-2}D$ e $\Gamma = 6.10^{-3}D$ de forma que $-2\epsilon_f \neq U$. Os pontos para os gráficos foram obtidos a partir do método explicado na seção anterior, do apêndice C temos $\Gamma_K \simeq 3.48 \times 10^{-07}D$. Vamos tentar usar a expressão conhecida Eq. (5.1) para descrever a curva do gráfico assimétrico.

Figura 5.4 – Densidade espectral para o modelo de Anderson assimétrico. A - Gráfico nas escala linear onde as bolas azuis são os pontos obtidos numericamente e foram plotados juntamente com a curva vermelha dada expressão de Frota $\rho_f^S(\varepsilon) = \frac{2}{\pi\Gamma} \Re \sqrt{\frac{i\Gamma_K}{\varepsilon + i\Gamma_K}}$, os parâmetros usados estão indicados no gráfico. B - Gráfico na escala logarítmica para o lado dos buracos (correspondendo ao lado esquerdo do gráfico em A). C - Gráfico na escala logarítmica para o lado das partículas (correspondendo ao lado direito do gráfico em A). As diferenças dos pontos com relação a curva vermelha são bem perceptíveis e pode-se concluir que a expressão simétrica encontrada por Frota deixa de ser válida nesse caso (vide o texto).

Na Fig. 5.4A nota-se que expressão para $\rho_f^S(\varepsilon)$ deixa de ser válida no caso assimétrico. Isso já era esperado uma vez que esta função é centrada em zero e simétrica com relação a um eixo vertical passando por seu ponto de máximo. Nota-se também que os

pontos numéricos para os buracos (lado esquerdo ao pico central) em **A** e em escala semilog em Fig. 5.4**B** estão deslocados levemente para esquerda em relação a curva nessa região, para o lado das partículas (lado direito ao pico central) em Fig. 5.4**A** e em escala semilog **vC** novamente existe um deslocamento para a esquerda dos pontos numéricos com relação a curva vermelha, embora seja sutil esse deslocamento para a escala linear de Fig. 5.4**A** (parecendo que o gráfico como um todo esteja levemente rotacionado no sentido horário com relação a um eixo de simetria passando no centro). A escala logarítmica em Fig. 5.4**B** e Fig. 5.4**C** mostra melhor o desacordo com a função $\rho_f^S(\varepsilon)$.

Além das diferenças observadas acima existem outras ainda mais sutis, A ressonância de Kondo deixa ligeiramente de ser centrada em $E_F = 0$ e o pico da ressonância também tem uma altura um pouco menor que o caso simétrico da Fig. 5.3, isso pelo fato do número de ocupação n_f deixar de ser rigorosamente 1.

No geral, pode-se concluir que é necessário encontrar uma nova expressão para melhor descrever a densidade espectral no caso assimétrico, mas embora exista todas essas diferenças com relação ao caso simétrico, a curva assimétrica não sofre mudanças drásticas e podemos intuir que a expressão final a ser obtida para o gráfico assimétrico deve guardar uma semelhança com a expressão Eq. (5.1), o que será explorado na próxima seção, quando deduziremos uma expressão para a densidade espectral do caso assimétrico.

5.4 Expressão Para $\rho_f(\varepsilon)$ no Modelo de Anderson Assimétrico

No capítulo 2 vimos que no Regime de Kondo ($\Gamma \ll \varepsilon_f, 2\varepsilon_f + U$) a transformação de Schrieffer-Wolff (35) leva o Hamiltoniano de Anderson para a forma de Kondo dada por Eq. (2.8) e para o caso simétrico a defasagem é dada por $\delta = \frac{\pi}{2}$ com o operador $f_0(f_1)$ coincidindo com $\phi_0(\phi_1)$.

Para o caso assimétrico teremos agora que defasagem δ será ligeiramente menor que $\frac{\pi}{2}$ e os operadores f_0 e f_1 serão combinações lineares dos operadores ϕ_0 e ϕ_1 , como é demonstrado no apêndice D e escrito abaixo:

$$\langle m | f_i | n \rangle = \sum_{j=0}^1 \alpha_{ij} \langle m | \phi_j | n \rangle \quad (i = 0, 1) \quad (5.8)$$

Onde $\langle m |$ e $\langle n |$ são autoestados do Hamiltoniano de Anderson H_A e α_{ij} ($i, j = 1, 2$) são constantes dependentes de parâmetros do modelo. Precisamos calcular uma expressão para a densidade espectral, que depende do elemento de matriz $\langle m | c_f | n \rangle$. Para isso, vamos primeiramente usar a álgebra de anticomutação partindo do Hamiltoniano de Anderson Eq. (2.6)

$$[H_A, c_k^\dagger] = \varepsilon_k c_k^\dagger + \frac{V}{\sqrt{N}} c_f^\dagger \quad (5.9)$$

e somando em k com a definição $f_0 = \sum_k \frac{c_k}{\sqrt{N}}$ com a nova definição $f_1 = \sqrt{\frac{3}{N}} \sum_k \frac{\varepsilon_k}{D} c_k$ encontramos

$$[H_A, f_0^\dagger] = \frac{1}{\sqrt{3}} f_1^\dagger + V c_f^\dagger \quad (5.10)$$

Calculando agora Eq. (5.10) entre dois estados $|m\rangle$ e $|n\rangle$ do Hamiltoniano H_A com respectivas energias E_m e E_n baixas tal que $E_m, E_n \ll D$, temos

$$V \langle m | c_f^\dagger | n \rangle = (E_m - E_n) \langle m | f_0^\dagger | n \rangle - \sqrt{3} D \langle m | f_1^\dagger | n \rangle \quad (5.11)$$

Pode-se então desconsiderar o termo $(E_m - E_n)$ uma vez que já comentamos que estamos trabalhando com energias muito menores que o valor da largura de banda D , assim

$$\langle m | c_f^\dagger | n \rangle = -\frac{\sqrt{3}}{V} D \langle m | f_1^\dagger | n \rangle \quad (5.12)$$

Onde também passamos V para o lado direito. Usando agora a definição feita em Eq. (5.8) para f_1 , podemos substituir esses valores em Eq. (5.12), ficando com

$$\langle m | c_f^\dagger | n \rangle = \alpha_0 \langle m | \phi_0^\dagger | n \rangle + \alpha_1 \langle m | \phi_1^\dagger | n \rangle \quad (5.13)$$

Dessa forma, escrevemos o elemento de matriz do operador $c_f^\dagger$, em termos dos operadores universais ϕ_0 e ϕ_1 que são válidos também fora dos pontos fixos mas dentro do regime de baixas energias. As constantes α_0 e α_1 incluem a constante $-\frac{\sqrt{3}}{V}D$ em sua definição. O termo $\left| \langle m | c_f^\dagger | n \rangle \right|^2$ é necessário para o cálculo da Regra de Ouro de Fermi:

$$\left| \langle m | c_f^\dagger | n \rangle \right|^2 = \alpha_0^2 \left| \langle m | \phi_0^\dagger | n \rangle \right|^2 + \alpha_1^2 \left| \langle m | \phi_1^\dagger | n \rangle \right|^2 + \alpha_0 \alpha_1 \langle m | \left(\phi_0^\dagger \phi_1 + c.c \right) | n \rangle \quad (5.14)$$

Substituindo Eq. (5.14) na regra de ouro de Fermi (entre os estados iniciais $|m\rangle$ e finais $|n\rangle$), com a constante necessária $\frac{2}{\pi\Gamma}$

$$\begin{aligned} \rho_f(\varepsilon) = \frac{2}{\pi\Gamma} \sum_m \{ & \alpha_0^2 \left\| \langle m | \phi_0^\dagger | n \rangle \right\|^2 + \alpha_1^2 \left\| \langle m | \phi_1^\dagger | n \rangle \right\|^2 \\ & + \alpha_0 \alpha_1 \langle m | \left(\phi_0^\dagger \phi_1 + c.c \right) | n \rangle \} \delta(E_m - E_n - \varepsilon) \end{aligned} \quad (5.15)$$

E para simplificar a notação reescrevemos Eq. (5.15) abaixo :

$$\rho_f(\varepsilon) = \alpha_0^2 \rho_0(\varepsilon) + \alpha_1^2 \rho_1(\varepsilon) + \alpha_0 \alpha_1 \rho_{01}(\varepsilon) \quad (5.16)$$

Com as densidades espectrais $\rho_0(\varepsilon)$, $\rho_1(\varepsilon)$ e $\rho_{01}(\varepsilon)$ sendo

$$\rho_j(\varepsilon) = \frac{2}{\pi\Gamma} \sum_m \left| \langle m | \phi_j^\dagger | n \rangle \right|^2 \delta(E_m - E_n - \varepsilon) \quad (j = 0, 1) \quad (5.17)$$

e

$$\rho_{01}(\varepsilon) = \frac{2}{\pi\Gamma} \sum_m \langle m | \left(\phi_0^\dagger \phi_1 + c.c \right) | n \rangle \delta(E_m - E_n - \varepsilon) \quad (5.18)$$

Para calcular os valores ρ_0 e ρ_1 vamos usar funções de Green. No apêndice E mostramos que a função de Green retardada para o Hamiltoniano de Anderson Simétrico é dada por:

$$G_{kk'}^S(\epsilon) = G_k^{(0)}(\epsilon) \delta_{kk'} + \frac{V^2}{N} G_k^{(0)}(\epsilon) G_f^S(\epsilon) G_{k'}^{(0)}(\epsilon) \quad (5.19)$$

onde G_f^S é a função de Green retardada para o nível da impureza no Hamiltoniano de Anderson simétrico e

$$G_k^{(0)}(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon - \epsilon_k + i s} \quad (5.20)$$

é a função de Green retardada para os elétrons da banda de condução onde $s \rightarrow 0^+$. Da definição da função espectral (34)

$$\rho_{ij}(\epsilon^+) = -\frac{1}{\pi} \Im G_{ij}(\epsilon^+) \quad (5.21)$$

e das definições de f_0 , f_1 e Eq. (5.19) fica fácil mostrar que :

$$\rho_0(\epsilon, T) = -\frac{1}{\pi N} \Im \sum_{kk'} G_{kk'}^S(\epsilon) \quad (5.22)$$

$$\rho_1(\epsilon, T) = -\frac{3}{\pi N D^2} \Im \sum_{kk'} \epsilon_k \epsilon_{k'} G_{kk'}^S(\epsilon) \quad (5.23)$$

Como estamos trabalhando com energias menores que a largura da banda D tal que $\epsilon \ll D$, podemos usar o teorema de Sokhatsky–Weierstrass (45) para a equação Eq. (5.20) resultando que

$$G_k^{(0)}(\epsilon) = \frac{2\epsilon}{D} - i\pi\delta(\epsilon - \epsilon_k) \quad (5.24)$$

substituindo esta aproximação na Eq. (5.19), desprezando termos de ordem $O\left(\frac{\epsilon}{D}\right)$ na expressão resultante para $G_{kk'}^S(\epsilon)$ fica fácil calcular os somatórios em Eq. (5.22) e Eq. (5.23) :

$$\rho_0(\epsilon, T) = \rho - \frac{\rho\pi\Gamma}{2} \rho_f^S(\epsilon, T) \quad (5.25)$$

$$\rho_1(\epsilon, T) = \frac{3\rho\Gamma}{\pi} \rho_f^S(\epsilon, T) \quad (5.26)$$

Conseguimos assim relacionar as densidades ρ_0 e ρ_1 definidas em Eq. (5.17) com a densidade espectral para o nível da impureza no caso simétrico ρ_f^S que é dado pela equação Eq. (2.13).

