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

"ESTUDO DO CALOR ESPECÍCO DE UM SISTEMA DE DOIS NÍVEIS ACOPLADO A UM BANHO FERMIÔNICO"

João Vítor B. Ferreira

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

ORIENTADOR: *Prof. Dr. Valter Luís Líbero*

USP / IFQSC / SBI
8-2-001110

SÃO CARLOS

1995

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

IFSC UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
Instituto de Física de São Carlos

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

Fone (0162) 72-6222
Fax (0162) 72-2218

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE JOÃO VITOR BATISTA FERREIRA APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 19 DE SETEMBRO DE 1995.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof.Dr. Valter Luis Líbero

Prof. Dr. José Roberto Drugowich de Felício

Prof.Dr.Gilmar Eugênio Marques

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

Este trabalho foi financiado pela Coordenadoria de Aperfeiçoamento de Ensino Superior (Capes).

Dedico este trabalho à Inteligência Suprema, causa primária de todas as coisas do universo, ao meu pai João, minha mãe Nanuh e as minhas irmãs Joanice e Patrícia.

Agradecimentos,

Escrever os agradecimentos é sempre uma tarefa ingrata ...

Agradeço ao amigo e professor Valter Líbero,

aos colegas Márcio e Salviano,
às colegas de grupo Sandra e Cíntia,
aos demais colegas e professores do Instituto de Física de São Carlos.

Índice

1 Introdução **4**
1.1 Considerações Gerais 4
1.2 Modelo 8
1.3 Resultado Principal 11
1.4 Grupo de Renormalização Numérico 14
1.4.1 A seguir, "cenas" dos próximos capítulos... 16

2 Hamiltoniano de Tunelamento **17**
2.1 Hamiltoniano de Kondo de Tunelamento 17
2.2 Hamiltoniano sem desprezar o termo L 21
2.3 Cálculo da Taxa Efetiva de Tunelamento 25

3 Grupo de Renormalização Numérico (GRN) para duas impurezas. **27**
3.1 Adaptação do Hamiltoniano de duas impurezas ao GRN. 27
3.2 Discretização Logarítmica 35
3.3 Hamiltoniano na forma iterativa. 41
3.4 Características de H_N. 43
3.5 Diagonalização Iterativa 45

4 Resultados **49**
4.1 Calor Específico 49
4.1.1 Procedimento Intercalado 51
4.1.2 Posição do pico do calor específico 54
4.2 C_{imp} em função de Δ, G e S 57
4.3 Combinação dos Parâmetros G e S 60
4.4 Papel dos termos de interação 63
4.4.1 Anomalia em Temperaturas Muito Altas 67
4.4.2 Relação entre Δ^* e Δ para mesmo α. 68

5 Conclusões e sugestões **71**

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

Lista de Figuras

1.1 Representação esquemática do nosso modelo. As impurezas estão adsorvidas no metal nos sítios 1 e 2. A linha tracejada representa o tunelamento do buraco entre as impurezas. 9

1.2 Representação da banda de condução do metal. Consideramos que ela é isotrópica, simétrica em relação ao nível de Fermi e com largura 2D. 10

1.3 Curvas de calor específico para 2 conjuntos de parâmetros arbitrários e curva analítica (F(T)) do calor específico de um sistema de dois níveis com taxa de tunelamento livre igual a Δ. Propositadamente escolhemos o mesmo valor de S nas duas curvas e o mesmo valor de Δ nas duas curvas e em F(T) para enfatizar que $G \neq 0$ renormaliza a taxa de tunelamento ($\Delta \rightarrow \Delta^* \equiv$ taxa de tunelamento efetiva). No capítulo 04 mostramos que S também renormaliza a taxa de tunelamento. Neste trabalho G e Δ estão em unidades de D (meia-largura de banda) e S é uma grandeza adimensional. 12

1.4 Duas curvas de Calor Específico coincidentes com parâmetros distintos. Nos dois casos, G e S se combinam resultando em $\alpha = 0.89$. 13

1.5 Esquema da discretização logarítmica da banda de condução. 15

2.1 Representação esquemática do espalhamento entre o átomo tunelante e um elétron da banda de condução. Linhas cheias representam o elétron da banda de condução, enquanto linha tracejada representa o átomo tunelante. 18

3.1 Banda de condução representada por alguns de seus níveis (centrada no nível de Fermi e com largura 2D). Em a) temos em escala normal. Em b) a escala foi multiplicada por um fator Λ. Observe que a estrutura de níveis perto do nível de Fermi se mantém constante. 36

3.2 Banda de condução discretizada logaritmicamente. ε é medido em relação ao nível de Fermi, em unidades de meia largura da banda (D). 37

3.3 Diagrama esquemático da evolução dos operadores para o caso de apenas "01 IMPUREZA ". Em (a) temos o espaço de fase dos operadores $c_{\vec{k}}$ (distância da impureza em função da energia do elétron da banda). Em (b) temos a representação esquemática do raio de ação dos operadores f_n em torno da impureza. . 44

4.1 Curva de calor específico com parâmetros de discretização $\Lambda = 4$ e $z = 1.0$. Os parâmetros de entrada estão indicados na figura. Além do pico do calor específico temos oscilações menores provocadas pela discretização da banda de condução. 52
4.2 Discretização logarítmica da banda de condução (metade positiva) em três casos distintos. Em a usamos $\Lambda = 4$ e $z = 0.5$. Em b usamos $\Lambda = 4$ e $z = 1.0$. Em c usamos $\Lambda = 2.0$ e $z = 1.0$. Podemos notar que se somarmos a e b obtemos a discretização c. 53
4.3 Duas curvas de calor específico, sendo que na segunda foi feito o processo de intercalamento. As oscilações númericas mencionadas anteriormente desaparecem. 54
4.4 Duas curvas de calor específico com valores diferentes de G: quando $G = 0$ a taxa de tunelamento não é alterada e seu pico encontra-se no valor de energia 0.417Δ. Quando G é diferente de 0, o pico ocorre em outro valor de energia. Dizemos que a taxa de tunelamento é renormalizada para um valor Δ^* tal que a nova posição do pico ocorre em $0.417\Delta^*$. Observe que não há oscilação na curva. 55
4.5 Curvas de calor específico com valores de G e S iguais mas valores de Δ diferentes. Podemos observar que as curvas são idênticas, apenas transladadas uma da outra. 57
4.6 Curvas de calor específico mantendo S e Δ constantes e variando G. Quanto maior G, maior a renormalização da taxa de tunelamento. 58
4.7 Curvas de calor específico mantendo Δ e G constantes e variando S. Quanto maior o valor de S, menor a renormalização. Compare com o efeito de G mostrado na figura anterior. 59
4.8 Duas curvas de calor específico com $\Delta = 0.001D$. Sabemos que quando $G = 0$ não há renormalização. Como as duas curvas coincidem, confirma-se que também quando $S = 1.0$, não importando o valor de G, não há renormalização. 60
4.9 6 curvas de calor específico com parâmetros G, Δ e S diferentes: 3 com $\alpha = 0.27$ e 3 com $\alpha = 0.83$. Quando a temperatura é escalada por Δ^*, os picos ocorrem na mesma posição ($K_BT = 0.4168\Delta^*$). É notável como as curvas que têm o mesmo α coincidem. 62
4.10 Curvas de calor específico para 3 situações diferentes: no primeiro caso usamos o hamiltoniano completo (H_0) para $S = 0.1$, $\Delta = 0.0001$ e $G = 0.2$. No segundo caso novamente usamos H_0 mas agora com $G = 0$. No terceiro caso usamos H_{0L} com $G = 0.2$. O primeiro e o segundo casos são equivalentes. 65
4.11 Curvas de calor específico para 2 situações diferentes: no primeiro caso usamos H_0 com $S = 0.1$, $\Delta = 0.0001D$ e $G = 0.5D$. No segundo caso usamos H_{0N} com $G = 0.5D$. Observamos que as curvas são diferentes. 66
4.12 Curva de calor específico para parâmetros arbritários. A oscilação espúria aparece acima de 0.1D. Isso equivale a temperaturas superiores a 5000k. 67
4.13 Relação de Δ^* e Δ para quatro conjuntos de pontos que possuem valores distintos de α. 69
4.14 Pré-fator Q_o em função do parâmetro α. Para valores de α até 0.6 (o que corresponde a valores pequenos de G) Q_o é próximo de 1. 70

Resumo

Estudamos o calor específico de um sistema formado por duas impurezas adsorvidas, sem spin, em meio fermiônico (banda de condução do metal) e que contém um buraco (elétron) tunelando entre elas. Modelamos esse sistema por dois níveis acoplados e que sofrem interação Coulombiana com a banda de condução.

Através da análise das curvas de calor específico, investigamos a alteração (renormalização) da taxa de tunelamento em função da interação eletrostática entre os elétrons da banda de condução e o buraco tunelante e da separação entre as impurezas. Utilizamos o Hamiltoniano de Kondo de tunelamento para representar esse modelo e usamos o Grupo de Renormalização Numérico para diagonalizá-lo.

Analisamos a influência de cada termo do Hamiltoniano na renormalização da taxa de tunelamento e verificamos que a troca de paridade das funções de onda do buraco tunelante e dos elétrons da banda desempenha papel essencial. Encontramos uma expressão que combina a distância entre as impurezas e a interação Coulombiana em um único parâmetro (α), de tal forma que sistemas diferentes mas que apresentam o mesmo α e a mesma taxa de tunelamento livre têm a mesma curva de calor específico.

Abstract

We calculate the specific heat of the two-spinless impurity coupled to a fermionic bath. The model takes into account the tunneling of a hole between the impurities.

The two-level system representing the impurities is coupled electrostatically with the conduction electrons. Through the specific heat curves, we analyse the renormalization of the tunneling rate as a function of the Coulomb interaction and distance between impurities.

The Numerical Renormalization Group is used to diagonalize the tunneling Hamiltonian proposed by Kondo. We analyse the role of each term of the Hamiltonian in the renormalization of the bare tunneling rate and we stress the importance of the exchange parity between impurity states and conduction states.

Finally, a parameter α is found which combines the distance between impurities and Coulomb interaction in such a way that every curve is specified only by α and the bare tunneling rate.

Capítulo 1

Introdução

Investigamos o *calor específico de um sistema com um elétron tunelante entre duas impurezas em meio metálico.* Utilizando o *Grupo de Renormalização Numérico (GRN)* diagonalizamos um Hamiltoniano proposto por Kondo em 1976. Até onde sabemos, é a primeira vez que uma propriedade termodinâmica é calculada para esse modelo. Também estudamos a alteração na taxa (frequência) de tunelamento devido à blindagem dos elétrons de condução do metal. Nossos resultados mostram que a separação entre as impurezas, e o potencial Coulombiano entre o elétron tunelante e a banda de condução podem ser combinados num único parâmetro. Esse novo parâmetro, juntamente com a taxa de tunelamento, define exatamente a curva de calor específico. Acreditamos que essa combinação também defina univocamente as propriedades dinâmicas do modelo, como a densidade espectral, o que deve ser explicitamente mostrado em trabalho futuro.