Substituindo agora Eq. (5.25) Eq. (5.26) em Eq. (5.16):

$$\begin{aligned}
 \rho_f(\varepsilon) &= \alpha_0^2 \rho_0(\varepsilon) + \alpha_1^2 \rho_1(\varepsilon) + \alpha_0 \alpha_1 \rho_{01}(\varepsilon) \\
 &= \alpha_0^2 \left(\rho - \frac{\rho \pi \Gamma}{2} \rho_f^S(\varepsilon, T) \right) + \alpha_1^2 \left(\frac{3 \rho \Gamma}{\pi} \rho_f^S(\varepsilon, T) \right) + \alpha_0 \alpha_1 \rho_{01}(\varepsilon) \\
 &= \alpha_0^2 \rho - \rho \frac{\pi \Gamma}{2} \rho_f^S(\varepsilon, T) \left[\alpha_0^2 - \frac{6}{\pi^2} \alpha_1^2 \right] + \alpha_0 \alpha_1 \rho_{01}(\varepsilon)
 \end{aligned} \tag{5.27}$$

Observa-se que α_0 e α_1 são constantes independentes do regime de energias e do ponto fixo no qual se encontra o modelo. Dessa forma, para calcular a dependência das constantes como função da defasagem δ , vamos usar o modelo de Anderson simétrico nos pontos fixos FI e LM com a densidade espectral dada por Eq. (F.17) calculadas no apêndice F. No caso simétrico devido a transformação $c_k \rightarrow c_k^\dagger$ e $c_f \rightarrow -c_f^\dagger$ ocorre uma inversão de sinal no produto $\langle m | (\phi_0^\dagger \phi_1 + c.c) | n \rangle$ o que resulta por simetria partícula-buraco em $\rho_{01}(\varepsilon, T) = 0$.

Para o ponto fixo de LM por Eq. (F.17) tem-se $\rho_f^{LM} = \frac{2}{\pi \Gamma} \cos^2(\delta)$ e $\rho_f^S = 0$, assim, para o caso simétrico em Eq. (5.27):

$$\frac{2}{\pi \Gamma} \cos^2(\delta) = \alpha_0^2 \rho \implies \alpha_0^2 = \frac{2 \cos^2(\delta)}{\pi \Gamma \rho} \tag{5.28}$$

No ponto fixo FI, $\rho_f^S = \frac{2}{\pi \Gamma}$, substituindo em Eq. (5.27) fica portanto:

$$\frac{2}{\pi \Gamma} \sin^2(\delta) = \alpha_1^2 \frac{3 \rho \Gamma}{\pi} \frac{2}{\pi \Gamma} \implies \alpha_1^2 = \left(\frac{\pi^2}{6} \right) \frac{2}{\pi \Gamma} \frac{\sin^2(\delta)}{\rho} \tag{5.29}$$

De Eq. (5.29) Eq. (5.28) e Eq. (2.6) $\left(\rho_f^S(\varepsilon) = \frac{2}{\pi \Gamma} \Re \sqrt{\frac{i \Gamma_K}{\varepsilon + i \Gamma_K}} \right)$ em Eq. (5.27) já fazendo as simplificações necessárias, resulta em:

$$\begin{aligned}
 \rho_f(\varepsilon) &= \frac{2}{\pi \Gamma} \cos^2(\delta) - \frac{2}{\pi \Gamma} \Re \sqrt{\frac{i \Gamma_K}{\varepsilon + i \Gamma_K}} [\cos^2(\delta) - \sin^2(\delta)] + \\
 &\quad + \frac{2}{\pi \Gamma} \cos(\delta) \sin(\delta) \frac{\pi}{\sqrt{6} \rho} \rho_{01}(\varepsilon)
 \end{aligned} \tag{5.30}$$

Não vamos calcular $\rho_{01}(\varepsilon)$. O cálculo desse termo a partir dos operadores ϕ_0 e ϕ_1 pode se revelar demasiado complicado para ser feito analiticamente. Em lugar disso, vamos

propor que $\rho_{01}(\varepsilon)$ é proporcional à parte imaginária do número complexo na expressão de Frota $\left(\sqrt{\frac{i\Gamma_K}{\varepsilon+i\Gamma_K}}\right)$.

Isso porque ρ_{01} é proporcional à parte imaginária de $\sum_k G_{k,f}$. Segundo a Eq. (E.15), por outro lado, $G_{k,f}$ é proporcional a $G_{f,f}$. Mais especificamente, temos que

$$\rho_{01} \sim V \sum_k \frac{1}{\varepsilon - \epsilon_k} G_{f,f} = -i\pi V \rho G_{ff}(\epsilon), \quad (5.31)$$

onde usamos Eq. (5.20) e Eq. (5.24) e desconsideramos a parte real da soma $\sum_k 1/(\varepsilon - \epsilon_k)$, que é da ordem de ϵ/D . Vemos assim que ρ_{01} é proporcional à parte real de G_{ff} . Admitindo que, como sugerido pela Eq. (5.1), esta função de Green seja proporcional a $i\sqrt{1/(1 - i\epsilon/\Gamma_K)}$, chegamos à expressão

$$\rho_{01}(\varepsilon) = \frac{2\sqrt{6}\rho}{\pi} \Im \sqrt{\frac{i\Gamma_K}{\varepsilon + i\Gamma_K}} \quad (5.32)$$

Com o auxílio das relações trigonométricas $\cos(2\delta) = \cos^2(\delta) - \sin^2(\delta)$ e $\sin(2\delta) = 2\sin(\delta)\cos(\delta)$ junto com Eq. (5.32) em Eq. (5.30), temos que

$$\rho_f(\varepsilon) = \frac{2}{\pi\Gamma} \left\{ \cos^2(\delta) - \Re \sqrt{\frac{i\Gamma_K}{\varepsilon + i\Gamma_K}} \cos(2\delta) + \sin(2\delta) \Im \sqrt{\frac{i\Gamma_K}{\varepsilon + i\Gamma_K}} \right\} \quad (5.33)$$

Identificando o número complexo $z = \sqrt{\frac{i\Gamma_K}{\varepsilon + i\Gamma_K}}$ com sua forma polar $z = |z| [\cos(\theta) + i\sin(\theta)]$ e substituindo em Eq. (5.33) com a ajuda da relação trigonométrica $\cos(\theta + 2\delta) = \cos(\theta)\cos(2\delta) - \sin(\theta)\sin(2\delta)$ resulta

$$\boxed{\rho_f(\varepsilon) = \frac{2}{\pi\Gamma} \left\{ \cos^2(\delta) - \Re \left[\sqrt{\frac{i\Gamma_K}{\varepsilon + i\Gamma_K}} e^{-2i\delta} \right] \right\}} \quad (5.34)$$

que é o principal resultado da dissertação.

Esta equação deve ser válida tanto para o caso simétrico quanto para o assimétrico. No caso simétrico temos $\delta = \frac{\pi}{2}$ em Eq. (5.34) e voltamos ao resultado de Frota Eq. (2.13). No próximo capítulo vamos testar a eficiência de Eq. (5.34) no caso assimétrico.

Resultados

6.1 Densidade Espectral no Modelo de Anderson Assimétrico

Como visto no capítulo 2, temos um caso assimétrico no modelo de Anderson quando $2\varepsilon_f + U \neq 0$. O exemplo escolhido aqui tem como parâmetros $U = 0.3D$, $\varepsilon_f = -5.10^{-2}D$ (respeitando a condição de assimetria) e $\Gamma = 6.10^{-3}D$ vamos então avaliar a densidade espectral para o espectro de baixas energias até a ordem largura D .

Além dos parâmetros já citados, existe ainda a semi-largura $\Gamma_K \simeq 3.48 \times 10^{-07}D$ e a defasagem $\delta_W^* \approx -0.057$ calculadas pelo procedimento explicado no Apêndice C. Vamos portanto comparar os dados numéricos da densidade espectral desse caso com a curva universal Eq. (5.34) deduzida no capítulo anterior e que reescrevemos aqui:

$$\rho_f^{AS}(\varepsilon) = \frac{2}{\pi\Gamma} \left\{ \cos^2(\delta) - \Re \left[\sqrt{\frac{i\Gamma_K}{\varepsilon + i\Gamma_K}} e^{-2i\delta} \right] \right\} \quad (6.1)$$

Fazendo o gráfico da densidade espectral $\rho_f(\varepsilon)$ contra um eixo horizontal $\sqrt{\varepsilon}$, escolhido para alargar a pico na energia de Fermi, temos o resultado mostrado na Fig. 6.1. O gráfico mostra um acordo muito bom entre a expressão Eq. (6.1) e os dados numéricos para as energias $\varepsilon < \Gamma_K$ (o que corresponde ao último grupo de pontos próximo ao pico). Assim como ocorreu na expressão de Frota no gráfico Fig. 5.3, conforme ε aumenta ficando

maior que Γ_K a expressão universal deixa de ser válida. Isto pode ser explicado pela ampliação do efeito de operadores irrelevantes não considerados nas regiões próximas à energias características(44).

Figura 6.1 – Densidade espectral para o modelo de Anderson assimétrico. As bolas azuis são os pontos obtidos numericamente e foram plotados juntamente com a curva vermelha dada pela expressão Eq. (6.1). Os parâmetros estão indicados no gráfico. Assim como no gráfico Fig. 5.3, usamos um eixo horizontal dado por $\sqrt{\epsilon}$ para alargar o pico de Kondo e facilitar a visualização. A Eq. (6.1) descreve muito melhor os resultados numéricos do que a curva sólida na Fig. 5.4A .

Por se diferenciar da expressão para ρ_f^S apenas pela existência do fator $\delta = \frac{\pi}{2} + \delta_{W^*}$ e por δ_{W^*} não chegar a 4% de $\pi/2$, fica claro porque a assimetria do pico de Kondo é tão pequena em relação ao caso simétrico. Usando novamente a escala logarítmica para compararmos com as curvas Fig. 5.4B e Fig. 5.4C temos:

Na Fig. 6.2 é possível visualizar as diferentes ordens de grandezas envolvidas e principalmente os pontos no regime de baixas energias no qual o Hamiltoniano de Anderson se aproxima de H_{FI}^* que é o platô localizado mais acima.

Figura 6.2 – Densidade espectral para o modelo de Anderson assimétrico na escala logarítmica. 6.2A - Gráfico para o lado dos buracos(lado esquerdo de 6.1). 6.2B - Lado das partículas (lado direito de 6.1). Comparando esses gráficos com os 5.4B e 5.4C temos que mesmo havendo oscilações nos dados numéricos que dificultam um pouco a interpretação, no geral, o acordo entre a curva proposta Eq. (6.1) e os pontos numéricos é bom, praticamente não existindo o deslocamento para esquerda dos pontos numéricos azuis para os pontos da curva vermelha proposta.

Verificamos novamente um bom acordo dos pontos numéricos com a curva de $\rho_f^{AS}(\epsilon)$ para a região de baixas energias e menores que $\Gamma_K \simeq 3.48 \times 10^{-07} D$. Neste gráfico também aparecem as imprecisões numéricas que surgem quando a intersecção feita no gráfico Fig. 5.2 é localizada na transição $N \rightarrow N + 2$, o que cria uma imprecisão no último (olhando da direita para esquerda) ponto de cada um dos grupos de 5 pontos para cada ordem de grandeza da energia. Mais uma vez ainda, nota-se que para energias bem maiores que Γ_K conforme se aproximando da energia D a função $\rho_f^{AS}(\epsilon)$ que propusemos deixa de ser válida, assim como foi observado em todos os gráficos de densidade espectral vistos até o momento .

Vamos fazer agora uma última comparação entre o gráfico para a função $\rho_f^S(\epsilon)$ e $\rho_f^{AS}(\epsilon)$ sem mostrar os resultados numéricos. Traçamos assim quatro gráficos, cada um em uma determinada escala e em todos a curva preta é a expressão de Frota e a vermelha a Eq. (6.1). A intenção obviamente é o de mostrar em detalhes as características que difere uma expressão da outra.

Figura 6.3 – Gráficos comparativos entre as expressões dos casos simétrico e assimétrico. Os parâmetros são os mesmos de todos os gráficos assimétricos anteriores. 6.3A - Densidade espectral na escala linear, note que assim como afirmado 5.4A ρ_f^{AS} é ligeiramente rotacionado no sentido horário comparado à ρ_f^S que é simétrico com relação ao eixo passando em $E_F = 0$. 6.3B - Um *zoom* do gráfico 6.3A já é o suficiente para mostrar que discrepância entre as curvas está presente em praticamente todo o espectro de energias além de enfatizar o descrito para 6.3A. 6.3C - Escala logarítmica para a parte das partículas mostra o deslocamento no sentido esquerdo da região de *crossover* da curva assimétrica com relação a simétrica. Para as regiões próximas aos pontos fixos, é notável que a curva assimétrica se encontra abaixo da simétrica para a FI e que ambas se cruzam invertendo a situação em LM. 6.3D- Gráfico loglog no qual podemos ver o exato ponto onde ρ_f^S e ρ_f^{AS} se cruzam, todavia para a região de cruzamento ambas as curvas já não descrevem corretamente os pontos obtidos numericamente (veja Fig. 5.4C e Fig. 6.2B).

Na Fig. 6.3 usamos os mesmos dados do gráfico Fig. 6.1. Em Fig. **6.3A**, feito na escala linear, é interessante ver que a curva vermelha apresenta as mesmas características que os dados numéricos em Fig. (5.4A) (não considerando as oscilações presentes nos pontos numéricos), ou seja, é levemente rotacionado no sentido horário com relação à curva simétrica outras características como diferença na altura e localização do pico não são evidentes neste gráfico.

Diminuindo um pouco os limites de ε em Fig. 6.3A chegamos a Fig. 6.3B. Esse gráfico mostra melhor o comentado em relação a Fig. 6.3A e podemos analisar a real discrepância para todo o espectro de energia abordado.

Fazendo por fim, dois gráficos na escala logarítmica para a metade do gráfico referente a partículas, um na escala semilog Fig. 6.3C e outro da loglog Fig. 6.3D, podemos destacar que além do deslocamento de um gráfico ao outro na região de *crossover* para a região próxima ao ponto fixo de FI a curva assimétrica está abaixo da simétrica, o que é compreensível, uma vez que neste caso é esperado uma ocupação ligeiramente menor que à unitária do caso simétrico. E além disso, ambas as curvas se cruzam em uma região de energias maiores próxima ao ponto fixo de ML. Nessa última região todavia não estamos mais no regime de baixas energias e ambas as curvas não representam fielmente os dados numéricos.

Por último, vamos fazer uma análise quantitativa direta entre as expressões $\rho_f^{AS}(\varepsilon)$ e $\rho_f^S(\varepsilon)$ com os dados numéricos. Para isso, é feito o gráfico mostrado a seguir, do módulo da diferença $|\rho_f^{data} - \rho_f^{(AS)}|$ e $|\rho_f^{data} - \rho_f^{(S)}|$, com ρ_f^{data} sendo os dados numéricos.

Figura 6.4 – Erro entre os dados numéricos do caso assimétrico e as expressões de ρ_f . **A**- Gráfico para o lado dos buracos(lado esquerdo de 6.1). **B** - Gráfico para o lado das partículas(lado esquerdo de 6.1). Em geral nota-se que os erros do expressão ρ_f^{AS} (bolas azuis) por nós proposta é menor que o erro para a fórmula de Frota(bolas vermelhas) para praticamente todas as ordens de ε .

Na figura fig: 6.4 acima, temos a diferença entre os dados numéricos e as expressões $\rho_f^{AS}(\varepsilon)$ (bolas azuis) e $\rho_f^S(\varepsilon)$ (bolas vermelhas), não calculamos diretamente o erro relativo

(dado por $\frac{|\rho_f^{data} - \rho_f^{As(S)}|}{\rho_f^{data}} \times 100$), pois a escala inserida por essa expressão não permitiria analisar com cuidado o erro na região do ponto fixo FI.

Note que em ambos **A** e **B**, tanto na região do ponto fixo FI (energias menores que 10^{-7}) quanto na ponto fixo ML (energias maiores que 10^{-5}) a expressão proposta Eq. (6.1) apresenta erro menor que o da expressão de Frota Eq. (5.1). Já na região de *crossover* estão grandes discrepâncias com os dados numéricos, devido a dificuldade computacional para se calcular a densidade espectral nessa região. Mesmo assim, os pontos representados pelas bolas azuis matêm erro menor para a maioria dos pontos se comparados com os de bolas vermelhas.

Outro detalhe importante é que o erro na região do ponto fixo de Momento local LM é maior que o do ponto fixo do orbital congelado FI, isto se deve ao fato já explicado no qual para a região de energias maiores, efeitos não universais dependentes do parâmetro Γ começam a influenciar na densidade espectral. Podemos então calcular o erro relativo para os dados dos gráficos. Este se aproximará de 100% próximo ao ponto fixo *LM*, não chegando a 20% na região de *crossover* e por fim sendo menor do que 1% próximo ao ponto fixo FI.

Obviamente a expressão ρ_f^S de Frota não seria completamente adequada para descrever o gráfico da densidade espectral do caso assimétrico por causa do seu caráter simétrico e da ausência do termo δ em sua expressão. Comparamos os gráficos porque, uma vez que assimetria é pequena, a Eq. (5.1), de Frota, é aproximadamente correta. As figuras discutidas permitem avaliar as discrepâncias entre $\rho_f^{AS}(\epsilon)$ e $\rho_f^S(\epsilon)$ com maior cuidado.

Conclusão

Nessa dissertação trabalhamos com o modelo de Anderson (Hamiltoniano Eq. (2.4)) que descreve a interação de impurezas magnéticas em metais (ou sistemas equivalentes). Para o regime de Kondo de baixas energias onde os parâmetros energéticos do Hamiltoniano favorecem a ocupação simples do orbital da impureza, propusemos uma expressão para a densidade espectral do modelo de Anderson assimétrico que descreve a ressonância de Kondo no nível de Fermi para quaisquer parâmetros ε_f , U e Γ dentro do regime, mesmo na ausência de simetria de troca entre partícula e o buraco no Hamiltoniano de Anderson ($2\varepsilon_f + U = 0$ na Fig. 2.2).

No capítulos 1 fizemos uma introdução histórica do problema de impurezas em metais. Nele descrevemos o problema de Kondo, o método do NRG e os últimos avanços experimentais e teóricos. Apresentamos no capítulo 2 uma análise sobre o modelo de Anderson mostrando sua relação com o Hamiltoniano de Kondo e os casos simétrico e assimétrico. Discorremos em especial sobre o modelo simétrico e sua relação com a função de Frota (expressão Eq. (2.13)) para a densidade espectral que dá a taxa de transição para o orbital da impureza.

No terceiro capítulo demos detalhes sobre o método do grupo de renormalização numérico, que foi proposto por Wilson para solucionar o problema de Kondo e que, nesta dissertação, foi usado para diagonalizar o Hamiltoniano de Anderson, criando os arquivos de dados necessários para o cálculo numérico da densidade espectral.

O capítulo 4 discutiu os Hamiltonianos de banda livre, potencial espalhador e nível ressonante, além dos pontos fixos do Hamiltoniano de Anderson. Os Hamiltonianos discutidos são importantes uma vez que nas proximidades de algum ponto fixo podemos simplificar o problema ao trabalharmos com um Hamiltoniano equivalente mais simples de se diagonalizar do que o Hamiltoniano de Anderson. Por exemplo, para o Regime de Kondo nas proximidades do ponto fixo de FI, os autovalores do Hamiltoniano de Anderson se aproximam aos autovalores de um Hamiltoniano de ponto fixo que pode ser representado por um Hamiltoniano de potencial espalhador.

No capítulo 5 iniciamos a principal parte da dissertação. Nela primeiramente apresentamos o método numérico que transforma os dados contidos nos arquivos produzidos pelo NRG no gráfico da densidade espectral. Isso é feito a partir das curvas dos autovalores do Hamiltoniano de Anderson no passo N da diagonalização iterativa (Fig. 5.1A) e dos elementos de matriz também pela iteração N (Fig. 5.1B). É a partir da intersecção de uma energia ε escolhida com a curva do autovalor (como foi mostrado no gráfico em Fig. 5.2) que encontramos um ponto na Fig. 5.1B. Repetido o procedimento para todas as curvas de autovalores e somados os resultados, encontramos a densidade espectral na energias ε .

Logo em seguida, testamos o método exposto em um caso simétrico do modelo de Anderson comparando-o com a expressão de Frota. Vencida essa etapa, qualificamo-nos para trabalhar com o modelo assimétrico. Foi então a vez de comparar os resultados numéricos para o caso assimétrico com a expressão de Frota. O resultado mostra que os pontos no caso assimétrico são ligeiramente deslocados de maneira que o gráfico formado pelos pontos numéricos parece rotacionado no sentido horário com relação a curva do caso simétrico (Fig. 5.4). Essa rotação, o deslocamento do máximo em relação ao nível de Fermi e o número de ocupação do orbital ligeiramente inferior a 1 evidenciaram a necessidade de se encontrar uma nova expressão para a densidade assimétrica.

Ainda no capítulo 5, para encontrar uma expressão da densidade espectral para o caso assimétrico, primeiramente, usando alguns cálculos escrevemos o elemento de matriz do operador para o nível da impureza c_f entre os estados do Hamiltoniano de Anderson no regime de Kondo como combinação dos elementos de matriz para os operadores ϕ_0

e ϕ_1 (equação Eq. (5.13)). Isso porque ϕ_0 e ϕ_1 são combinações lineares dos operadores g_l que diagonalizam o Hamiltoniano simétrico de ponto fixo e, portanto conduzem o Hamiltoniano em sua trajetória universal. Seguindo, quadramos a expressão Eq. (5.13) e escrevermos as densidades espectral ρ_f como combinação linear das densidades ρ_0, ρ_1 e ρ_{01} (Eq. (5.16)).

Usamos as funções de Green para relacionar ρ_0 e ρ_1 com a ρ_f^S simétrica de Frota, logo em seguida calculamos as constantes da combinação linear em (Eq. (5.16)) como dependentes do deslocamento de fase δ . Não calculamos ρ_{01} devido a dificuldade da tarefa, fizemos no lugar uma consideração chave na dissertação ao chamarmos ρ_{01} como uma função proporcional a parte imaginária de ρ_f^S . Assim, com um pouco mais de álgebra chegamos na expressão Eq. (5.34) (que chamamos de ρ_f^{AS}) como a expressão universal da densidade espectral no caso assimétrico.

Com a expressão de ρ_f^{AS} em mãos, fizemos um teste no capítulo 6: calculamos a densidade espectral do nível da impureza para um Hamiltoniano assimétrico e comparamos com a expressão derivada. Resultou bom acordo, dentro da precisão do cálculo numérico. Nossa expressão explica porque a assimetria do modelo tem pouca influência sobre a densidade espectral: uma vez que a regra da soma de Friedel amarra o deslocamento de fase dos elétrons de condução à ocupação da impureza, δ nunca pode afastar-se muito de $\frac{\pi}{2}$ no regime de Kondo. Por isso, a densidade de estados está sempre próxima de uma função par da energia, isto é, sempre próxima da densidade espectral do modelo simétrico.

Como sugestão de trabalhos futuros, podemos trabalhar com a densidade espectral devido ao elemento de matriz do operador f_0 , em lugar de c_f . Quando a ponta de prova está em sítio distinto da impureza, a microscopia STM mede a densidade espectral de uma combinação linear entre c_f e f_0 , sendo que o peso do último orbital predomina a distâncias superiores a alguns Angstroms. Uma vez que a ocupação do orbital f_0 é independente do deslocamento de fase, a densidade espectral do operadores f_0 pode ser substancialmente mais assimétrica do que a do operadores c_f .

Este tipo de abordagem já foi desenvolvido para o cálculo numérico da condutância

em nanomateriais (veja nas referências (44)(46)). Considerando duas configurações no modelo, a primeira colocando o ponto quântico acoplado entre os dois fios quânticos (nesse caso é medido a condutância dependente do operador c_f) a segunda acoplando o ponto lateralmente a um fio quântico, na primeira mede-se a condutância através da impureza, enquanto na segunda se mede a condutância através de f_0 . Na segunda configuração a condutância é bem mais sensível a variação dos parâmetros.

Pode-se então comparar a função aqui proposta para dados experimentais obtidas por STM, a medida da densidade espectral para o operador c_f correspondente a medirmos com a ponta exatamente em cima da impureza, enquanto que a medida de f_0 seria feita com a ponta localizada marginalmente mas próximo a impureza.

REFERÊNCIAS

- 1 KONDO, J. Resistance minimum in dilute magnetic alloys. *Progress of Theoretical Physics*, Kyoto, v. 32, n. 1, p. 37–49, 1964.

- 2 DE HAAS, W.; DE BOER, J.; VAN DËN BERG, G. The electrical resistance of gold, copper and lead at low temperatures. *Physica*, v. 1, n. 7-12, p. 1115 – 1124, 1934.

- 3 OLIVEIRA, L.; LIBERO, V.; FROTA, H.; YOSHIDA, M. Renormalization-group calculation of dynamical properties for impurity models. *Physica B: condensed matter*, v. 171, n. 1-4, p. 61–68, 1991.