1.1 Considerações Gerais

Trabalhos recentes demonstram que partículas tunelando, sofrendo interação com outras partículas (por exemplo, elétrons da banda de condução), desempenham papel importante em vários fenômenos: La Scala, em trabalho experimental sobre diodos de tunelamento ressonante [1], identificou picos de corrente originados da interação elétron-tunelante

com gás bidimensional de elétrons. Zarránd e Zawadovsk, em trabalho téorico publicado em 1994, estudaram centros-tunelantes formados por átomos movendo-se num metal em um potencial com dois mínimos locais [2]. Eles distinguem duas dinâmicas para o centro-tunelante: blindagem dos elétrons de condução e tunelamento assistido por elétron . Outros exemplos são a condutividade em sistemas fractais [3] e as propriedades eletrônicas em sólidos desordenados [4].

A compreensão dos mecanismos que influenciam o tunelamento é essencial para uma visão clara desses fenômenos. O problema é que para representá-los é necessário utilizar *Hamiltonianos de muitos corpos* cujas soluções, muitas vezes, são difíceis de se encontrar. Faz-se então aproximações que simplificam enormemente o modelo, impedindo muitas vezes que se explore todo o espaço de parâmetros do mesmo.

O *GRN* nos possibilita diagonalizar alguns Hamiltonianos de muitos corpos e obter resultados para comparações com cálculos analíticos. Nesta dissertação usamos o GRN para analisar um modelo de partícula tunelante: o sistema de dois níveis acoplados.

O sistema de dois níveis acoplados é um modelo bastante utilizado na Física e na Química para representar sistemas mais complexos. Nos casos mais simples, o sistema em estudo possui apenas um grau de liberdade. Uma situação mais comum é aquela em que o sistema tem infinitos graus de liberdade, mas somente um é relevante.

Em sistemas mais complexos, além do acoplamento entre os dois níveis existem diferentes tipos de interações atuando na partícula tunelante. Os métodos para solucionar esses modelos incluem: cálculos perturbativos [5], incorporar esse acoplamento na forma de um potencial que permita resultados parecidos com o do oscilador harmônico [6], etc.

Um exemplo de um sistema de dois níveis acoplados sofrendo interação é o caso de uma partícula tunelando entre dois sítios num sólido interagindo com os elétrons da banda de

condução. Podemos ter a interação de troca entre o spin da partícula tunelante e os spins dos elétrons de condução ou a *interação Coulombiana* se a partícula for carregada.

Especificamente, o modelo que estudamos neste trabalho foi proposto por Kondo em 1976 para estudar o movimento de um íon entre dois sítios de um metal e o denominamos de *modelo de Kondo de tunelamento* (esse modelo de Kondo não deve ser confundido com o famoso Hamiltoniano de Kondo para impureza magnética em metais). Esse íon pode ter-se originado pela ionização de uma impureza presente no metal, como em experiências de XPS, ou por captura de múons em experiências de μSR, etc. Para temperaturas menores que o tamanho da barreira de potencial entre os mínimos localizados nesses sítios o *hopping,* via ativação térmica, é desprezível e o íon poderá se mover *tunelando* de um mínimo para outro (isso caso a distância entre os mínimos não seja muito grande). Recentemente tem-se conjecturado que o tunelamento via elétrons de condução - o chamado tunelamento assistido por elétrons - possa ser importante em baixas temperaturas.

À medida que o íon tunela, os elétrons de condução do metal estão submetidos a um potencial Coulombiano cujo centro é móvel. Os elétrons de condução "tentam acompanhar" o íon, que pode ser visto como que "vestido" por eles. Isso resulta no aumento da massa efetiva do íon tunelante ou, em outras palavras, que a taxa de tunelamento é renormalizada para valores menores que a taxa livre (aquela sem a interação com a banda).

Como veremos, no *Hamiltoniano de Kondo de tunelamento* os operadores que descrevem o íon tunelante possuem relações de comutação de férmions, embora o spin não desempenhe papel algum nesse modelo. Dessa maneira, o modelo não distingue o tunelamento de um íon ou o de um elétron entre dois sítios (exceto, naturalmente, pelos valores dos acoplamentos presentes no Hamiltoniano). Assim, neste trabalho nos referiremos ao tunelamento de um elétron entre duas impurezas. Por vezes, também usaremos a linguagem de um buraco

tunelante que espalha os elétrons da banda de condução.

A renormalização da taxa de tunelamento deve aparecer notadamente no calor específico do sistema. Isso porque sempre que tivermos um sistema de dois níveis o calor específico terá um pico cuja posição depende da taxa de tunelamento (pico de Schotkky [7]). A interação Coulombiana entre o íon tunelante e os eletrons de condução altera a posição do pico a forma da curva de calor específico, indicando assim que a taxa de tunelamento foi modificada.

Kondo foi o primeiro a calcular a renormalização da taxa de tunelameno. Ele utilizou teoria de perturbação e dispensou um dos termos do seu próprio Hamiltoniano. Utilizando um caminho diferente, consideramos o Hamiltoniano completo e o diagonalizamos por meio do *GRN*. Esse método foi usado inicialmente para resolver hamiltonianos de uma impureza em metais. Seguindo o passo de trabalhos precedentes, adaptamos o procedimento desse método para duas impurezas. Graças ao *GRN*, fomos capazes de analisar o papel de cada termo do Hamiltoniano e estudar a hipótese de Kondo de que o termo desconsiderado não participa da renormalização da taxa de tunelamento. Além disso, observamos que a troca conjunta da paridade das funções de onda do elétron tunelante e dos elétrons de condução é essencial na alteração da taxa de tunelamento. A taxa de tunelamento pode ser determinada pela posição do pico do calor específico ou comparando a energia do estado fundamental em dois casos: i) considerando a interação com a banda e ii) não considerando essa interação [8]. No cap. 4 usamos estes dois métodos.

Na seção 1.2 definimos o modelo utilizado para o cálculo do calor específico e da taxa efetiva de tunelamento. Na seção 1.3 apresentamos, como exemplo, curvas de calor específico para diferentes parâmetros. Na seção 1.4 resumimos os conceitos básicos do Grupo de Renormalização.

1.2 Modelo

Neste trabalho calculamos o calor específico em baixas temperaturas ($\leq 50K$) de um sistema de dois níveis acoplados entre si e com um banho fermiônico. O modelo que estudamos consiste de duas impurezas adsorvidas em sítios diferentes num metal (sítios 1 e 2). As impurezas são idênticas e estão distanciadas de R (o sítio 1 está em $\vec{R}/2$ e o sítio 2 está em $-\vec{R}/2$).

Cada impureza é representada por um orbital eletrônico. Inicialmente as impurezas estão neutras, por conseguinte, os dois orbitais estão ocupados. Consideramos que esses orbitais interagem um com outro, com uma intensidade de acoplamento $\Delta/2$. Esse acoplamento provoca o aparecimento de orbitais eletrônicos comuns as duas impurezas: um de mais baixa energia (orbital ligante) e outro de energia mais alta (orbital anti-ligante). A diferença de energia entre anti-ligante e ligante é justamente Δ.

Suponhamos que uma dessas impurezas perca um elétron. Logo, devido ao acoplamento entre elas, o buraco criado na impureza ionizada pode ficar saltando (tunelando) de um sítio para o outro. Entre o buraco tunelante e a banda de condução do metal existe um potencial local que espalha os elétrons da banda via *interação Coulombiana*. Não consideramos a interação de troca devido a spin.

Se não houvesse a *interação Coulombiana* entre o buraco tunelante e os elétrons da banda de condução do metal, a frequência com que este tunelaria de uma impureza para outra seria Δ/h (denominamos Δ de *taxa de tunelamento livre*). A presença dessa interação irá alterar o valor da taxa de tunelamento, como veremos mais adiante. Na Fig.1.1 temos uma representação do modelo.

Em nosso modelo, a banda de condução do metal é isotrópica e simétrica em relação ao nível de energia de Fermi (ε_F). Ela tem largura $2D$ e definimos que $\varepsilon_F \equiv 0$. Não há troca

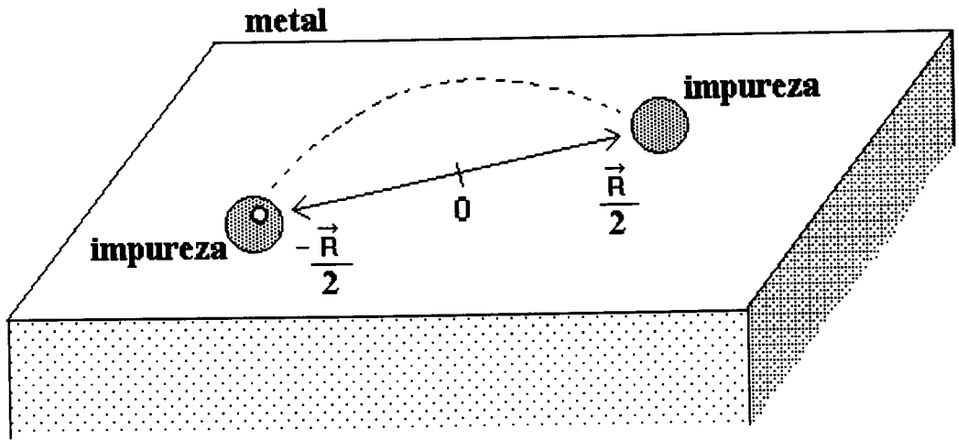

Figura 1.1: Representação esquemática do nosso modelo. As impurezas estão adsorvidas no metal nos sítios 1 e 2. A linha tracejada representa o tunelamento do buraco entre as impurezas.

de elétron entre impureza e banda de condução. Por isso, a carga total das duas impurezas mantêm-se constante e igual a unidade. O número de elétrons da banda de condução também mantêm-se constante. Na Fig.1.2 temos a representação esquemática da banda de condução do metal.

Para representar este modelo utilizamos o *Hamiltoniano de Kondo de tunelamento* [8],

$$H = H_{bc} + H_{tun} + H_{esp} \ , \tag{1.1}$$

onde H_{bc} refere-se à banda de condução, H_{tun} refere-se ao tunelamento eletrônico entre as impurezas e H_{esp} refere-se ao espalhamento dos elétrons da banda de condução pelo buraco em uma das impurezas. Definimos os seguintes operadores fermiônicos: $c_{\vec{k}}$ destrói um elétron com momentum $\vec{k}$ da banda de condução, $d_{1(2)}$ destrói um elétron da impureza 1(2) e $\Psi(\vec{r})$ é um operador de campo que destrói elétrons de condução na posição $\vec{r}$. A banda de condução

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

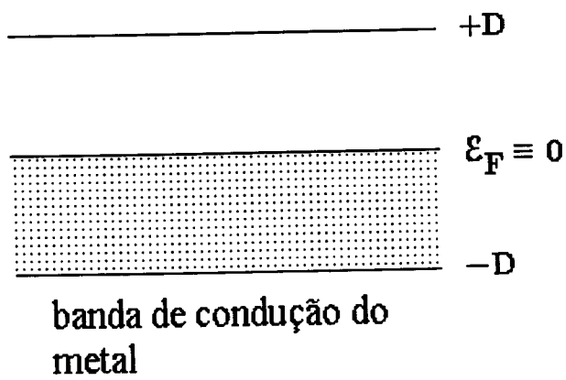

Figura 1.2: Representação da banda de condução do metal. Consideramos que ela é isotrópica, simétrica em relação ao nível de Fermi e com largura 2D.

é constituída por elétrons livres. Com esses operadores podemos escrever H_{bc}, H_{tun} e H_{esp} da seguinte forma,

$$H_{bc} = \int d^3k \varepsilon_{\vec{k}} c^\dagger_{\vec{k}} c_{\vec{k}} \ , \tag{1.2}$$

$$H_{tun} = -\frac{\Delta}{2}(d_1^\dagger d_2 + d_2^\dagger d_1) \ \text{ e} \tag{1.3}$$

$$H_{esp} = G\Psi^\dagger(\frac{\vec{R}}{2})\Psi(\frac{\vec{R}}{2})d_1 d_1^\dagger + G\Psi^\dagger(\frac{-\vec{R}}{2})\Psi(\frac{-\vec{R}}{2})d_2 d_2^\dagger \ , \tag{1.4}$$

onde $\varepsilon_{\vec{k}}$ é a energia do elétron livre de momentum $\vec{k}$. Como estamos considerando a banda isotrópica, $\varepsilon_{\vec{k}}$ depende apenas do módulo de $\vec{k}$. $d_1^\dagger d_2$ representa o tunelamento do buraco do sítio 1 para o sítio 2 ou, de maneira equivalente, o tunelamento do elétron da impureza do sítio 2 para a impureza do sítio 1. Interpretação análoga para $d_2^\dagger d_1$. Se não houvesse a interação do elétron (buraco) com os elétrons da banda de condução, a taxa de tunelamento seria Δ (taxa de tunelamento livre).

O primeiro termo de H_{esp} representa o espalhamento dos elétrons de condução pelo buraco no sítio 1. O termo G é a transformada de Fourier do potencial Coulombiano do buraco blindado pelos elétrons da banda de condução. Como esse potencial é localizado (devido à blindagem dos elétrons de condução), podemos considerar G como sendo constante. Interpretação análoga para o segundo termo.

Utilizamos o *GRN* para diagonalizar numericamente o Hamiltoniano de Kondo de tunelamento. Os autovalores encontrados varrem uma grande faixa de temperatura, cujo valor mínimo não é imposto pelo método. Em nosso modelo estamos interessados na região de baixas temperaturas: $k_B T \ll D$, sendo k_B a constante de Boltzman e T a temperatura.

1.3 Resultado Principal

A curva de calor específico em função da temperatura é determinada por três parâmetros iniciais: G, que indica a intensidade da interação Coulombiana, Δ, que é a taxa de tunelamento livre (sem interação com a banda de condução) e S, que é definido pela expressão $S = (\sin k_F R)/k_F R$. k_F é o módulo do momentum do elétron de condução no nível de Fermi. S indica o afastamento entre as impurezas: quando $S = 1$ as impurezas estão localizadas no mesmo sítio. Na Fig.1.3 temos duas curvas de calor específico com valores do parâmetros G diferentes e valores dos parâmetros S e Δ iguais e uma função (F(T))

$$F(T) = \frac{(\beta\Delta)^2 \exp(-\beta\Delta)}{[1 + \exp(-\beta\Delta)]^2}$$

que representa o calor específico de um sistema de dois níveis desacoplado da banda de condução com taxa da tunelamento Δ.

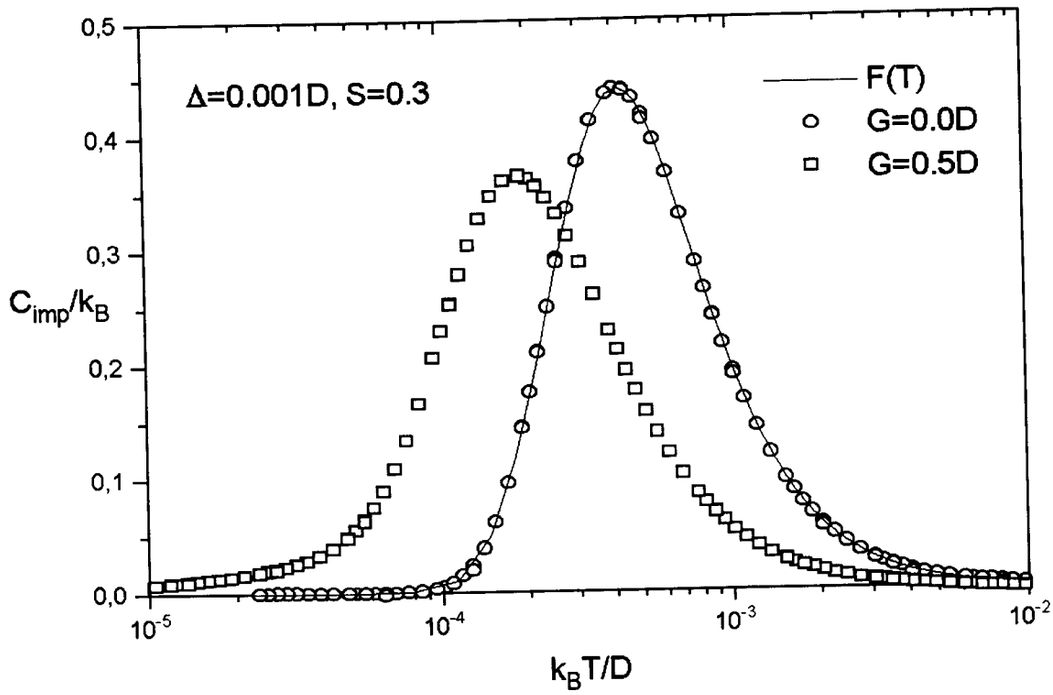

Figura 1.3: Curvas de calor específico para 2 conjuntos de parâmetros arbitrários e curva analítica (F(T)) do calor específico de um sistema de dois níveis com taxa de tunelamento livre igual a Δ. Propositadamente escolhemos o mesmo valor de S nas duas curvas e o mesmo valor de Δ nas duas curvas e em F(T) para enfatizar que $G \neq 0$ renormaliza a taxa de tunelamento ($\Delta \rightarrow \Delta^* \equiv$ taxa de tunelamento efetiva). No capítulo 04 mostramos que S também renormaliza a taxa de tunelamento. Neste trabalho G e Δ estão em unidades de D (meia-largura de banda) e S é uma grandeza adimensional.

Quando $G = 0$ o sistema está desacoplado da banda de condução e a curva de calor específico coincide com F(T). Quando $G \neq 0$ a curva se desloca para temperaturas mais baixas e muda sua forma (se alarga e seu valor de pico diminui). Isto significa que a taxa de tunelamento foi alterada (*taxa efetiva de tunelamento*). Kondo, usando um procedimento perturbativo [8], foi o primeiro a determinar essa taxa efetiva de tunelamento. Trabalhos mais recentes aprimoram a relação encontrada por Kondo [5, 9, 10]. Não obtivemos analiticamente estas expressões,

mas a análise de curvas de calor específico nos induziu a buscar uma relação que conectasse os parâmetros G e S. Encontramos essa relação em um trabalho não sobre calor específico, mas no cálculo exato de Yamada da taxa efetiva de tunelamento [5]. Denominamos esse novo parâmetro de α. Dessa forma, em vez de três são necessários apenas dois parâmetros para determinar uma curva de calor específico: $0 \leq \alpha \leq 1$ e Δ. A Fig.1.4 ilustra este fato.

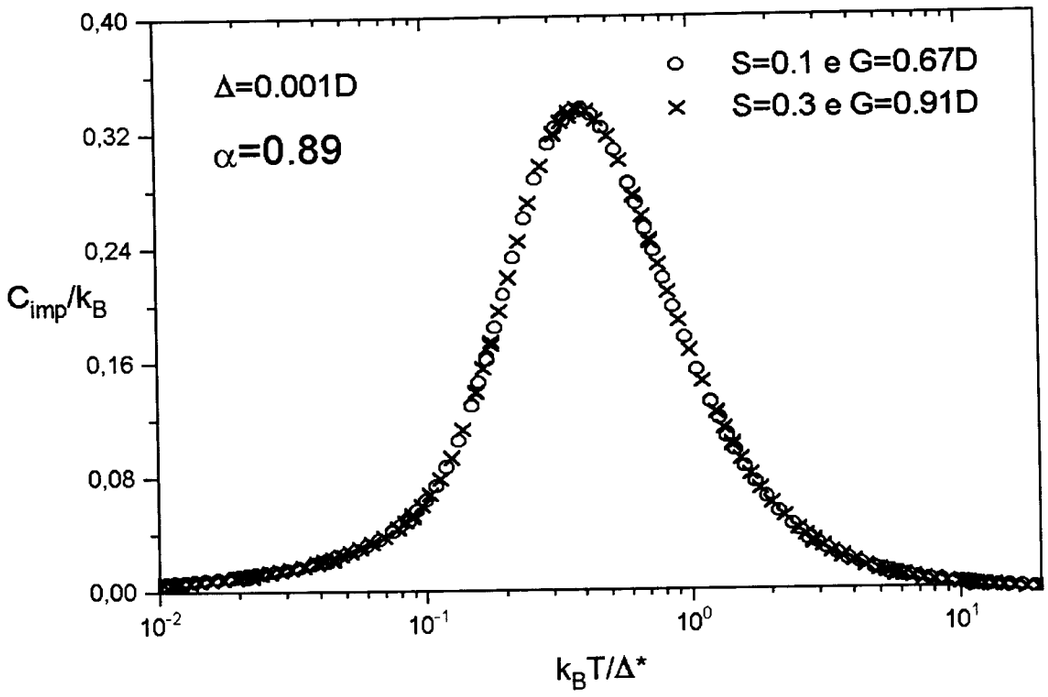

Figura 1.4: Duas curvas de Calor Específico coincidentes com parâmetros distintos. Nos dois casos, G e S se combinam resultando em $\alpha = 0.89$.

Pelo fato de trabalharmos com um Hamiltoniano de muitos corpos, a sua diagonalização não é trivial. Para calcularmos os autovalores do Hamiltoniano e podermos encontrar o calor específico, utilizamos o *GRN*. Na próxima seção nós fazemos algumas considerações sobre esse método.

1.4 Grupo de Renormalização Numérico

O *GRN* é um método numérico que foi desenvolvido para resolver Hamiltonianos de muitos corpos em Física do Estado Sólido. Esse método é originário das teorias de Grupo de Renormalização em estado sólido. A formulação teórica do *GRN* foi apresentada à comunidade científica em 1975 por *Kenneth G. Wilson*, em um artigo no qual ele analisava um problema intrigante nesta área: o fenômeno Kondo [11]. As teorias de Grupo de Renormalização englobam conceitos que já existiam desde a década de 1940, na busca de soluções para problemas em Teoria de Campo, área na qual Wilson teve sua formação acadêmica [12, 13]. Além dele, outros pesquisadores contribuíram na aplicação dos princípios que constituem as teorias de Grupo de Renormalização em Física do Estado Sólido (por exemplo, Leo Kadanoff [14]). Para uma boa revisão histórica do surgimento e desenvolvimento do *GRN*, recomendamos a referência [15].