- 4 MADHAVAN, V.; CHEN, W.; JAMNEALA, T.; CROMMIE, M. F.; WINGREEN, N. S. Tunneling into a single magnetic atom: spectroscopic evidence of the kondo resonance. *Science*, Washington, v. 280, n. 5363, p. 567–569, 1998.

- 5 ZHAO, A.; LI, Q.; CHEN, L.; XIANG, H.; WANG, W.; PAN, S.; WANG, B.; XIAO, X.; YANG, J.; HOU, J. G.; ZHU, Q. Controlling the Kondo effect of an adsorbed magnetic ion through its chemical bonding. *Science*, Washington, v. 309, n. 5740, p. 1542–1544, 2005.

- 6 FU, Y.-S.; JI, S.-H.; CHEN, X.; MA, X.-C.; WU, R.; WANG, C.-C.; DUAN, W.-H.; QIU, X.-H.; SUN, B.; ZHANG, P.; JIA, J.-F.; XUE, Q.-K. Manipulating the kondo resonance through quantum size effects. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 99, p. 256601, Dec 2007.

- 7 PRUSER, H.; WENDEROTH, M.; DARGEL, P. E.; WEISMANN, A.; PETERS, R.; PRUSCHKE, T.; ULBRICH, R. G. Long-range Kondo signature of a single magnetic impurity. *Nature Physics*, v. 7, n. 3, p. 203–206, Mar. 2011.

- 8 FROTA, H. O.; OLIVEIRA, L. N. Photoemission spectroscopy for the spin-degenerate Anderson model. *Physical Review B*, v. 33, n. 11, p. 7871–7874, Jun 1986.

- 9 KRISHNA-MURTHY, H. R.; WILKINS, J. W.; WILSON, K. G. Renormalization-group approach to the Anderson model of dilute magnetic alloys. II. static properties for the asymmetric case. *Physical Review B*, v. 21, n. 3, p. 1044–1083, Feb 1980.

- 10 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. *Physical Review B*, v. 21, n. 3, p. 1003–1043, Feb 1980.

- 11 ANDERSON, P. W. Localized magnetic states in metals. *Physical Review*, New York, v. 124, n. 1, p. 41–53, Oct 1961.
- 12 SUHL, H. Dispersion theory of the Kondo effect. *Physical Review*, New York, v. 138, p. A515–A523, Apr 1965.
- 13 WILSON, K. G.; KOGUT, J. The renormalization group and the [epsilon] expansion. *Physics Reports*, v. 12, n. 2, p. 75–199, 1974.
- 14 WILSON, K. G. The renormalization group: critical phenomena and the Kondo problem. *Review of Modern Physics*, v. 47, n. 4, p. 773–840, Oct 1975.
- 15 TSVELICK, A.; WIEGMANN, P. Exact results in the theory of magnetic alloys. *Advances in Physics*, London, v. 32, n. 4, p. 453–713, 1983.
- 16 ANDREI, N.; FURUYA, K.; LOWENSTEIN, J. H. Solution of the Kondo problem. *Review of Modern Physics*, v. 55, p. 331–402, Apr 1983.
- 17 WIEGMANN, P. B.; TSVELICK, A. M. Exact solution of the Anderson model: I. *Journal of Physics C: solid state physics*, v. 16, n. 12, p. 2281, 1983.
- 18 TSVELICK, A. M.; WIEGMANN, P. B. Exact solution of the Anderson model. II. thermodynamic properties at finite temperatures. *Journal of Physics C: solid state physics*, v. 16, n. 12, p. 2321, 1983.
- 19 JONES, B. A.; VARMA, C. M. Study of two magnetic impurities in a Fermi gas. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 58, p. 843–846, Mar 1987.
- 20 JONES, B. A.; VARMA, C. M.; WILKINS, J. W. Low-temperature properties of the two-impurity Kondo hamiltonian. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 61, p. 125–128, Jul 1988.
- 21 JONES, B. A.; VARMA, C. M. Critical point in the solution of the two magnetic impurity problem. *Physical Review B*, v. 40, p. 324–329, Jul 1989.
- 22 OLIVEIRA, L. N.; WILKINS, J. W. New approach to the x-ray-absorption problem. *Physical Review B*, v. 24, n. 8, p. 4863–4866, Oct 1981.
- 23 OLIVEIRA, L. N.; WILKINS, J. W. Fano antiresonances in x-ray-absorption spectroscopy. *Physical Review B*, v. 32, p. 696–707, Jul 1985.
- 24 BULLA, R.; COSTI, T. A.; PRUSCHKE, T. Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. *Review of Modern Physics*, v. 80, n. 2, p. 395–450, Apr 2008.

- 25 WHITE, S. R. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 69, p. 2863–2866, Nov 1992.
- 26 HOFSTETTER, W. Generalized numerical renormalization group for dynamical quantities. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 85, p. 1508–1511, Aug 2000.
- 27 ANDERS, F. B.; SCHILLER, A. Real-time dynamics in quantum-impurity systems: A time-dependent numerical renormalization-group approach. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 95, p. 196801, Oct 2005.
- 28 ANDERS, F. B. Steady-state currents through nanodevices: a scattering-states numerical renormalization-group approach to open quantum systems. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 101, p. 066804, Aug 2008.
- 29 COSTI, T. A. Renormalization-group approach to nonequilibrium green functions in correlated impurity systems. *Physical Review B*, v. 55, p. 3003–3009, Feb 1997.
- 30 BULLA, R. Zero temperature metal-insulator transition in the infinite-dimensional hubbard model. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 83, p. 136–139, Jul 1999.
- 31 MADHAVAN, V.; CHEN, W.; JAMNEALA, T.; CROMMIE, M. F.; WINGREEN, N. S. Tunneling into a single magnetic atom: spectroscopic evidence of the Kondo resonance. *Science*, Washington, v. 280, n. 5363, p. 567–569, 1998.
- 32 LI, J.; SCHNEIDER, W.-D.; BERNDT, R.; DELLEY, B. Kondo scattering observed at a single magnetic impurity. *Physical Review Letters*, Woodbury, v. 80, p. 2893–2896, Mar 1998.
- 33 MANOHARAN, H. C.; LUTZ, C. P.; EIGLER, D. M. Quantum mirages formed by coherent projection of electronic structure. *Nature*, London, v. 403, n. 6769, p. 512–515, Feb. 2000.
- 34 HEWSON, A. *The Kondo problem to heavy fermions*. Cambridge University Press, 1997. (Cambridge studies in magnetism.)
- 35 SCHRIEFFER, J. R.; WOLFF, P. A. Relation between the Anderson and Kondo hamiltonians. *Physical Review*, New York, v. 149, n. 2, p. 491–492, Sep 1966.
- 36 MAHAN, G. *Many-particle physics*. Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2000. (Physics of solids and liquids.)
- 37 LANGRETH, D. C. Friedel sum rule for Anderson’s model of localized impurity states. *Physical Review*, New York, v. 150, n. 2, p. 516–518, Oct 1966.

- 38 HALDANE, F. D. M. Scaling theory of the asymmetric Anderson model. *Physical Review Letters*, New York, v. 40, n. 6, p. 416–419, Feb 1978.
- 39 YOSHIDA, M.; WHITAKER, M. A.; OLIVEIRA, L. N. Renormalization-group calculation of excitation properties for impurity models. *Physical Review B*, v. 41, n. 13, p. 9403–9414, May 1990.
- 40 OLIVEIRA, W. C.; OLIVEIRA, L. N. Generalized numerical renormalization-group method to calculate the thermodynamical properties of impurities in metals. *Physical Review B*, v. 49, n. 17, p. 11986–11994, May 1994.
- 41 COSTA, S. C.; PAULA, C. A.; LIBERO, V. L.; OLIVEIRA, L. N. Numerical renormalization-group computation of specific heats. *Physical Review B*, v. 55, n. 1, p. 30–33, Jan 1997.
- 42 CAMPO, V. L.; OLIVEIRA, L. N. Thermodynamics for the two-impurity kondo model. *Physical Review B*, v. 70, n. 15, p. 153401, Oct 2004.
- 43 COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOË, F. *Quantum mechanics*. New York: John Wiley & Sons, 1991. v. 2
- 44 YOSHIDA, M.; SERIDONIO, A. C.; OLIVEIRA, L. N. Universal zero-bias conductance for the single-electron transistor. *Physical Review B*, v. 80, n. 23, p. 235317, Dec 2009.
- 45 MERZBACHER, E. *Quantum mechanics*. Wiley, 1998.
- 46 SERIDONIO, A. C.; YOSHIDA, M.; OLIVEIRA, L. N. Universal zero-bias conductance through a quantum wire side-coupled to a quantum dot. *Physical Review B*, v. 80, p. 235318, Dec 2009.
- 47 OLIVEIRA, L. N.; WILKINS, J. W. Specific heat of the kondo model. *Physical Review Letters*, New York, v. 47, n. 21, p. 1553–1556, Nov 1981.
- 48 ZUBAREV, D. N. Double-time green functions in statistical physics. *Soviet Physics Uspekhi*, v. 3, n. 3, p. 320, 1960.
- 49 MATHEWS, J.; WALKER, R. *Mathematical methods of physics*. New York: W. A. Benjamin, 1970.

Cálculo dos Elementos Invariantes

Vamos aqui nos dedicar ao cálculo dos elementos de matriz dos autoestados da iteração N . Assim, calcularemos $\langle S|f_{N\sigma}^\dagger|O\rangle, \langle S|f_{N\sigma}^\dagger|L\rangle, \langle E|f_{N\sigma}^\dagger|N\rangle$ e $\langle O|f_{N\sigma}^\dagger|N\rangle$. Os elementos inversos são idênticos e por isso não serão calculados, bem como os elementos de matriz de $f_{N\sigma}$. Será utilizado o teorema de Wigner-Eckart e mostraremos na prática que estes elementos são independentes de S_z . Vamos primeiramente identificar cada um dos autoestados

$$|N\rangle = |Q-1, S, S_z, r\rangle_N = |\alpha'(S, S_z)\rangle \quad (\text{A.1})$$

$$|S\rangle = |Q+1, S, S_z, r\rangle_N = |\alpha(S, S_z)\rangle \quad (\text{A.2})$$

$$\begin{aligned} |L\rangle &= \sqrt{\frac{S+S_z}{2S}} \left| Q, S-\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2}, r \right\rangle_N + \sqrt{\frac{S-S_z}{2S}} \left| Q, S-\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r \right\rangle_N \\ &= \sqrt{\frac{S+S_z}{2S}} \left| \alpha''\left(S-\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2}\right) \right\rangle + \sqrt{\frac{S-S_z}{2S}} \left| \alpha''\left(S-\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}\right) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned} |O\rangle &= -\sqrt{\frac{S-S_z+1}{2S+2}} \left| Q, S+\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2}, r \right\rangle_N + \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+2}} \left| Q, S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r \right\rangle_N \\ &= -\sqrt{\frac{S-S_z+1}{2S+2}} \left| \alpha''\left(S+\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2}\right) \right\rangle + \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+2}} \left| \alpha''\left(S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}\right) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

onde α , α' e α'' substituem respectivamente os índices $(Q+1, r)$, $(Q-1, r)$ e (Q, r) . Os coeficientes dependentes de S e S_z que multiplicam os autoestados são os coeficientes de Clebsch e Gordan que aparecem quando estamos projetando uma base em outra. Não vamos mais escrever o índice N nos subestados pois todos são da mesma iteração N . Agora podemos escrever os elementos de matriz $\langle S|f_{N\sigma}^\dagger|O\rangle$, $\langle S|f_{N\sigma}^\dagger|L\rangle$, $\langle E|f_{N\sigma}^\dagger|N\rangle$, $\langle O|f_{N\sigma}^\dagger|N\rangle$ a seguir:

$$\begin{aligned} \langle S|f_{N\sigma}^\dagger|O\rangle = & -\frac{1}{\sqrt{2S+2}} \left\langle \alpha(S, S_z) \left| f_{N\uparrow}^\dagger \right| \alpha'' \left(S + \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2} \right) \right\rangle + \\ & \sqrt{\frac{2S+1}{2S+2}} \left\langle \alpha(S, S_z) \left| f_{N\downarrow}^\dagger \right| \alpha'' \left(S + \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2} \right) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

$$\begin{aligned} \langle S|f_{N\sigma}^\dagger|L\rangle = & \sqrt{\frac{S+S_z}{2S}} \left\langle \alpha(S, S_z) \left| f_{N\uparrow}^\dagger \right| \alpha'' \left(S - \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2} \right) \right\rangle + \\ & \sqrt{\frac{S-S_z}{2S}} \left\langle \alpha(S, S_z) \left| f_{N\downarrow}^\dagger \right| \alpha'' \left(S - \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2} \right) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

$$\begin{aligned} \langle L|f_{N\sigma}^\dagger|N\rangle = & \sqrt{\frac{S+S_z}{2S}} \left\langle \alpha'' \left(S - \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2} \right) \left| f_{N\downarrow}^\dagger \right| \alpha'(S, S_z) \right\rangle - \\ & \sqrt{\frac{S-S_z}{2S}} \left\langle \alpha'' \left(S - \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2} \right) \left| f_{N\uparrow}^\dagger \right| \alpha'(S, S_z) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

$$\begin{aligned} \langle O|f_{N\sigma}^\dagger|N\rangle = & -\sqrt{\frac{2S+1}{2S+2}} \left\langle \alpha'' \left(S + \frac{1}{2}, S + \frac{1}{2} \right) \left| f_{N\uparrow}^\dagger \right| \alpha'(S, S) \right\rangle + \\ & \frac{1}{\sqrt{2S+2}} \left\langle \alpha'' \left(S + \frac{1}{2}, S - \frac{1}{2} \right) \left| f_{N\downarrow}^\dagger \right| \alpha'(S, S) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Precisamos calcular cada um dos elementos. Para isso, vamos ter que calcular coeficientes de Clebsch e Gordan representados por $(S', S'_z|S, S_z, \frac{1}{2}, \sigma)$, esses serão calculados com auxílio da tabela a seguir:

Tabela A.1 – Tabela para cálculo dos coeficientes de Clebsch e Gordan.