O *GRN* é um método para resolver Hamiltonianos de sistemas com várias escalas de energia (turbulência, fenômenos críticos, ligas magnéticas diluídas, ligações em grandes moléculas, etc). Em uma abordagem genérica, o procedimento do GRN consiste em *solucionar o Hamiltoniano de maneira recursiva*, considerando parte dos graus de liberdade de cada vez, graças a um reescalonamento de parâmetros do Hamiltoniano. Em cada passo (iteração), *com os autovalores e autovetores do Hamiltoniano atual se constrói os autovetores do Hamiltoniano seguinte.*

Mas este não é o procedimento da Teoria de Perturbação Independente do Tempo (TPIT)? Qual a vantagem do *GRN*? A grande diferença está no fato que a TPIT só pode ser aplicada a modelos em que a perturbação é suficientemente pequena em relação ao resto do sistema, enquanto o *GRN* é capaz de solucionar modelos com várias interações, com diferentes ordens de magnitude.

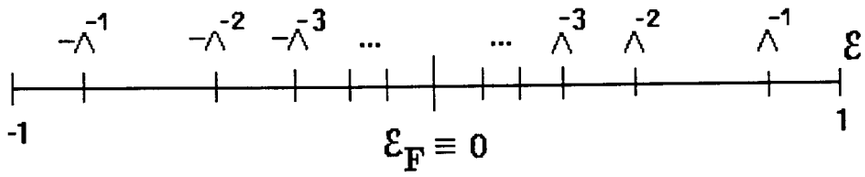

Figura 1.5: Esquema da discretização logarítmica da banda de condução.

No *GRN* logo no início se identifica as interações que são relevantes no sistema, constrói-se uma base conveniente e diagonaliza-se este Hamiltoniano inicial. A partir desses autovalores e autovetores e considerando nova interação, constrói-se novo Hamiltoniano (que, por causa disso, tem uma base maior que o Hamiltoniano anterior). Este novo Hamiltoniano, por sua vez, é diagonalizado gerando novos autovalores e autovetores. E assim por diante.

A tarefa de representar as interações relevantes e expressá-las de maneira conveniente para construir os Hamiltonianos futuros não é trivial e constitui a parte mais difícil da aplicação do *GRN*. Mas em compensação, vencida essa etapa, o método permite tratar essas interações relevantes com o grau de precisão que se queira, devido *a discretização logarítmica do espectro de energia.* Em nosso sistema o espectro de energia corresponde à banda de condução do metal e as interações de interesse nesse trabalho são da ordem de Δ (que corresponde a temperaturas menores que $10K$).

Logo, os valores de energia importantes estão próximos ao nível de energia de Fermi. A discretização logarítmica divide a banda de condução em intervalos desiguais. A discretização é construída de forma que, próximo ao nível de Fermi, se tenha uma maior densidade de intervalos. Assim o processo recursivo do *GRN* "enfatiza" mais essa região de energia do que outras, poupando assim tempo e esforço computacional. Na Fig.1.5 temos uma representação esquemática da banda de condução discretizada logaritmicamente.

A banda de condução apresenta uma propriedade importante: a invariância de escala. Como iremos ver, a discretização logarítmica preserva essa invariância somente próximo a ε_F. Assim, não esperamos que o *GRN* forneça bons resultados para energias no topo da banda. Devemos, então, nos restringir a excitações menores que D (metade da largura da banda de condução), tal que os resultados sejam independentes da forma da banda de condução. No capítulo 3 detalhamos o processo de discretização logarítmica da banda de condução do metal e a sua propriedade de invariância de escala. O processo de discretização logarítmica do *GRN* foi melhorado, permitindo um ganho ainda maior de tempo computacional [16, 17, 18]. Neste trabalho utilizamos esse nova maneira de discretizar logaritmicamente a banda de condução do metal (vide Fig.3.2). Para uma visão simplificada do *GRN*, sugerimos a referência [19].

1.4.1 A seguir, "cenas" dos próximos capítulos...

No capítulo 2 reapresentaremos o Hamiltoniano de tunelamento de Kondo, detalharemos a aproximação que Kondo fez, mostraremos a forma do Hamiltoniano com que trabalhamos e apresentaremos as expressões que utilizamos para calcular a taxa efetiva de tunelamento. No capítulo 3 mostraremos a adaptação do Hamiltoniano ao *GRN*, de forma a poder tratá-lo numericamente. No capítulo 4 mostraremos curvas de calor específico em função dos parâmetros G, Δ e S, e a combinação de G e S em um único parâmetro α. Apresentaremos também o estudo da renormalização da taxa de tunelamento e o papel de cada termo de interação no Hamiltoniano. No capítulo 5 apresentaremos as nossas conclusões.

Capítulo 2

Hamiltoniano de Tunelamento

Neste capítulo nós reescrevemos o Halmitoniano de Kondo de Tunelamento na forma que o utilizaremos no capítulo 3. Fazemos também uma análise preliminar dos termos do Halmitoniano, da aproximação feita por Kondo e apresentamos as expressões relacionadas com o cálculo da taxa efetiva de tunelamento.

2.1 Hamiltoniano de Kondo de Tunelamento

Em um artigo publicado em 1976 ([8]), Kondo propôs um Halmitoniano para representar um sistema de dois níveis interagindo com um banho fermiônico (gás de elétrons degenerado). Ele enfatiza que, até aquela época, vários estudos haviam sido feitos sobre esse modelo, mas abordavam o acoplamento entre o spin da partícula tunelante e os spins dos elétrons da banda de condução do metal (interação de troca). Kondo abordou a interação Coulombiana entre a partícula e os elétrons.

O modelo analisado por Kondo é um átomo que pode "saltar" entre dois sítios equivalentes em um metal e que interage com os elétrons da banda de condução. *Esse modelo é completamente equivalente ao nosso problema de duas impurezas adsorvidas num metal, sendo que o mesmo Halmitoniano descreve os dois casos, bastando reinterpretar os seus termos.*

Kondo salientou que quando o átomo salta do sítio 1 para o sítio 2, as funções de onda

dos elétrons de condução acompanham o deslocamento do átomo: o átomo é "vestido" pelos elétrons de condução de tal forma que a taxa de tunelamento é alterada, levando a uma taxa efetiva. A razão entre essa taxa e a taxa de tunelamento livre do átomo está relacionada com a integral de *overlap* dos estados finais e iniciais do átomo e dos elétrons, representados pelos respectivos determinantes de Slater. Através de cálculo perturbativo ele determinou a razão entre as duas taxas. Com o objetivo de melhor compreender os termos do Halmitoniano de Kondo de tunelamento vamos, a seguir, mostrar o procedimento que ele utilizou para desenvolvê-lo.

A função de onda do átomo localizado na posição $\vec{r}_a$ e no estado quântico α é denominada por $\varphi_\alpha(\vec{r}_\alpha)$. Os elétrons da banda de condução do metal são representados por funções de onda de elétrons-livres, isto é, ondas planas $\exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})$, onde $\vec{k}$ é o momentum do elétron. Os dois sítios (1 e 2) no metal estão distanciados de R e são equivalentes. A interação entre o átomo e os elétrons é local e puramente Coulombiana (só depende da distância entre eles): $V(\vec{r}-\vec{r}_a)$. Na Fig.2.1 temos uma representação esquemática da interação.

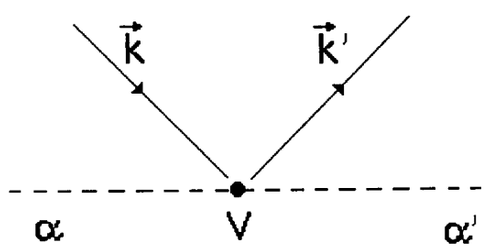

Figura 2.1: Representação esquemática do espalhamento entre o átomo tunelante e um elétron da banda de condução. Linhas cheias representam o elétron da banda de condução, enquanto linha tracejada representa o átomo tunelante.

O Halmitoniano de Kondo de tunelamento é, então, escrito da seguinte forma

$$H = H_s + H_I \ . \tag{2.1}$$

H_s inclui a banda de condução mais o tunelamento do átomo entre os sítios 1 e 2 *sem* a interação com os elétrons da banda de condução:

$$H_s = \sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}}\, c^\dagger_{\vec{k}}\, c_{\vec{k}} \; - \frac{\Delta}{2}(d_1^\dagger d_2 + d_2^\dagger d_1)\;, \tag{2.2}$$

onde Δ é a diferença de energia entre os orbitais anti-ligante e ligante (taxa de tunelamento livre), $d_{1(2)}$ é o operador de destruição do átomo no sítio 1(2), $c_{\vec{k}}$ é o operador de destruição do elétron da banda de condução com momentum $\vec{k}$ e com energia $\varepsilon_{\vec{k}}$. Sem o acoplamento, H reduz-se ao problema trivial de tunelamento entre dois níveis de mesma energia, com a formação de um orbital de menor energia (ligante) e um orbital com maior energia (anti-ligante). Aproveitando-se disso, Kondo usou os estados ligante ($\varphi_+(\vec{r}_a)$) e anti-ligante ($\varphi_-(\vec{r}_a)$) do átomo tunelante para construir a base do Halmitoniano H.

H_I é o termo de interação Coulombiana entre o átomo tunelante e os elétrons da banda de condução. Pode-se escrever esse termo da seguinte forma:

$$H_I = \sum_{\alpha\alpha'\vec{k}\vec{k}'} \left\langle \alpha'\vec{k}' \middle| V(\vec{r}-\vec{r}_a) \middle| \alpha\,\vec{k} \right\rangle \; d^\dagger_{\alpha'}\, d_\alpha\, c^\dagger_{\vec{k}}\, c_{\vec{k}}\,, \tag{2.3}$$

onde d_α é o operador que destrói o átomo no estado α ($\alpha = +,-$). Desenvolvendo um dos elementos da matriz Hamiltoniana como exemplo, tem-se

$$\begin{aligned} & \left\langle \varphi^*_-(\vec{r}_a)\,;\vec{k}' \middle| V(\vec{r}-\vec{r}_a) \middle| \varphi_+(\vec{r}_a);\, \vec{k} \right\rangle = \\ = & \int e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}} \varphi^*_-(\vec{r}_a) V(\vec{r}-\vec{r}_a) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \varphi_+(\vec{r}_a)\, d^3r\, d^3r_a = \\ = & \; V(\vec{k}'-\vec{k}) J_{-+}(\vec{k}'-\vec{k})\;. \end{aligned} \tag{2.4}$$

onde $V(\vec{k}'-\vec{k})$ é a transformada de Fourier do potencial Coulombiano e

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

$$J_{-+}(\vec{k}' - \vec{k}) = \int e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_a} \varphi_-^*(\vec{r}_a)\varphi_+(\vec{r}_a)\, d^3r_a \,. \tag{2.5}$$

Da mesma maneira encontra-se expressões análogas para J_{++}, J_{--} e J_{+-}.

Dessa forma, H_I fica

$$\begin{aligned} H_I &= \sum_{\vec{k}\vec{k}'} \Big[J_{++}(\vec{k}' - \vec{k})\, d_+\, d_+ + J_{--}(\vec{k}' - \vec{k})\, d_-\, d_- + J_{+-}(\vec{k}' - \vec{k})\, d_+^\dagger\, d_- + \\ &\quad + J_{-+}(\vec{k}' - \vec{k})\, d_-\, d_+ \Big]\, V(\vec{k}' - \vec{k})\, c_{\vec{k}}^\dagger\, c_{\vec{k}} \,, \end{aligned} \tag{2.6}$$

sendo que d_+ destrói o átomo no estado ligante e d_- destrói o átomo no estado antiligante. Como o átomo tem apenas dois estados ($\varphi_+(\vec{r}_a)$ e $\varphi_-(\vec{r}_a)$), Kondo definiu um spin fictício tomando $\varphi_+(\vec{r}_a)$ e $\varphi_-(\vec{r}_a)$ como base. As matrizes de Pauli podem ser expressas da seguinte maneira,

$$\sigma_x = d_+^\dagger\, d_- + d_-^\dagger\, d_+ \quad \sigma_z = d_+^\dagger\, d_+ - d_-^\dagger\, d_- \,. \tag{2.7}$$

Esses operadores possuem relação de comutação de férmions para garantir que $\sigma_x^2 = \sigma_z^2 = 1$. Usando esses resultados H_I pode ser escrito como,

$$H_I = \sum_{\vec{k}\vec{k}'} \left(L_{\vec{k}'\vec{k}} + M_{\vec{k}'\vec{k}}\sigma_z + N_{\vec{k}'\vec{k}}\sigma_x \right)\, c_{\vec{k}}^\dagger\, c_{\vec{k}} \,, \tag{2.8}$$

onde

$$L_{\vec{k}'\vec{k}} = V(\vec{k}' - \vec{k}) \frac{J_{++}(\vec{k}' - \vec{k}) + J_{--}(\vec{k}' - \vec{k})}{2} \,, \tag{2.9}$$

$$M_{\vec{k}'\vec{k}} = V(\vec{k}' - \vec{k}) \frac{J_{++}(\vec{k}' - \vec{k}) - J_{--}(\vec{k}' - \vec{k})}{2} \quad e \tag{2.10}$$

$$N_{\vec{k}'\vec{k}} = V(\vec{k}' - \vec{k})\, J_{-+}(\vec{k}' - \vec{k}) \,. \tag{2.11}$$

Para analisar os termos $L_{\vec{k}'\,\vec{k}}$, $M_{\vec{k}'\,\vec{k}}$ e $N_{\vec{k}'\,\vec{k}}$, Kondo representou J_{++}, etc, em termos de funções de Wannier $\phi(\vec{r}_a)$. Para isso, ele escreveu $\varphi_+(\vec{r}_a)$ e $\varphi_-(\vec{r}_a)$ em termos dessas novas funções:

$$\varphi_+(\vec{r}_a) = \frac{\phi_1(\vec{r}_a) + \phi_2(\vec{r}_a)}{\sqrt{2}} \quad \text{e} \quad \varphi_-(\vec{r}_a) = \frac{\phi_1(\vec{r}_a) - \phi_2(\vec{r}_a)}{\sqrt{2}}\,, \tag{2.12}$$

sendo que ϕ_1 e ϕ_2 representam estados equivalentes centrados em $\vec{R}/2$ e $-\vec{R}/2$ respectivamente. Portanto as Eqs. 2.9, 2.10 e 2.11 ficam

$$L_{\vec{k}'\,\vec{k}} = \frac{V(\vec{k}' - \vec{k})}{2} \int e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_a} \left[\phi_1^2(\vec{r}_a) + \phi_2^2(\vec{r}_a)\right] d^3R\,, \tag{2.13}$$

$$M_{\vec{k}'\,\vec{k}} = V(\vec{k}' - \vec{k}) \int e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_a}\, \phi_1(\vec{r}_a)\, \phi_2(\vec{r}_a)\, d^3R \qquad \text{e} \tag{2.14}$$

$$N_{\vec{k}'\,\vec{k}} = \frac{V(\vec{k}' - \vec{k})}{2} \int e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_a} \left[\phi_1^2(\vec{r}_a) - \phi_2^2(\vec{r}_a)\right] d^3R\,. \tag{2.15}$$

Depois de ter determinado os termos do Halmitoniano (Eq. 2.8), Kondo desconsiderou os termos $L_{\vec{k}'\,\vec{k}}$ e $M_{\vec{k}'\,\vec{k}}$ para o cálculo da razão entre a taxa de tunelamento livre e a taxa efetiva. É compreensível que o termo $M_{\vec{k}'\,\vec{k}}$ seja desprezado: ele é o produto de duas funções de Wannier localizadas em sítios distintos ($\phi_1(\vec{r}_a)\,\phi_2(\vec{r}_a)$), portanto é muito pequeno. Ele não justificou a exclusão do termo $L_{\vec{k}'\,\vec{k}}$.

Usando o *GRN* conseguimos diagonalizar o Halmitoniano de tunelamento sem necessidade de excluir o termo $L_{\vec{k}'\,\vec{k}}$. Na próxima seção vamos reescrever o Halmitoniano na forma que utilizamos neste trabalho.

2.2 Hamiltoniano sem desprezar o termo L

Vamos considerar as funções $\phi_1(\vec{r}_a)$ e $\phi_2(\vec{r}_a)$ bem localizadas em seus respectivos centros, ou seja,

$$\phi_1(\vec{r}_a) = \delta(\vec{r}_a - \frac{\vec{R}}{2}) \;\; \text{e} \;\; \phi_2(\vec{r}_a) = \delta(\vec{r}_a + \frac{\vec{R}}{2}) \, . \tag{2.16}$$

Assim, podemos simplificar a Eq. 2.9 para

$$L_{\vec{k}'\,\vec{k}} = \frac{V(\vec{k}' - \vec{k})}{2} \left(e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{R}/2} + e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{R}/2} \right) , \tag{2.17}$$

que poderíamos ter escrito usando a função cosseno mas não o fizemos por conveniência. Da mesma forma,

$$N_{\vec{k}'\,\vec{k}} = \frac{V(\vec{k}' - \vec{k})}{2} \left(e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{R}/2} - e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{R}/2} \right) . \tag{2.18}$$

Como o termo $M_{\vec{k}'\,\vec{k}}$ contêm o produto $\phi_1(\vec{R})\,\phi_2(\vec{R})$, ele se torna nulo (conforme Eq. 2.16).

Correspondentes às funções de Wannier $\phi_1(\vec{R})$ e $\phi_2(\vec{R})$ nós temos os operadores d_1 e d_2, que destroem o átomo nos sítios $\vec{R}/2$ e $-\vec{R}/2$, respectivamente, de tal forma que os operadores d_+ e d_- ficam

$$d_+ = \frac{d_1 + d_2}{\sqrt{2}} \quad \text{e} \quad d_- = \frac{d_1 - d_2}{\sqrt{2}} \, , \tag{2.19}$$

e as matrizes de Pauli,

$$\sigma_x = d_1^\dagger d_1 - d_2^\dagger d_2 \quad \text{e} \quad \sigma_z = d_1^\dagger d_2 + d_2^\dagger d_1 \tag{2.20}$$

(lembrar que σ_x e σ_z foram definidos na base $\varphi_+(\vec{r}_a)$ e $\varphi_-(\vec{r}_a)$).

Usando d_1 e d_2, H_I pode ser colocado na forma

$$H_I \;=\; \sum_{\vec{k}\,\vec{k}'} \frac{V(\vec{k}' - \vec{k})}{2} \left\{ \left(e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{R}/2} + e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{R}/2} \right) \left(d_1 d_1^\dagger + d_2 d_2^\dagger \right) + \right.$$

$$+ \left(e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{R}/2} - e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{R}/2}\right)\left(d_1 d_1^\dagger - d_2 d_2^\dagger\right)\Big\} \, c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}} \ , \tag{2.21}$$

onde, deliberadamente, multiplicamos o termo $L_{\vec{k}'\vec{k}}$ por $d_1 d_1^\dagger + d_2 d_2^\dagger$. Essa multiplicação não altera o Halmitoniano porque o subespaço de interesse é aquele em que o átomo está tunelando entre os sítios 1 e 2, de forma que $d_1 d_1^\dagger + d_2 d_2^\dagger$ é igual a unidade. Também usamos a relação de anticomutação dos operadores fermiônicos d_1 e d_2 e a simetria de inversão, $d_1 \leftrightarrow d_2$ com $\vec{R} \leftrightarrow -\vec{R}$ para trocar a ordem do operador $d_1^\dagger d_1 - d_2^\dagger d_2$ para $d_1 d_1^\dagger - d_2 d_2^\dagger$. Assim H_I pode ser escrito como

$$H_I = \sum_{\vec{k}\vec{k}'} V(\vec{k}' - \vec{k}) \left(e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{R}/2} d_1 d_1^\dagger + e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{R}/2} d_2 d_2^\dagger\right) c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}} \, . \tag{2.22}$$

A blindagem eletrostática dos elétrons da banda de condução, em torno do átomo tunelante,

resulta em um potencial Coulombiano efetivo de curto alcance e, por isso, podemos considerar sua transformada de Fourier constante,

$$V(\vec{k}' - \vec{k}) = G \quad \rightarrow \quad \text{constante} \ . \tag{2.23}$$

Definindo o operador de campo

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} c_{\vec{k}} \ , \tag{2.24}$$

que destrói elétrons da banda de condução no sítio $\vec{r}$, temos para o Halmitoniano total a expressão

$$\begin{aligned} H \ &= \ \int d\vec{k}\, \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}} \ - \frac{\Delta}{2}(d_1^\dagger d_2 + d_2^\dagger d_1) + \\ &+ G\, \Psi^\dagger(\frac{\vec{R}}{2})\Psi(\frac{\vec{R}}{2}) d_1 d_1^\dagger + G\, \Psi^\dagger(\frac{-\vec{R}}{2})\Psi(\frac{-\vec{R}}{2}) d_2 d_2^\dagger \, . \end{aligned} \tag{2.25}$$

Este é o Halmitoniano que consideramos neste trabalho.