S'	$\sigma = \frac{1}{2}$	$\sigma = -\frac{1}{2}$
$S + \frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{S+S'_z+\frac{1}{2}}{2S+1}}$	$\sqrt{\frac{S-S'_z+\frac{1}{2}}{2S+1}}$
$S - \frac{1}{2}$	$-\sqrt{\frac{S-S'_z+\frac{1}{2}}{2S+1}}$	$\sqrt{\frac{S+S'_z+\frac{1}{2}}{2S+1}}$

Usando esta tabela vamos até o final desse apêndice calcular um a um os elementos de matriz.

Para o Elemento $\langle S|f_{N\sigma}^\dagger|O\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle S|f_{N\sigma}^\dagger|O\rangle &= -\sqrt{\frac{S-S_z+1}{2S+2}} \left\langle \alpha(S, S_z) \left| f_{N\uparrow}^\dagger \right| \alpha''\left(S + \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2}\right) \right\rangle \\ &\quad - \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+2}} \left\langle \alpha(S, S) \left| f_{N\downarrow}^\dagger \right| \alpha''\left(S + \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2}\right) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Usando o teorema de Wigner-Eckart (43) tiramos a dependência com S_z :

$$\begin{aligned} &\left\langle \alpha(S, S_z) \left| f_{N\uparrow}^\dagger \right| \alpha''\left(S + \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2}\right) \right\rangle = \\ &\left(S, S_z \left| S + \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right\rangle \left\langle \alpha(S) \left\| f_N^\dagger \right\| \alpha''\left(S_z + \frac{1}{2}\right) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

e

$$\begin{aligned} &\left\langle \alpha(S, S_z) \left| f_{N\downarrow}^\dagger \right| \alpha''\left(S + \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}\right) \right\rangle = \\ &\left(S, S_z \left| S + \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right\rangle \left\langle \alpha(S) \left\| f_N^\dagger \right\| \alpha''\left(S_z + \frac{1}{2}\right) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Pela tabela A.1, calculamos os elementos $(S, S_z | S + \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) = \sqrt{\frac{S-S_z+1}{2S+2}}$ e $(S, S_z | S + \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}) = \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+2}}$ substituindo em (Eq. (A.11)), (Eq. (A.10)) e em seguida (Eq. (A.9)) temos

$$\langle S | f_{N\sigma}^\dagger | O \rangle = \left(\frac{S - S_z + 1}{2S + 1} + \frac{S + S_z + 1}{2S + 2} \right) \left\langle \alpha(S) \left\| f_N^\dagger \right\| \alpha'' \left(S + \frac{1}{2} \right) \right\rangle \quad (\text{A.12})$$

o que implica:

$$\boxed{\langle S | f_{N\sigma}^\dagger | O \rangle = \left\langle \alpha(S) \left\| f_N^\dagger \right\| \alpha'' \left(S + \frac{1}{2} \right) \right\rangle} \quad (\text{A.13})$$

Para o Elemento $\langle L | f_{N\sigma}^\dagger | N \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle L | f_{N\sigma}^\dagger | N \rangle = & \sqrt{\frac{S + S_z}{2S}} \left\langle \alpha'' \left(S - \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2} \right) \left| f_{N\downarrow}^\dagger \right| \alpha' (S, S_z) \right\rangle - \\ & \sqrt{\frac{S - S_z}{2S}} \left\langle \alpha'' \left(S - \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2} \right) \left| f_{N\uparrow}^\dagger \right| \alpha' (S, S_z) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Escrevendo agora os elementos :

$$\begin{aligned} & \left\langle \alpha'' \left(S - \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2} \right) \left| f_{N\downarrow}^\dagger \right| \alpha' (S, S_z) \right\rangle = \\ & \left(S - \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2} | S, S_z, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right) \left\langle \alpha'' \left(S - \frac{1}{2} \right) \left\| f_N^\dagger \right\| \alpha' (S) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

$$\begin{aligned} & \left\langle \alpha'' \left(S - \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2} \right) \left| f_{N\uparrow}^\dagger \right| \alpha' (S, S_z) \right\rangle = \\ & \left(S - \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2} \left| S, S_z, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) \left\langle \alpha'' \left(S - \frac{1}{2} \right) \parallel f_N^\dagger \parallel \alpha' (S) \right\rangle \right. \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

substituindo os dois na Eq. (A.14) já calculando os coeficientes de Clebsch e Gordan segundo a tabela A.1 resulta :

$$\left\langle L | f_{N\sigma}^\dagger | N \right\rangle = \left[\frac{S + S_z}{\sqrt{2S(2S+1)}} + \frac{S - S_z}{\sqrt{2S(-2S+1)}} \right] \left\langle \alpha'' \left(S - \frac{1}{2} \right) \parallel f_N^\dagger \parallel \alpha' (S) \right\rangle \quad (\text{A.17})$$

e por fim temos :

$$\boxed{\left\langle L | f_{N\sigma}^\dagger | N \right\rangle = \sqrt{\frac{2S}{2S+1}} \left\langle \alpha'' \left(S - \frac{1}{2} \right) \parallel f_N^\dagger \parallel \alpha' (S) \right\rangle} \quad (\text{A.18})$$

Para o Elemento $\left\langle S | f_{N\sigma}^\dagger | L \right\rangle$:

Para o elemento de matriz $\left\langle S | f_{N\sigma}^\dagger | L \right\rangle$, temos

$$\begin{aligned} \left\langle S | f_{N\sigma}^\dagger | L \right\rangle = & \sqrt{\frac{S + S_z}{2S}} \left\langle \alpha (S, S_z) \left| f_{N\uparrow}^\dagger \right| \alpha'' \left(S - \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2} \right) \right\rangle + \\ & \sqrt{\frac{S - S_z}{2S}} \left\langle \alpha (S, S_z) \left| f_{N\downarrow}^\dagger \right| \alpha'' \left(S - \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2} \right) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Escrevendo agora os elementos :

$$\begin{aligned} & \left\langle \alpha(S, S_z) \left| f_{N\uparrow}^\dagger \right| \alpha'' \left(S - \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2} \right) \right\rangle = \\ & \left(S, S_z \left| S - \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right. \right) \left\langle \alpha(S) \left\| f_{N\uparrow}^\dagger \right\| \alpha'' \left(S - \frac{1}{2} \right) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

$$\begin{aligned} & \left\langle \alpha(S, S_z) \left| f_{N\downarrow}^\dagger \right| \alpha'' \left(S - \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2} \right) \right\rangle = \\ & \left(S, S_z \left| S - \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right. \right) \left\langle \alpha(S) \left| f_N^\dagger \right| \alpha'' \left(S - \frac{1}{2} \right) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

substituindo os dois na Eq. (A.19) já calculando os coeficientes de Clebsch e Gordan segundo a tabela A.1 resulta :

$$\left\langle S \left| f_{N\sigma}^\dagger \right| L \right\rangle = \left[\frac{S + S_z}{2S} + \frac{S - S_z}{2S} \right] \left\langle \alpha(S) \left| f_N^\dagger \right| \alpha'' \left(S - \frac{1}{2} \right) \right\rangle \quad (\text{A.22})$$

e por fim temos :

$$\boxed{\left\langle S \left| f_{N\sigma}^\dagger \right| L \right\rangle = \left\langle \alpha(S) \left\| f_N^\dagger \right\| \alpha'' \left(S - \frac{1}{2} \right) \right\rangle} \quad (\text{A.23})$$

Para o Elemento $\langle 0|f_{N\sigma}^\dagger|N\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle 0|f_{N\sigma}^\dagger|N\rangle = & -\sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+2}} \left\langle \alpha'' \left(S+\frac{1}{2}, S+\frac{1}{2} \right) \left| f_{N\uparrow}^\dagger \right| \alpha(S, S) \right\rangle + \\ & \frac{S-S_z+2}{\sqrt{2S+2}} \left\langle \alpha'' \left(S+\frac{1}{2}, S-\frac{1}{2} \right) \left| f_{N\downarrow}^\dagger \right| \alpha(S, S) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

Escrevendo agora os elementos :

$$\begin{aligned} & \left\langle \alpha'' \left(S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2} \right) \left| f_{N\uparrow}^\dagger \right| \alpha(S, S_z) \right\rangle = \\ & \left(S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2} | S, S_z, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) \left\langle \alpha'' \left(S+\frac{1}{2} \right) \| f_N^\dagger \| \alpha(S) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

$$\begin{aligned} & \left\langle \alpha'' \left(S+\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2} \right) \left| f_{N\uparrow}^\dagger \right| \alpha(S, S_z) \right\rangle = \\ & \left(S+\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2} | S, S_z, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right) \left\langle \alpha'' \left(S+\frac{1}{2} \right) \| f_N^\dagger \| \alpha(S) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

substituindo os dois na Eq. (A.19) já calculando os coeficientes de Clebsch e Gordan segundo a tabela A.1 resulta :

$$\begin{aligned} \langle 0|f_{N\sigma}^\dagger|N\rangle = & \left[-\frac{S+S_z+1}{\sqrt{(2S+1)(2S+2)}} - \frac{S-S_z+1}{\sqrt{(2S+1)(2S+2)}} \right] \\ & \left\langle \alpha'' \left(S+\frac{1}{2} \right) \| f_N^\dagger \| \alpha(S) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

O que resulta em :

$$\boxed{\langle 0|f_{N\sigma}^\dagger|N\rangle = -\sqrt{\frac{2S+2}{2S+1}} \left\langle \alpha'' \left(S+\frac{1}{2} \right) \| f_N^\dagger \| \alpha(S) \right\rangle} \quad (\text{A.28})$$

Hamiltonianos Efetivos

Do capítulo 4, vimos que para cada ponto fixo da transformação τ^2 existe um conjunto de parâmetros U , Γ e ε_f com o qual H_N vai para o Hamiltoniano de ponto fixo H_N^* para várias transformações τ^2 . Como geralmente o sistema se aproxima do ponto fixo não o alcançando, podemos escrever um Hamiltoniano efetivo como abaixo*

$$H_N^{eff} = H_N^* + \Lambda^{\frac{(N-1)}{2}} \delta H \quad (\text{B.1})$$

onde δH é pequeno e depende de uns poucos graus de liberdade consistente com H_N^* , podemos ainda escrever esta aproximação como um conjunto de vários $\delta H'$ ($\delta H_1, \delta H_2 \dots$; organizados de forma hierárquica) pequenos o suficiente para que seja possível tratar o problema perturbativamente, escrevemos então:

$$H_N^{eff} = H_N^* + \omega_1 \Lambda^{\frac{(N-1)}{2}} \delta H_1 + \omega_2 \Lambda^{\frac{(N-1)}{2}} \delta H_2 + \dots \quad (\text{B.2})$$