Como os operadores d_2 e d_1 obedecem relações de comutação de férmions, podemos interpretar o Halmitoniano acima como o de um elétron tunelando entre duas impurezas localizadas respectivamente no sítio 1, em $\vec{R}/2$, e no sítio 2, em $-\vec{R}/2$. Ao tunelar, o buraco deixado para trás espalha os elétrons da banda de condução (daí o nosso interesse em escrever os operadores da impureza na ordem $d_i d_i^\dagger$). Como o tunelamento é dinâmico, isso causa um potencial dinâmico para os elétrons de condução que tentam acompanhar o buraco. A escala de tempo associada ao tunelamento é

$$\tau_\Delta = \frac{\hbar}{|\Upsilon_{12}|} , \tag{2.26}$$

onde Υ_{12} é o elemento de matriz do Halmitoniano H entre as configurações com a banda e o buraco no sítio 1 e a banda e o buraco no sítio 2. Indicando essas configurações respectivamente por $d_1^\dagger \left|BC_1\right\rangle$ e $d_2^\dagger \left|BC_2\right\rangle$ e usando 2.25 temos,

$$\Upsilon_{12} = -\frac{\Delta}{2} \left\langle BC_1 \middle| BC_2 \right\rangle . \tag{2.27}$$

A presença do buraco tunelante entre as impurezas defasa os elétrons da banda de condução do metal, que tendem a blindá-lo através da geração de pares elétron-buraco próximo ao nível de Fermi. Nem todos os pares conseguirão acompanhar o processo de tunelamento. A uma excitação de um par de energia ε corresponde um tempo de resposta igual a

$$\tau_{BC} = \frac{\hbar}{|\varepsilon|} , \tag{2.28}$$

de forma que participam do processo de blindagem somente aqueles pares com $\tau_{BC} < \tau_\Delta$, ou $\varepsilon > |\Upsilon_{12}|$. Os demais pares de elétron-buraco, que não respondem suficientemente rápido à perturbação provocada pelo tunelamento, ficam à margem do processo de blindagem. Quanto

menor Δ, ou menor a projeção $\langle BC_1 | BC_2 \rangle$ que depende de G e R, mais excitações tomarão parte na blindagem e menor será a taxa efetiva de tunelamento.

Apesar da complexidade do modelo representado pelo Halmitoniano 2.25, ainda podemos representá-lo por um sistema de níveis localizados. Com $G = 0$ a separação entre esses níveis é Δ e com $G \neq 0$ essa separação passa a ser Δ^* (*taxa efetiva de tunelamento*).

No capítulo 4 mostramos os resultados encontrados com a diagonalização do Halmitoniano 2.25 usando o método do *GRN*. Verificamos que o termo $L_{\vec{k}'\vec{k}}$ participa da renormalização da taxa de tunelamento, seu efeito, contudo, é pequeno para G pequeno e como o cálculo de Kondo era perturbativo em G ele não era essencial. Como veremos mais claramente, a física por trás do tunelamento está contida no termo $N_{\vec{k}'\vec{k}}$ (Eq.2.15).

2.3 Cálculo da Taxa Efetiva de Tunelamento

Kondo definiu a taxa efetiva de tunelamento da seguinte forma [8]:

$$\Delta^* = 2\left[\varepsilon(0) - \varepsilon(\Delta)\right] , \tag{2.29}$$

onde $\varepsilon(\Delta)$ é a energia do estado fundamental do sistema (com $\Delta = 0$ não temos tunelamento). Utilizando Teoria de Perturbação, em baixas temperaturas, Kondo desenvolveu Eq.2.29 até chegar na expressão,

$$\frac{\Delta^*}{\Delta} \sim \left(\frac{\Delta}{D}\right)^{\eta} \qquad \text{para} \qquad k_B T \ll D . \tag{2.30}$$

Kondo determinou o expoente η de maneira aproximada. Posteriormente, utilizando o formalismo de matriz S, Yamada *et al* [5] encontraram a expressão exata para esse parâmetro:

$$\eta = \frac{K}{K-1} \qquad \text{com} \qquad K = \frac{1}{\pi^2} \arcsin^2\left(\sqrt{1-S^2}\sin\delta\right) , \tag{2.31}$$

onde

$$S = \frac{\sin k_F R}{k_F R} \tag{2.32}$$

(como definimos no capítulo 1) e δ é a defasagem na função de onda dos elétrons de condução no nível de Fermi provocado pelo potencial Coulombiano do buraco, isto é,

$$\tan \delta = \frac{|\pi G|}{D} \ . \tag{2.33}$$

Utilizando o *GRN* fomos capazes de diagonalizar o Halmitoniano 2.25 e com isso usamos diretamente a Eq. 2.29 para calcular a taxa efetiva de tunelamento. No capítulo 4 usamos a taxa efetiva de tunelamento para escalar a temperatura a fim de obtermos os picos de calor específico na mesma posição.

A análise das curvas de calor específico para vários valores diferentes nos induziu a descobrir uma relação que combinasse os parâmetros G e S. Observando as expressões acima obtidas por Yamada, verificamos que a relação

$$\alpha = \sqrt{1 - S^2} \sin \delta \ , \tag{2.34}$$

une dois parâmetros na definição da forma da curva: sistemas com G e S diferentes, mas com o mesmo parâmetro α têm curvas de calor específico coincidentes, como mostrado na Fig.1.4.

A diagonalização da Eq.2.25 é descrita com detalhe no próximo capítulo.

Capítulo 3

Grupo de Renormalização Numérico (GRN) para duas impurezas.

Reescreveremos o Hamiltoniano 2.25 de forma que ele possa ser diagonalizado numericamente. Para isso, o desenvolvimento matemático seguido é basicamente aquele proposto por Wilson [11], em particular modificado para o caso de duas impurezas.

3.1 Adaptação do Hamiltoniano de duas impurezas ao GRN.

Do cap. 2 temos o seguinte Hamiltoniano para o nosso modelo:

$$H = H_{bc} + H_{tun} + H_{esp} \ , \tag{3.1}$$

sendo

$$\begin{aligned} H_{bc} &= \int d^3k \varepsilon_{\vec{k}} c^\dagger_{\vec{k}} c_{\vec{k}} \ , & (3.2) \\ H_{tun} &= -\frac{\Delta}{2}(d_1^\dagger d_2 + d_2^\dagger d_1) \ , & (3.3) \\ H_{esp} &= G\Psi^\dagger(\frac{\vec{R}}{2})\Psi(\frac{\vec{R}}{2})d_1 d_1^\dagger + G\Psi^\dagger(\frac{-\vec{R}}{2})\Psi(\frac{-\vec{R}}{2})d_2 d_2^\dagger \ . & (3.4) \end{aligned}$$

H_{bc} refere-se à banda de condução do metal, H_{tun} refere-se ao tunelamento eletrônico entre as impurezas e H_{esp} refere-se ao espalhamento dos elétrons da banda de condução pelo buraco deixado pelo elétron em uma impureza ao tunelar para a outra.

Em nosso modelo, as duas impurezas adsorvidas no metal, estão inicialmente neutras. Uma delas é ionizada e o elétron da impureza vizinha passa a tunelar entre elas. Não existe troca de elétrons entre as impurezas e a banda de condução do metal. Consideramos a banda de condução simétrica em relação ao nível de energia de Fermi (ε_F), com largura $2D$ e isotrópica (a energia $\varepsilon_{\vec{k}}$ depende apenas do módulo do momentum $\vec{k}$):

$$\varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar k^2}{2m} \equiv \varepsilon_k \ , \tag{3.5}$$

sendo m é a massa do elétron livre.

Portanto, podemos reescrever o Hamiltoniano em função apenas da energia. Para isso, temos que transformar os operadores fermiônicos, que estão em função do momentum $\vec{k}$, para operadores fermiônicos em função da energia ε. Comecemos pelos operadores de campo:

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

onde definimos

$$c_{1\varepsilon} = \frac{1}{\sqrt{\rho(\varepsilon)}} \int d^3k e^{i\vec{k}\cdot\frac{\vec{R}}{2}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) c_{\vec{k}} \tag{3.7}$$

$$\rho(\varepsilon) = \int d^3k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) = 4\pi k(\varepsilon)^2 \frac{dk}{d\varepsilon_k} \ . \tag{3.8}$$

A densidade de estados $\rho(\varepsilon)$ aparece devido à normalização do operador $c_{1\varepsilon}$. Analogamente,

$$\Psi(\frac{-\vec{R}}{2}) = \int_{-D}^{D} d\varepsilon \sqrt{\rho(\varepsilon)} c_{2\varepsilon} \ , \tag{3.9}$$

onde

$$c_{2\varepsilon} = \frac{1}{\sqrt{\rho(\varepsilon)}} \int d^3k e^{-i\vec{k}\cdot\frac{\vec{R}}{2}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) c_{\vec{k}} \ . \tag{3.10}$$

Devemos verificar se esses novos operadores são fermiônicos. Usando as Equações 3.7 e 3.10, observamos que

$$\{c_{1\varepsilon}, c^\dagger_{1\varepsilon'}\} = \delta(\varepsilon - \varepsilon') \ , \tag{3.11}$$

$$\{c_{2\varepsilon}, c^\dagger_{2\varepsilon'}\} = \delta(\varepsilon - \varepsilon') \ , \tag{3.12}$$

$$\{c_{1\varepsilon}, c^\dagger_{2\varepsilon'}\} = \frac{1}{\rho(\varepsilon)} \delta(\varepsilon - \varepsilon') \int d^3k e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\vec{k}}) \ . \tag{3.13}$$

Como vemos, $c_{1\varepsilon}$ e $c_{2\varepsilon}$ não obedecem a relação de anti-comutação. Usando a definição de $\rho(\varepsilon)$ (Eq. 3.8) e o fato da banda de condução ser isotrópica (Eq. 3.5), temos

$$\{c_{1\varepsilon}, c^\dagger_{2\varepsilon'}\} = \delta(\varepsilon - \varepsilon') \frac{\sin k(\varepsilon) R}{k(\varepsilon) R} \ . \tag{3.14}$$

Somente quando $R = 0$ (isto é, quando as impurezas estiverem na mesma posição), teremos a relação de anti-comutação satisfeita. Devemos, então, construir novos operadores que sejam realmente fermiônicos. Além disso, vamos aproveitar a simetria de inversão do nosso modelo e construir esses novos operadores com paridades já definidas ($+ \longrightarrow$ *par*, $- \longrightarrow$ *ímpar*). Portanto, definimos os operadores

$$s_{\varepsilon +} = \frac{1}{A_+} \left(\frac{c_{1\varepsilon} + c_{2\varepsilon}}{2}\right) \qquad s_{\varepsilon -} = \frac{1}{A_-} \left(\frac{c_{1\varepsilon} - c_{2\varepsilon}}{2}\right) \tag{3.15}$$

onde

$$A_+^2 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\sin k(\varepsilon) R}{k(\varepsilon) R}\right) \qquad A_-^2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\sin k(\varepsilon) R}{k(\varepsilon) R}\right) \ , \tag{3.16}$$

tal que $s_{\varepsilon+}$ e $s_{\varepsilon-}$ satisfazem as relações de anticomutação:

$$\{s_{\varepsilon+}\,,\,s_{\varepsilon'-}\} = 0 \quad \{s_{\varepsilon+}\,,\,s^{\dagger}_{\varepsilon'-}\} = 0 \tag{3.17}$$

$$\{s_{\varepsilon\pm}\,,\,s^{\dagger}_{\varepsilon'\pm}\} = \delta(\varepsilon-\varepsilon')\,. \tag{3.18}$$

Como os operadores de campo estão expressos em termos de $c_{1\varepsilon}$ e $c_{2\varepsilon}$, vamos colocar estes últimos em função de $s_{\varepsilon+}$, $s_{\varepsilon-}$:

$$c_{1\varepsilon} = A_+ s_{\varepsilon+} + A_- s_{\varepsilon-} \tag{3.19}$$

$$c_{2\varepsilon} = A_+ s_{\varepsilon+} - A_- s_{\varepsilon-}\,. \tag{3.20}$$

Portanto, os operadores de campo ficam:

$$\Psi(\frac{\vec{R}}{2}) = \int_{-D}^{D} d\varepsilon\sqrt{\rho(\varepsilon)}c_{1\varepsilon} = \int_{-D}^{D} d\varepsilon\sqrt{\rho(\varepsilon)}(A_+ s_{\varepsilon+} + A_- s_{\varepsilon-})\,, \tag{3.21}$$

$$\Psi(\frac{-\vec{R}}{2}) = \int_{-D}^{D} d\varepsilon\sqrt{\rho(\varepsilon)}c_{2\varepsilon} = \int_{-D}^{D} d\varepsilon\sqrt{\rho(\varepsilon)}(A_+ s_{\varepsilon+} - A_- s_{\varepsilon-})\,. \tag{3.22}$$

Reescrevendo H_{esp} (Eq. 3.4) usando essas novas expressões e lembrando da isotropia da banda de condução, encontramos

$$\begin{aligned} H_{esp} = {} & G\iint_{-D}^{D} d\varepsilon d\varepsilon'\sqrt{\rho(\varepsilon)\rho(\varepsilon')}(A_+^2 s^{\dagger}_{\varepsilon+}s_{\varepsilon'+} + A_-^2 s^{\dagger}_{\varepsilon-}s_{\varepsilon'-} + \\ & +A_+A_- s^{\dagger}_{\varepsilon+}s_{\varepsilon'-} + A_-A_+ s^{\dagger}_{\varepsilon-}s_{\varepsilon'+})d_1 d_1^{\dagger} + \\ & +G\iint_{-D}^{D} d\varepsilon d\varepsilon'\sqrt{\rho(\varepsilon)\rho(\varepsilon')}(A_+^2 s^{\dagger}_{\varepsilon+}s_{\varepsilon'+} + A_-^2 s^{\dagger}_{\varepsilon-}s_{\varepsilon'-} + \\ & -A_+A_- s^{\dagger}_{\varepsilon+}s_{\varepsilon'-} - A_-A_+ s^{\dagger}_{\varepsilon-}s_{\varepsilon'+})d_2 d_2^{\dagger}\,. \end{aligned} \tag{3.23}$$

Agora iremos representar H_{bc} em termos dos novos operadores $s_{\varepsilon+}$ e $s_{\varepsilon-}$. Expandindo os operadores $c_{\vec{k}}$ em harmônicos esféricos, obtemos

$$H_{bc} = \int d^3k\, \varepsilon_{\vec{k}} c^\dagger_{\vec{k}} c_{\vec{k}} = \sum_{lm} \int dk\, \varepsilon_k c^\dagger_{klm} c_{klm} \; .$$

Entretanto, apenas os elétrons com função de onda com $m = 0$ contribuem para H_{bc}. Para verificarmos isto, expandimos o operador de campo (Eq. 3.6) também em harmônicos esféricos, usando a Fórmula de Bauer:

$$e^{i\vec{k}\cdot\frac{\vec{R}}{2}} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} j_l(\frac{kR}{2}) Y_{l0} \; . \tag{3.24}$$

onde j_l é a função de Bessel esférica, obtendo

$$\Psi(\frac{\vec{R}}{2}) = \int d^3k \left\{ \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} j_l(\frac{kR}{2}) Y_{l0} \right\} \left\{ \frac{1}{k} \sum_{l',m} Y_{l'm} c_{kl'm} \right\} \; , \tag{3.25}$$

Devido à ortogonalidade dos harmônicos esféricos, a integração na parte angular resulta em

$$\Psi(\frac{\vec{R}}{2}) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} \int k\, dk\; j_l(\frac{kR}{2}) c_{kl0} \; , \tag{3.26}$$

isto é, somente os elétrons que têm função de onda com $m = 0$ são espalhados. Somente esses elétrons contribuem para as propriedades termodinâmicas das impurezas e por isso desprezamos os demais. Levando em conta a isotropia da banda de condução, escrevemos

$$c_{\vec{k}} = \frac{1}{k} \sum_l Y_{l0} c_{kl} \; , \tag{3.27}$$

onde $c_{kl} \equiv c_{kl0}$ e consideramos a isotropia da banda de condução. Reescrevendo H_{bc}

$$H_{bc} = \int d^3k\, \varepsilon_{\vec{k}} c^\dagger_{\vec{k}} c_{\vec{k}} = \sum_l \int dk\, \varepsilon_k c^\dagger_{kl} c_{kl} \; . \tag{3.28}$$

Os operadores c_{kl} obedecem relações de comutação de férmions. Definindo novos operadores $(c_{\varepsilon l})$, também fermiônicos,

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

$$c_{k\,l} = \sqrt{\frac{d\varepsilon}{dk}} c_{\varepsilon\,l}\ , \tag{3.29}$$

obtemos

$$H_{bc} = \sum_l \int_{-D}^{D} \frac{dk}{d\varepsilon} d\varepsilon\, \varepsilon\, \frac{d\varepsilon}{dk} c^{\dagger}_{\varepsilon\,l} c_{\varepsilon\,l} = \sum_l \int_{-D}^{D} d\varepsilon\, \varepsilon\, c^{\dagger}_{\varepsilon\,l} c_{\varepsilon\,l}\ . \tag{3.30}$$

Finalmente, poderemos expressar $c_{\varepsilon\,l}$ em termos dos operadores $s_{\varepsilon+}$ e $s_{\varepsilon-}$. Usando as Eqs. 3.27 e 3.29 nas Eqs. 3.7 e 3.10, temos

$$c_{1\varepsilon} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{(2l+1)}\, j_l(\frac{kR}{2})\, c_{\varepsilon\,l}\ . \tag{3.31}$$

Analogamente para $c_{2\varepsilon}$

$$c_{2\varepsilon} = \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l \sqrt{(2l+1)}\, j_l(\frac{kR}{2})\, c_{\varepsilon\,l}\ . \tag{3.32}$$

Substituindo as Eqs. 3.31 e 3.32 na definição de $s_{\varepsilon+}$ e $s_{\varepsilon-}$ (Eq. 3.15) obtemos

$$s_{\varepsilon\pm} = \frac{1}{A_\pm} \sum_{l_\pm}^{\infty} i^l \sqrt{(2l+1)}\ j_l(\frac{kR}{2})\, c_{\varepsilon\,l}\ , \tag{3.33}$$

sendo $l_+ = 0, 2, 4, ...$ e $l_- = 1, 3, 5, ...$. Essas equações são da forma

$$s_{\varepsilon\,p} = \sum_l u_{p\,l}\, c_{\varepsilon\,l}\ , \tag{3.34}$$

onde

$$u_{p\,l} = \begin{cases} \frac{1}{A_+} i^l \sqrt{(2l+1)}\ j_l(\frac{kR}{2})\ \delta_{1,(-1)^l}\ ; & se\ p = + \\ \frac{1}{A_-} i^l \sqrt{(2l+1)}\ j_l(\frac{kR}{2})\ \delta_{-1,(-1)^l}\ ; & se\ p = - \end{cases} \tag{3.35}$$

Esses coeficientes obedecem à relação de ortogonalidade

$$\sum_l u_{pl}\, u^*_{p'l} = \delta_{pp'} \ , \tag{3.36}$$

por isso, podemos fazer uma transformação ortonormal na Eq. 3.34, obtendo assim o operador $c_{\varepsilon l}$ em termos dos operadores $s_{\varepsilon p}$:

$$c_{\varepsilon l} = \sum_p u^*_{pl}\, s_{\varepsilon p} \ . \tag{3.37}$$

H_{esp} é definido por operadores com paridade definida (Eq. 3.23): $+ \longrightarrow$ *par*, $- \longrightarrow$ *ímpar* . Isto é, os elétrons de funções de onda sem paridade não se acoplam com as impurezas. Eles não influenciam no cálculo de propriedades termodinâmicas das impurezas e por isso foram desprezados. Dessa forma, usando a Eq. 3.36 escrevemos H_{bc} (Eq.3.30) como

$$H_{bc} = \sum_{ppl} \int_{-D}^{D} d\varepsilon\, \varepsilon\, u_{pl} u^*_{pl}\, s^\dagger_{\varepsilon p} s_{\varepsilon p} = \sum_p \int_{-D}^{D} d\varepsilon\, \varepsilon\ s^\dagger_{\varepsilon p}\, s_{\varepsilon p} \ , \tag{3.38}$$

$$H_{bc} = \int_{-D}^{D} d\varepsilon\, \varepsilon\, (s^\dagger_{\varepsilon+}\, s_{\varepsilon+} + s^\dagger_{\varepsilon-}\, s_{\varepsilon-}) \tag{3.39}$$

Em termos dos novos operadores o Hamiltoniano completo resulta em

$$\begin{aligned} H = & \int_{-D}^{D} d\varepsilon\, \varepsilon\ (s^\dagger_{\varepsilon+}\, s_{\varepsilon+} + s^\dagger_{\varepsilon-}\, s_{\varepsilon-}) - \frac{\Delta}{2}(d^\dagger_1 d_2 + d^\dagger_2 d_1) + \\ & + G \iint_{-D}^{D} d\varepsilon d\varepsilon' \sqrt{\rho(\varepsilon)\rho(\varepsilon')}(A^2_+ s^\dagger_{\varepsilon+} s_{\varepsilon'+} + A^2_- s^\dagger_{\varepsilon-} s_{\varepsilon'-} + \\ & + A_+ A_- s^\dagger_{\varepsilon+} s_{\varepsilon'-} + A_- A_+ s^\dagger_{\varepsilon-} s_{\varepsilon'+}) d_1 d^\dagger_1 + \\ & + G \iint_{-D}^{D} d\varepsilon d\varepsilon' \sqrt{\rho(\varepsilon)\rho(\varepsilon')}(A^2_+ s^\dagger_{\varepsilon+} s_{\varepsilon'+} + A^2_- s^\dagger_{\varepsilon-} s_{\varepsilon'-} + \\ & - A_+ A_- s^\dagger_{\varepsilon+} s_{\varepsilon'-} - A_- A_+ s^\dagger_{\varepsilon-} s_{\varepsilon'+}) d_2 d^\dagger_2. \end{aligned} \tag{3.40}$$

Como se vê, os acoplamentos das impurezas com os operadores $s_{\varepsilon p}$ dependem da energia ε. Isso introduz sérias dificuldades para a implementação do Grupo de Renormalização.