Os coeficientes $\omega_1, \omega_2, \dots$; detêm a única dependência dos parâmetros $\tilde{\Gamma}, \tilde{U}$ e $\tilde{\varepsilon}_f$ em H_N^{eff} , os operadores $\delta H_1, \delta H_2, \dots$; são expressos como combinações dos operadores de criação e destruição para partículas e buracos que diagonalizam H_N^* e devem obedecer as mesmas simetrias de H_N^{eff} (por exemplo, no caso de H_N^{eff} com simetria partícula-buraco, os $\delta H's$ também devem respeitar esta simetria). Assim, se chega a uma forma

*Os detalhes matemáticos desse apêndice podem todos ser encontrados nas referências (10) e (9), aqui mostramos apenas uma breve ideia de como são realizado os cálculos analíticos para os Hamiltonianos Efetivos.

para os Hamiltonianos nas proximidades de cada um dos pontos fixos. Seguindo o que foi explicado, temos para o ponto fixo de maior importância nesta dissertação (*Frozen Impurity* (FI)) o Hamiltoniano efetivo:

$$H_{N,FI}^{eff}(\tilde{W}) = H_{N,FI}^*(\tilde{W}) + \omega_1 \Lambda^{\frac{(N-1)}{2}} \left(f_{0,\sigma}^\dagger A_{1,\sigma} + A_{1,\sigma}^\dagger f_{0,\sigma} \right) + \omega_2 \Lambda^{\frac{(N-1)}{2}} \left(f_{0,\sigma}^\dagger f_{0,\sigma} - 1 \right)^2 \quad (\text{B.3})$$

Aqui escrito nos dois primeiros termos da aproximação em B.2, as expansões que definem $f_{0,\sigma}$ (na Tabela 4.1) e $A_{1,\sigma}$ são dados e por :

$$f_{0,\sigma} = \Lambda^{-\frac{(N-1)}{4}} \sum_j \left[\alpha_{0,j}^+ g_{j,\sigma} + \alpha_{0,\sigma}^- h_{j,\sigma}^\dagger \right] \quad (\text{B.4})$$

$$A_{1,\sigma} = \Lambda^{-3\frac{(N-1)}{4}} \sum_j \left[\alpha_{0,j}^+ \eta_j^+ g_{j,\sigma} + \alpha_{0,\sigma}^- \eta_j^- h_{j,\sigma}^\dagger \right] \quad (\text{B.5})$$

Onde $\alpha_{0,j}^\pm$ são independentes de N e estão presentes na Tabela 4.1 e $\eta_j^\pm$ são as energias do Hamiltoniano de ponto fixo $H_{N,FI}^*(\tilde{W})$. Substituindo essas expressões em Eq. (B.3), assim como o H_N^* presente em termos dos operadores partícula e buraco na Tabela 4.1, pode-se escrever :

$$\begin{aligned} H_{N,FI}^{eff}(\tilde{W}) &= \sum_l \left(\eta_l^+ g_{l,\sigma}^\dagger g_{l,\sigma} + \eta_l^- h_{l,\sigma}^\dagger h_{l,\sigma} \right) \quad (\text{B.6}) \\ &+ \omega_1 \Lambda^{\frac{(N-1)}{2}} \left\{ \sum_{ll'} \left(\alpha_{0,l}^+ \alpha_{0,l'}^+ \eta_{l'}^+ g_{l,\sigma}^\dagger g_{l',\sigma} - \alpha_{0,l}^- \alpha_{0,l'}^- \eta_{l'}^- h_{l,\sigma}^\dagger h_{l',\sigma} - \alpha_{0,l}^+ \alpha_{0,l'}^- \eta_{l'}^- g_{l,\sigma}^\dagger h_{l',\sigma}^\dagger + \alpha_{0,l}^- \alpha_{0,l'}^+ \eta_{l'}^+ h_{l,\sigma} g_{l',\sigma} \right) + H.c. \right\} \\ &+ \omega_2 \Lambda^{\frac{(N-1)}{2}} \left\{ \sum_{ll'} \left(\alpha_{0,l}^+ \alpha_{0,l'}^+ g_{l,\sigma}^\dagger g_{l',\sigma} - \alpha_{0,l}^- \alpha_{0,l'}^- h_{l,\sigma}^\dagger h_{l',\sigma} - \alpha_{0,l}^+ \alpha_{0,l'}^- g_{l,\sigma}^\dagger h_{l',\sigma}^\dagger + \alpha_{0,l}^- \alpha_{0,l'}^+ h_{l,\sigma} g_{l',\sigma} \right) - \Lambda^{\frac{(N-1)}{2}} \right\}^2 \end{aligned}$$

Aplicando algumas restrições, como retirar os termos relacionados com o estado fundamental, desprezar ordens maiores em ω_1 e ω_2 e usar apenas os termos diagonais em ω_1 e ω_2 . É possível calcular analiticamente os autoestados e autovalores da Eq. (B.6), na Tabela abaixo (adaptado de (9)) escrevemos os autoestados e autovalores para os estados com carga variando de $Q = -2$ à $Q = 2$.

Tabela B.1 – Estados e energias de $H_{N,FI}^{eff}(\tilde{W} < 0)$. (Tabela adaptada da (9)).

Carga Q	Spin S	Índice r	Estado	Energia
0	$\frac{1}{2}$	1	g_1	$\eta_1^+ + 2\omega_1\Lambda^{-(N-1)/2} \left(\alpha_{01}^{+2} \eta_1^+ \right)$
		2	g_2	$\eta_2^+ + 2\omega_1\Lambda^{-(N-1)/2} \left(\alpha_{02}^{+2} \eta_2^+ \right)$
		3	$2g_1 + h$	$2\eta_1^- + \eta_1^- + 2\eta_1\Lambda^{-(n-1)/2} \left(2\alpha_{01}^{+2} \eta_1^+ + \alpha_{01}^{-2} \eta_1^- + 2\omega_2 \right) + 2\omega_2\Lambda^{-(n-1)/2} \left(\alpha_{01}^{+4} - \alpha_{01}^{+2} \alpha_{01}^{-2} \right)^a$
-2	$\frac{1}{2}$	1	h_1	$\eta_1^- + 2\omega_1\Lambda^{-(N-1)/2} \left(\alpha_{01}^{-2} \eta_1^- \right)$
+2	$\frac{1}{2}$	1	$2g_1 + g_2$	$2\eta_1^+ + \eta_2^+ + 2\omega_1\Lambda^{-(N-1)/2} \left(2\alpha_{01}^{+2} \eta_1^+ + \alpha_{02}^{+2} \eta_2^+ \right)$
-1	0	1	...	0
		2	$g_1 + h_1$	$\eta_1^+ + \eta_1^- + 2\omega_1\Lambda^{-(N-1)/2} \left(\alpha_{01}^{+2} \eta_1^+ + \alpha_{01}^{-2} \eta_1^- \right) + 2\omega_2\Lambda^{-(N-1)/2} \alpha_{01}^{+2} \alpha_{01}^{-2}$
		1	$g_1 + h_1$	$\eta_1^+ + \eta_1^- + 2\omega_1\Lambda^{-(N-1)/2} \left(\alpha_{01}^{+2} \eta_1^+ + \alpha_{01}^{-2} \eta_1^- \right) - 2\omega_2\Lambda^{-(N-1)/2} \alpha_{01}^{+2} \alpha_{01}^{-2}$
+1	0	1	$2g_1$	$2\eta_1^+ + 2\omega_1\Lambda^{-(N-1)/2} \left(2\alpha_{01}^{+2} \eta_1^+ \right) + 2\omega_2\Lambda^{-(N-1)/2} \alpha_{01}^{+4}$
		2	$g_1 + g_2$	$\eta_1^+ + \eta_2^+ + 2\omega_1\Lambda^{-(N-1)/2} \left(\alpha_{01}^{+2} \eta_1^+ + \alpha_{01}^{-2} \eta_1^+ \right) + 4\omega_2\Lambda^{-(N-1)/2} \alpha_{01}^{+2} \alpha_{02}^{+2}$
		1	$g_1 + g_2$	$\eta_1^+ + \eta_2^+ + 2\omega_1\Lambda^{-(N-1)/2} \left(\alpha_{01}^{+2} \eta_1^+ + \alpha_{01}^{-2} \eta_1^+ \right)$

Onde o índice ^a presente na terceira energia da Tabela indica que desprezamos a possibilidade de degenerescência, ou seja, $\eta_1^+ (\tilde{W} \simeq 0)$.

Determinação Numérica das Constantes Γ_K e δ

Neste apêndice, vamos calcular as constantes Γ_K e δ . O cálculo de δ é mais simples e será feito a partir da Eq. (4.10) e dos níveis de energias calculados pela diagonalização do Hamiltoniano de Anderson do modelo assimétrico. O cálculo de Γ_K é um pouco mais trabalhoso e também deve usar o espectro de energia além de expressões conhecidas para o calor específico da impureza.

C.1 Cálculo de δ

Para o cálculo de δ , partiremos da expressão dos níveis de energia para o caso do Hamiltoniano da Banda Livre com um Potencial Espalhador, Eq. (4.10), o qual no ponto fixo tem resultados equivalentes ao do Modelo de Anderson Assimétrico. Com N ímpar e $j \gg 1$, como vimos na seção 4.2 de Eq. (4.10):

$$\hat{\eta}_j^\pm = \Lambda^{(j-1)\pm\gamma} \quad (\text{C.1})$$

Onde $\gamma = \frac{\delta}{\pi}$. Para calcular o valor de δ procedemos então da seguinte forma.

No Hamiltoniano da Banda Livre com um Potencial Espalhador, ajustamos o valor de $\tilde{W}$ de modo que as energias de $H_N^0(\tilde{W})$ coincidam com os nossos dados para na maior iteração (aqui $N = 30$, com energias muito próximas do ponto fixo de acoplamento forte no Regime de Kondo), então podemos usar a Eq. (C.1) para calcular o valor de δ . Usando $\ln$ para isolar δ em Eq. (C.1) no lado positivo da banda $\hat{\eta}_j^+$:

$$\begin{aligned}\eta_j^* &= \Lambda^{j-1+\frac{\delta}{\pi}} \\ \ln(\eta_j^*) &= \left(j-1+\frac{\delta}{\pi}\right) \ln(\Lambda) \\ \delta &= \pi \left(\frac{\ln(\eta_j^*)}{\ln(\Lambda)} - j + 1\right)\end{aligned}\tag{C.2}$$

Como temos η_j^* de nossos dados, chegamos então ao valor de δ .

C.2 Cálculo de Γ_K

Para calcularmos o valor de Γ_K , iremos utilizar de resultados conhecidos para o regime de Kondo, resultados estes vindo do modelo de nível ressonante (seção 4.3) e o do modelo de potencial espalhador (seção 4.2).

Para o modelo de nível Ressonante, Oliveira e Wilkins (47) obtiveram a contribuição da impureza no calor específico(C_{imp}) em todo o espectro de temperaturas $0 < k_B T < D$; no regime de Kondo, o C_{imp} de Oliveira e Wilkins concorda com o esperado para o modelo de Kondo e é dada como função universal da temperatura escalada pelo valor de T_K mostrada abaixo:

$$C_{imp}(T) = \frac{2\pi^3}{3} T \left(\frac{0.103}{T_K} \right)\tag{C.3}$$

Na expressão acima o número 0.103, é o valor da suscetibilidade magnética χ para

$T = 0$.

Para o modelo da banda livre com um potencial espalhador $\tilde{W}$ Krishna-murthy et al. (9) obtiveram a seguinte expressão para a o calor específico C_{imp} :

$$C_{imp}(T) = \frac{4}{3}\pi^2 \frac{k_B^2 T}{D} \left(\frac{-\omega_1 \phi(\tilde{W})}{2A_\Lambda} \right) \quad (C.4)$$

Onde $A_\Lambda = \left(\frac{1+\Lambda^{-1}}{1-\Lambda^{-1}} \right)^{\frac{1}{2}} \ln \Lambda$. Podemos demonstrar facilmente que $\phi(\tilde{W}) = \cos(\delta)^2$, de modo que como δ é ligeiramente superior a $\frac{\pi}{2}$ (para um potencial espalhador $\tilde{W} \neq 0$), então é esperado que ω_1 (a mesma constante de Eq. (B.2)) assuma um grande valor de modo que a expressão Eq. (C.4) fique conveniente.

Assim como explicado para a expressão da Eq. (C.3). No regime de Kondo o modelo de potencial espalhador deve coincidir com o Modelo de Nível Ressonante, logo concluímos que Eq. (C.3) e Eq. (C.4) devem se equivaler. Igualando Eq. (C.3) e Eq. (C.4) e isolando o valor de T_K chegamos em :

$$T_k = \frac{0.103 A_\Lambda D}{(-\omega_1) \phi(\tilde{W}) k_B^2} \quad (C.5)$$

Também de de Oliveira-Wilkins(47), temos que a expressão para Γ_K é dada por:

$$\Gamma_k = \frac{T_K}{2\pi (0.103)} \quad (C.6)$$

Substituindo Eq. (C.5) em Eq. (C.6) e $\phi(\tilde{W}) = \cos(\delta)^2$, chegamos em

$$\Gamma_k = \frac{A_\Lambda D}{2\pi (-\omega_1) \cos(\delta)^2 k_B^2} \quad (C.7)$$

Nesta expressão, todos os parâmetros exceto ω_1 são conhecidos, note que δ foi calculado na Eq. (C.2).

Para encontrar o valor de ω_1 , devemos então utilizar os níveis de energias obtidos pelo

programa SIAM. Ajustando o valor de $\tilde{W}$ para que muito próximo do ponto fixo de FI as energias do Hamiltoniano com potencial espalhador da seção 4.2 coincida com o valor das energias obtidas pelo programa SIAM. Neste Regime, poderemos usar as expressões analíticas para os níveis de energias calculados em (9) e mostrados na Tabela 6.1. Aqui iremos escolher nesta Tabela o estado de carga $Q = 0$, spin $S = \frac{1}{2}$ e índice $r = 2$, assim a energia do estado o qual chamamos de $\eta(0, \frac{1}{2}, 2)$ é dada por :

$$\eta\left(0, \frac{1}{2}, 2\right) = \eta_1^+ + 2\omega_1 \Lambda^{-(N-1)/2} (\alpha_{02}^+ \eta_2^+) \quad (\text{C.8})$$

Na prática, o que vamos fazer é montar um gráfico para este estado calculado em alguns valores diferentes da iteração N no NRG, graficando para cada valor de N a correspondente energia dada pelo programa SIAM pelo segundo termo da Eq. (C.8), ω_1 será o coeficiente angular da reta formada.

Como exemplo, vamos fazer o gráfico para o Hamiltoniano com um potencial espalhador dado por $\tilde{W} = 0.09184$. Para esse $\tilde{W}$, os níveis de energia se ajustam quase que perfeitamente com as energias calculadas pelo SIAM de parâmetros $U = 0.3D$, $\epsilon_f = -5.10^{-2}D$ e $\Gamma = 6.10^{-3}D$. Vamos usar aqui a energia $\eta(0, \frac{1}{2}, 2)$ com $N = 21, 23, 25, 27, 29$ em Eq. (C.8), o resultado está no gráfico abaixo onde o coeficiente angular da o valor de $\omega_1 = -575915.14094$, é natural que este valor seja grande uma vez que como vimos em Eq. (C.8) o termo $\Lambda^{-(N-1)/2}$ assume um valor muito pequeno.

Figura C.1 – Gráfico para calcular ω_1 . Nesse gráfico, cada ponto representa a energia para um dos valores $N = 21, 23, 25, 27$, e 29 calculados pela diagonalização do modelo com potencial espalhador $\tilde{W} = 0.09184$, como coeficiente angular, foi obtido o valor de $\omega_1 \simeq -575915.14094$.

Com o valor de ω_1 encontrado por este método, basta substituir em Eq. (C.7) para encontrar o valor de Γ_k , para o caso do gráfico Fig. C.1 o valor de Γ_K encontrado é de $\Gamma_K \simeq 3.47756 - 07D$.

Auto-Operadores do Hamiltoniano de Anderson Assimétrico

Neste apêndice, provaremos que dado os elementos de matriz $\langle n|f_0|m\rangle$ e $\langle n|f_1|m\rangle$ (sendo $|n\rangle$ e $|m\rangle$ autoestados do Hamiltoniano H_A), esses elementos podem ser escritos como combinação linear de $\langle n|\phi_0|m\rangle$ e $\langle n|\phi_1|m\rangle$ independentemente de $|n\rangle$ e $|m\rangle^*$, desde que os respectivos autovalores de $|n\rangle$ e $|m\rangle$ dados por E_n e E_m sejam muito menores que a largura da banda de condução D . Essa propriedade será importante na hora de demonstrarmos a nossa expressão universal para a densidade espectral na seção 6.1.

Os auto-operadores f_0 , ϕ_0 e ϕ_1 são definidos em Eq. (2.5), Eq. (4.15) e Eq. (4.16) respectivamente, enquanto f_1 será definido(44) por:

$$f_1 = \sqrt{\frac{3}{N}} \sum_q \frac{\epsilon_q}{D} c_q \quad (\text{D.1})$$

Partindo do fato de que podemos escrever na região dos pontos fixos ML e FI o Hamiltoniano da banda de condução como:

$$H^* = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + K^* f_{0\sigma}^\dagger f_{0\sigma} \quad (\text{D.2})$$

e colocando Eq. (D.2) na forma diagonal, temos

*Esta demonstração encontra-se presente em (44), para maiores detalhes consulte este artigo

$$H^* = \sum_l \varepsilon_l g_l^\dagger g_l \quad (\text{D.3})$$

onde g_l é dada por:

$$g_l = \sum_k \alpha_{lk} c_k \quad (\text{D.4})$$

Com este operador g_l e ε_l em Eq. (D.3). Escrevemos o momento de energia(44) :

$$M_{mn}^{(p)} \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l \left(\frac{\varepsilon_l}{D} \right)^p \langle m | g_l | n \rangle \quad (\text{D.5})$$

onde $p = 0, 1, \dots$; sendo M_{mn}^p universal, é suficiente para nossa demonstração trabalharmos com o Hamiltoniano de Anderson no caso simétrico H_A^S (Eq. (2.4)), calculando o comutador entre g_l e H_A^S .

$$[g_l, H_A^S] = \varepsilon_l g_l + \frac{V}{\sqrt{N}} c_f \quad (\text{D.6})$$

Multiplicando ambos os lados de Eq. (D.6) por $\left(\frac{\varepsilon_l}{D}\right)^{p-1}$ seguindo com a soma sob l encontramos as equações recursivas

$$M_{mn}^{(p)} = -\varepsilon_{mn} M_{mn}^{(p-1)} - \frac{V}{p} \langle m | c_p | n \rangle \quad (p = 1, 3, \dots) \quad (\text{D.7})$$

$$M_{mn}^{(p)} = -\varepsilon_{mn} M_{mn}^{(p-1)} \quad (p = 2, 4, \dots) \quad (\text{D.8})$$

Onde $\varepsilon_{mn} = \frac{(E_m - E_n)}{D}$ e por condição $|\varepsilon_{mn}| \ll 1$, podemos facilmente resolver Eq. (D.7) e Eq. (D.8) resultando em

$$M_{mn}^{(p)} = -\frac{V}{p} \langle m | c_p | n \rangle \left(1 + \sum_{r=1}^{p-2} \frac{(\varepsilon_{mn})^r}{r} \right) + M_{mn}^{(0)} (\varepsilon_{mn})^p \quad (p = 1, 3, \dots) \quad (\text{D.9})$$

$$M_{mn}^{(p)} = -\frac{V}{p} \langle m | c_p | n \rangle \left(\sum_{r=1}^{p-1} \frac{(\varepsilon_{mn})^r}{r} \right) + M_{mn}^{(0)} (\varepsilon_{mn})^p \quad (p = 2, 4, \dots) \quad (\text{D.10})$$

Em vista que ε_{mn} deve ser pequeno, os termos proporcionais a $(\varepsilon_{mn})^p$ com $(p \geq 1)$ no lado direito das duas igualdades acima podem ser desprezadas. Da Eq. (D.9) temos $M_{mn}^{(1)} = -V \langle m | c_p | n \rangle$ e todos os outros momentos são proporcionais a $M_{mn}^{(1)}$. Para Eq. (D.10) o único elemento não nulo é $M_{mn}^{(0)}$, ou seja, temos agora

$$M_{mn}^{(0)} = \frac{\langle m | \phi_1 | n \rangle}{p}, \quad (p = 1, 3, \dots) \quad (\text{D.11})$$

e

$$M_{mn}^{(0)} = 0, \quad (p = 2, 4, \dots) \quad (\text{D.12})$$

Das relações Eq. (D.11) e Eq. (D.12) podemos definir a seguinte base ortonormal para os estados de condução:

$$\phi_l = \sqrt{\frac{2l+1}{N}} \sum_p P_l(\epsilon_p) g_p \quad (l = 0, 1, \dots), \quad (\text{D.13})$$

sendo P_l os polinômios de Legendre. Para dados dois estados $|m\rangle$ e $|n\rangle$ da matriz H_A , o elemento de matriz $\langle m | \phi_l | n \rangle$ é uma combinação linear dos momentos $M_{mn}^{(r)}$ ($r = 1, 3, \dots, l$) para p ímpar, ou ($r = 2, 4, \dots, l$) para p par. O que segue de Eq. (D.11) e Eq. (D.12) é que $\langle m | \phi_l | n \rangle \sim \langle m | \phi_1 | n \rangle$ ($l = 3, 5, \dots$), enquanto que $\langle m | \phi_l | n \rangle = 0$ ($l = 2, 4, \dots$). De forma geral, os elementos de matriz de qualquer operador de condução é uma combinação linear de $\langle m | \phi_0 | n \rangle$ e $\langle m | \phi_1 | n \rangle$ ficando :

$$\langle m | f_i | n \rangle = \sum_{j=0}^1 \alpha_{ij} \langle m | \phi_j | n \rangle \quad (i = 0, 1) \quad (\text{D.14})$$

sendo α_{ij} ($i = 0, 1$) constantes dependentes de parâmetros do modelo.

Função de Green Para o Hamiltoniano de Anderson

Para começar, vamos definir a função de Green termal temporal.

$$G_{ij}(t_1, t_2) = -\left\langle T_t c_i(t_1) c_j^\dagger(t_2) \right\rangle \quad (\text{E.1})$$

Onde $c(t) = \exp(tH')c \exp(-tH')$, com $H' = H - \mu N_0$ (μ é o potencial químico) e $\langle \dots \rangle$ é a média termal definida para um operador A como :

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr} \left(e^{-\beta(H - \mu N_0)} \right)}{\text{Tr} e^{-\beta(H - \mu N_0)}} \quad (\text{E.2})$$

onde $\beta = \frac{1}{k_B T}$ e por último, na Eq. (E.2), temos que T_t é o operador de ordenação temporal que atua como:

$$\begin{aligned} T_t c_i(t_1) c_j^\dagger(t_2) &= c_i(t_1) c_j^\dagger(t_2) \quad \text{se } t_1 > t_2 \\ &= -c_j^\dagger(t_2) c_i(t_1) \quad \text{se } t_2 > t_1 \end{aligned} \quad (\text{E.3})$$

A função de Green Eq. (E.3) pode ser escrita como uma série de Fourier

$$G_{ij}(t_1, t_2) = \frac{1}{\beta} \sum_{\epsilon_n} G_{ij}(i\epsilon_n) e^{-i\epsilon_n(t_1 - t_2)} \quad (\text{E.4})$$

com n inteiro e $\epsilon_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$.

Vamos precisar definir também um novo tipo de função de Green, chamado de função de Green retardada de tempo duplo $G_r(t_1, t_2)$. Para os operadores A e B fermiônicos essa função de Green é dada como :

$$G_r(t_1, t_2) = \langle \langle A(t_1) : B(t_2) \rangle \rangle = -i\theta(t_1 - t_2) \langle [A(t_1), B(t_2)] \rangle \quad (\text{E.5})$$

$A(t)$ e $B(t)$ são operadores na representação de Heisenberg, com A e B sendo operadores de criação e destruição de segunda quantização, de modo que (vamos considerar $\hbar = 1$):

$$A(t) = e^{iH't} A e^{-iH't} \quad (\text{E.6})$$

em Eq. (E.5) temos também a função Heaviside dada por

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & \text{se } t > 0 \\ 0 & \text{se } t < 0 \end{cases} \quad (\text{E.7})$$

A transformada de Fourier de $G_r^{ij}(\epsilon)$, função de Green retardada, é dada por

$$G_r^{ij}(\epsilon^+) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\epsilon t(t_1 - t_2)} \langle \langle A_i(t_1) : B_j(t_2) \rangle \rangle dt_1 - dt_2 \quad (\text{E.8})$$

sendo $\epsilon^+ = \epsilon + i\delta, \delta \rightarrow +0$. A densidade espectral correspondente $\rho_{ij}(\epsilon)$ é definida por Eq. (5.21)

$$\rho_{ij}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \Im G_r^{ij}(\epsilon^+) \quad (\text{E.9})$$

Trabalhando na chamada representação espectral. Podemos calcular a função de correlação dependente do tempo como uma função da densidade espectral Eq. (E.9), dada por*:

*A demonstração da Eq. (E.10) é demasiadamente longa para os nossos propósitos. Todavia, pode-se

$$\langle B_j(t_2) A_i(t_1) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_{ij}(\epsilon) e^{-i\epsilon(t_1-t_2)} d\epsilon}{\exp(\beta\epsilon) + 1} \quad (\text{E.10})$$

Os operadores $A(t)$ e $B(t)$ satisfazem a equação

$$i \frac{dA(t)}{dt} = A(t) H - H A(t) \quad (\text{E.11})$$

sendo assim, podemos escrever

$$\begin{aligned} i \frac{dG_r(t_1 - t_2)}{dt_1} &= i \frac{d\langle\langle A, B \rangle\rangle}{dt_1} \\ &= \frac{d\theta(t_1 - t_2)}{dt_1} \langle[A(t_1), B(t_2)]\rangle + \left\langle \left\langle i \frac{dA(t_1)}{dt_1}; B(t_2) \right\rangle \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{E.12})$$

desde que $\frac{d\theta(-t_1)}{dt_1} = -\frac{d\theta(t_1)}{dt_1}$ e também $\theta(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t) dt$, pode-se então escrever a Eq. (E.12) como

$$\frac{d}{dt_1} \langle\langle(A(t_1) : B(t_2))\rangle\rangle = \langle[A(t_1), B(t_2)]\rangle \delta(t_1 - t_2) + \langle\langle[A(t_1), H(t_1)] : B(t_2)\rangle\rangle \quad (\text{E.13})$$

A equação Eq. (E.13), gera as equações do movimento da função de Green de uma partícula para o Hamiltoniano de Anderson Eq. (2.4), com $A_i = c_i$ e $B_i = c_i^\dagger$ (de modo que o valor esperado $\langle c_i^\dagger c_i \rangle$ possa ser deduzida a partir da integral sobre as densidades de estados com o peso dado pela distribuição de Fermi $f(\epsilon) = \frac{1}{\exp(\beta\epsilon) + 1}$, gerando então as equações a partir de Eq. (E.13) e tomando a transformada de Fourier, temos

$$(\epsilon^+ - \epsilon_f) G_{f\sigma, f\sigma}(\epsilon^+) - U\Omega_{f, f}(\epsilon^+) = 1 + V \sum_k G_{k\sigma, f\sigma}(\epsilon^+) \quad (\text{E.14})$$

$$(\epsilon^+ - \epsilon_k) G_{k\sigma, f\sigma}(\epsilon^+) = V G_{f\sigma, f\sigma}(\epsilon^+) \quad (\text{E.15})$$

$$(\epsilon^+ - \epsilon_k) G_{k\sigma, k'\sigma}(\epsilon^+) = \delta_{kk'} + V G_{f\sigma, k'\sigma}(\epsilon^+) \quad (\text{E.16})$$

encontrar uma boa análise sobre as funções de Green de tempo duplo e suas aplicações, assim como a demonstração da Eq. (E.10) na referência (48)

onde $\Omega_{f\sigma,f\sigma}$ é a transformada de Fourier de $\left\langle\left\langle c_{f,\sigma} n_{f,-\sigma}(t_1) : c_{f\sigma}^\dagger(t_2) \right\rangle\right\rangle$. Para $U = 0$ resolvendo o conjunto de equações em Eq. (E.14) para $G_{f\sigma,f\sigma}^0(\epsilon^+)$,

$$G_{f\sigma,f\sigma}^{(0)}(\epsilon^+) = \frac{1}{\left(\epsilon^+ - \epsilon_f - V^2 \sum_k \frac{1}{(\epsilon^+ - \epsilon_k)}\right)} \quad (\text{E.17})$$

se diferenciarmos $\left\langle\left\langle c_{f\sigma}(t_1) : c_{k',\sigma}^\dagger(t_2) \right\rangle\right\rangle$ com respeito a t_2 e então tomar a transformada de Fourier com respeito a $t_1 - t_2$ encontramos:

$$(\epsilon^+ - \epsilon_{k'}) G_{f\sigma,k'\sigma}(\epsilon^+) = V G_{f\sigma,f\sigma}(\epsilon) \quad (\text{E.18})$$

Resolvendo Eq. (E.16) e Eq. (E.18) para $G_{k\sigma,k'\sigma}(\epsilon^+)$:

$$G_{k\sigma,k'\sigma}(\epsilon^+) = \frac{\delta_{k,k'}}{(\epsilon^+ - \epsilon_k)} + \frac{V}{(\epsilon^+ - \epsilon_k)} G_{f\sigma,f\sigma}(\epsilon^+) \frac{V}{(\epsilon^+ - \epsilon_{k'})} \quad (\text{E.19})$$

O que nos leva à equação Eq. (5.19) para o caso do Hamiltoniano de Anderson Simétrico (não escrevendo o índice de spin σ):

$$G_{kk'}^S(\epsilon) = G_k^{(0)}(\epsilon) \delta_{kk'} + \frac{V^2}{N} G_k^{(0)}(\epsilon) G_f^S(\epsilon) G_{k'}^{(0)}(\epsilon) \quad (\text{E.20})$$

onde

$$G_k^{(0)}(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon - \epsilon_k + i\delta} \quad (\text{E.21})$$

é a função de Green retardada para os elétrons da banda de condução.

Densidade Espectral nos Pontos Fixos

Vamos derivar* as expressões para a densidade espectral nos pontos fixos de LM e FI. Os resultados serão usados para a determinação das constantes α_0 e α_1 que relaciona os operadores f_0 e f_1 com os operadores ϕ_0 e ϕ_1 . Começamos com o Hamiltoniano de Anderson dado por Eq. (2.6):

$$H_A = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k + \varepsilon_f c_f^\dagger c_f + U c_{f\uparrow}^\dagger c_{f\uparrow} c_{f\downarrow}^\dagger c_{f\downarrow} + \frac{V}{N} (f_0^\dagger c_f + c_f^\dagger f_0) \quad (\text{F.1})$$

Nesse Hamiltoniano, calculando o comutador com c_k , temos

$$[H_A, c_k^\dagger] = \varepsilon_k c_k^\dagger + \frac{V}{\sqrt{N}} c_f^\dagger \quad (\text{F.2})$$

De onde obtemos a expressão para o elemento de matriz do operador c_k entre dois estados $|m\rangle$ e $|n\rangle$ definidos na seção 5.4:

$$\langle m | c_k^\dagger | n \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{V}{(E_m - E_n - \varepsilon_k)} \langle m | c_f^\dagger | n \rangle \quad (\text{F.3})$$

Considerando uma região de baixas energias, em analogia ao operador g_l de Eq. (D.4). É definido um operador g_l tal que $|m\rangle = g_l^\dagger |n\rangle$. Sendo assim, g_l fica dado por:

*A demonstração é muito semelhante ao que foi feito em (44) APPENDIX B

$$g_l = \gamma_{l0}c_f + \sum_k \gamma_{lk}c_k \quad (\text{F.4})$$

O que transforma o Hamiltoniano de ponto fixo em um Hamiltoniano quadrático dado por

$$H^* = \sum_l \varepsilon_l g_l^\dagger g_l \quad (\text{F.5})$$

onde ε_l é relacionado com E_m e E_n por $E_m = E_n + \varepsilon_l$ que substituída em Eq. (F.3) resulta em

$$\langle m | c_k^\dagger | n \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{V}{(\varepsilon_l - \epsilon_k)} \langle m | c_f^\dagger | n \rangle \quad (\text{F.6})$$

Sobre o operador g_l , temos que seus coeficientes são normalizados pela relação

$$\gamma_{l0}^2 + \sum_k \gamma_{lk}^2 = 1 \quad (\text{F.7})$$

e além disso a Eq. (F.5) pode ser facilmente invertida, uma vez havendo uma relação de ortonormalidade entre as bases dos autoestados c_k e g_l ,

$$c_k = \sum_l \gamma_{lk} g_l \quad (\text{F.8})$$

$$c_f = \sum_l \gamma_{l0} g_l \quad (\text{F.9})$$

Agora, podemos afim de descobrir o valor do coeficiente γ_{l0} . substituindo a Eq. (F.8) e Eq. (F.9) em Eq. (F.6), resulta

$$\langle m | \sum_l \gamma_{lk} g_l^\dagger | n \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{V}{(\varepsilon_l - \epsilon_k)} \langle m | \sum_l \gamma_{l0} g_l^\dagger | n \rangle \implies \gamma_{lk} = \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{V}{(\varepsilon_l - \epsilon_k)} \gamma_{l0} \quad (\text{F.10})$$

Elevando Eq. (F.10) ao quadrado e somando em k , segue :

$$\sum_k \gamma_{lk}^2 = V^2 \gamma_{l0}^2 \left(\frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{(\varepsilon_l - \epsilon_k)^2} \right) = V^2 \gamma_{l0}^2 N \left(\frac{\pi \rho}{\sin \delta_l} \right)^2 \quad (\text{F.11})$$

Onde nesta última, foi usada a relação $\sum_k \frac{1}{(\varepsilon_l - \varepsilon_k)^2} = N^2 \left(\frac{\pi \rho}{\sin \delta_l} \right)^2$ que vem da diferenciação com relação a ε_l , na transformação de Sommerfeld-Watson (49) do somatório $\frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{(\varepsilon_l - \varepsilon_k)} = -\pi \rho \cot \delta_l$, assumindo um erro relativo da ordem de $O\left(\frac{1}{N}\right)$.

Substituindo Eq. (F.11) na normalização Eq. (F.7):

$$\gamma_{l0}^2 = \frac{1}{\left[1 + V^2 N \left(\frac{\pi \rho}{\sin \delta_l} \right)^2 \right]} \quad (\text{F.12})$$

Assim.

$$|\langle m | c_f^\dagger | n \rangle|^2 = |\langle m | \sum_l \gamma_{l0} g_l^\dagger | n \rangle|^2 = \gamma_{l0}^2 |\langle m | c_f^\dagger | n \rangle|^2 \quad (\text{F.13})$$

O que resulta da Eq. (F.12) em Eq. (F.13), com um erro relativo na ordem $O\left(\frac{1}{N}\right)$ em:

$$|\langle m | c_f^\dagger | n \rangle|^2 = \frac{\sin^2(\delta^*)}{NV^2 \pi^2 \rho^2} \quad (\text{F.14})$$

Resultando em uma expressão para a densidade espectral

$$\rho_f(\epsilon, T) = \frac{1}{NV^2} \sum_{m,n} e^{-\beta E_m} \frac{\sin^2(\delta^*)}{\pi^2 \rho^2} \delta(\varepsilon_l - \epsilon) \quad (\text{F.15})$$

o que é equivalente a expressão consagrada de Langreth (37):

$$\rho_f(\epsilon) = \frac{\sin^2(\delta^*)}{\pi \Gamma} \quad (\text{F.16})$$

Temos portanto a densidade espectral nos pontos fixos no regime de baixas energias. Para o ponto fixo de nível congelado FI $\delta^* = \delta$, e no ponto fixo de momento localizado (LM) $\delta^* = \delta - \frac{\pi}{2}$. Assim, para os pontos fixos e considerando o fator 2 de degenerescência de spin:

$$\rho_f^{LM} = \frac{2}{\pi \Gamma} \cos^2(\delta) \quad \text{e} \quad \rho_f^{FI} = \frac{2}{\pi \Gamma} \sin^2(\delta) \quad (\text{F.17})$$