Contudo como estamos interessados em propriedades termodinâmicas a baixas temperaturas físicas ($k_BT \ll D$), é bastante razoável considerar todos esses acoplamentos constantes e iguais a seus valores na energia de Fermi. Tal aproximação para os casos de uma impureza, onde a mesma dificuldade aparece, mostrou ser bastante boa [20]. Já no modelo de Kondo de duas impurezas tal aproximação altera a simetria partícula-buraco do modelo o que causa resultados espúrios [21, 22]. O nosso modelo não possui simetria partícula-buraco mesmo com a aproximação dos acoplamentos constantes. Sendo assim, assumiremos que essa aproximação ainda preserva as características relevantes do modelo, a saber, o acoplamento Coulombiano da banda de condução com um elétron tunelante.

Por isso, com $k_BT << D$, consideramos

$$A_{\pm}(\varepsilon) = A_{\pm}(\varepsilon_F) \ e \tag{3.41}$$

$$\rho(\varepsilon) = \int d^3k\delta(\varepsilon - \varepsilon_k) \equiv \rho(\varepsilon_F) = \frac{1}{D} , \tag{3.42}$$

consistente com a normalização dos operadores de campo (3.6). Fazendo essas aproximações e dimensionalizando em termos de D, obtemos

$$\begin{aligned}
\frac{H}{D} = & \int_{-1}^{1} d\varepsilon\, \varepsilon\, (s^{\dagger}_{\varepsilon+} s_{\varepsilon+} + s^{\dagger}_{\varepsilon-} s_{\varepsilon-}) - \frac{\Delta}{2}(d_1^{\dagger}d_2 + d_2^{\dagger}d_1) + \\
& +G\left(A_+^2 \iint_{-1}^{1} d\varepsilon d\varepsilon' s^{\dagger}_{\varepsilon+} s_{\varepsilon'+} + A_-^2 \iint_{-1}^{1} d\varepsilon d\varepsilon' s^{\dagger}_{\varepsilon-} s_{\varepsilon'-} + \right. \\
& \left. +A_+A_- \iint_{-1}^{1} d\varepsilon d\varepsilon' s^{\dagger}_{\varepsilon+} s_{\varepsilon'-} + A_-A_+ \iint_{-1}^{1} d\varepsilon d\varepsilon' s^{\dagger}_{\varepsilon-} s_{\varepsilon'+}\right) d_1 d_1^{\dagger} + \\
& +G\left(A_+^2 \iint_{-1}^{1} d\varepsilon d\varepsilon' s^{\dagger}_{\varepsilon+} s_{\varepsilon'+} + A_-^2 \iint_{-1}^{1} d\varepsilon d\varepsilon' s^{\dagger}_{\varepsilon-} s_{\varepsilon'-} + \right. \\
& \left. -A_+A_- \iint_{-1}^{1} d\varepsilon d\varepsilon' s^{\dagger}_{\varepsilon+} s_{\varepsilon'-} - A_-A_+ \iint_{-1}^{1} d\varepsilon d\varepsilon' s^{\dagger}_{\varepsilon-} s_{\varepsilon'+}\right) d_2 d_2^{\dagger} ,
\end{aligned} \tag{3.43}$$

onde fizemos

$$\frac{\varepsilon}{D} \rightarrow \varepsilon \,, \quad \frac{\Delta}{D} \rightarrow \Delta \quad e \quad \frac{G}{D} \rightarrow G \,. \tag{3.44}$$

(apesar de mudarem as constantes, mantemos a mesma nomenclatura por simplicidade).

Todas as aproximações feitas até agora preservam a principal característica do modelo, que é a interação do elétron tunelante com a banda de condução. Mas os operadores usados até agora ainda atuam no contínuo, o que impede o cálculo númerico. O próximo passo é introduzir operadores discretos através da discretização logarítmica.

3.2 Discretização Logarítmica

Vamos discretizar a banda de condução de maneira semelhante ao procedimento de Wilson para o modelo de uma impureza [11]. Usamos esse procedimento porque estamos interessados em estudar as propriedades termodinâmicas do nosso modelo em baixas temperaturas ($k_B T << D$). Isto significa que os níveis relevantes são aqueles bem próximos ao nível de Fermi. Nessa faixa a banda de condução, por ser um contínuo de energias, tem uma propriedade característica: *ela é invariante por transformação de escala de energia.* A Fig.3.1 ilustra esta propriedade: em 3.1.*a* temos a banda de condução representada por alguns de seus níveis, em 3.1.*b* temos uma ampliação da banda e podemos observar que na faixa próxima ao nível de Fermi, a estrutura dos níveis de energia é a mesma (dizemos que é invariante por mudança de escala).

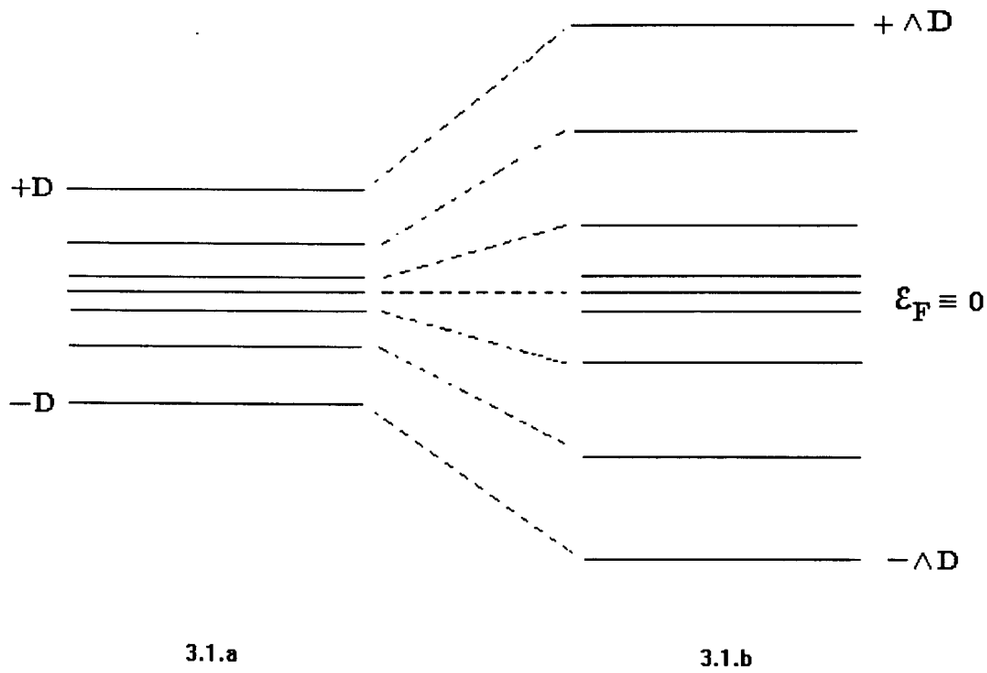

Figura 3.1: Banda de condução representada por alguns de seus níveis (centrada no nível de Fermi e com largura 2D). Em a) temos em escala normal. Em b) a escala foi multiplicada por um fator Λ. Observe que a estrutura de níveis perto do nível de Fermi se mantém constante.

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

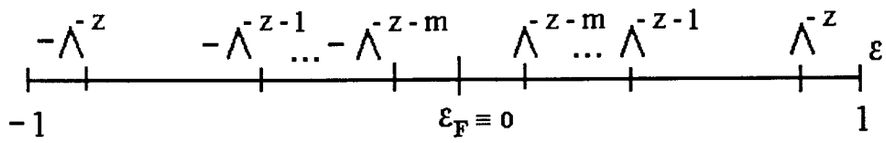

Figura 3.2: Banda de condução discretizada logaritmicamente. ε é medido em relação ao nível de Fermi, em unidades de meia largura da banda (D).

Para manter a propriedade de invariância de escala , Wilson discretizou logaritmicamente a banda de condução, de maneira semelhante ao ilustrado na Fig.3.2. No procedimento tradicional de Wilson não existe o parâmetro z, apenas Λ (para recuperar a discretização logarítmica de Wilson basta fazer $z = 1$).

Neste trabalho a banda de condução foi discretizada utilizando esses dois parâmetros adimensionais Λ e z ($\Lambda > 1$ e $0 \leq z \leq 1$). Na escolha do valor do parâmetro de discretização Λ há dois fatos a serem considerados: valores grandes de Λ (10, 12) nos levam rapidamente ao nível de Fermi, o que reduz o tempo de processamento computacional; contudo, gostaríamos de usar Λ pequeno (entre 2 e 4) para que a base de estados seja o mais representativa possível do contínuo (intervalos menores na Fig.3.2). Nesta dissertação os resultados foram obtidos utilizando $\Lambda = 4$ (este valor, entre outros, mostrou-se satisfatório nessas duas condições). O parâmetro z representa um aprimoramento da discretização logarítmica. Ele foi criado inicialmente para calcular propriedades dinâmicas de determinados modelos (como o Modelo de Anderson com degenerescência de spin) [16, 23, 24], o que era muito difícil com a discretização tradicional. Mais tarde, descobriu-se que ele era capaz de eliminar oscilações originárias do método numérico nas curvas de propriedades termodinâmicas [17]. Curvas de propriedades termodinâmicas com valores de z diferindo de 0.5 apresentam essas oscilações defasadas de π. Isso permite o cancelamento dessas oscilações originárias do método numérico através da

simples média aritmética das curvas. Assim, tornou-se possível trabalhar com valores mais altos de Λ e consequentemente, atingir temperaturas mais baixas. A partir de determinado valor de Λ, as oscilações reaparecem e é necessário uma combinação mais elaborada de curvas com z diferentes [18]. Neste trabalho foi suficiente utilizar apenas dois valores de z : 0.5 e 1.0 para retirar, de modo satisfatório, as oscilações originárias do método númerico em baixa temperatura.

Podemos observar na Fig.3.2 como os estados (intervalos) se aglomeram em torno de ε_F (ε_F é um ponto de acumulação da série de estados), de tal forma a "simular" o contínuo de estados original da banda. No limite $\Lambda \longrightarrow 1$ recuperamos o contínuo. A invariância de escala está ainda presente, porém de forma discreta, isto é, a banda da Fig.3.2 é invariante pela multiplicação por potências de Λ.

Na Fig.3.2 temos a discretização da banda em uma série de intervalos, onde o m-ésimo é aquele compreendido entre Λ^{-z-m-1} e Λ^{-z-m} ($m = 0, 1, 2, ...$), com exceção do topo da banda. No lado negativo a definição é equivalente.

Para cada intervalo construímos um conjunto completo de funções de onda ortonormais Φ_{ml} (ondas planas),

$$\Phi_l^{(\pm)}(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{(1-\Lambda^{-z})^{\frac{1}{2}}} \exp\left(\pm \frac{2\pi i}{1-\Lambda^{-z}} l\varepsilon\right), & se\ \Lambda^{-z} < \pm\varepsilon < 1; \\ 0, & \text{fora do intervalo} \end{cases} \tag{3.45}$$

e

$$\Phi_{ml}^{(\pm)}(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{\Lambda^{\frac{m+z}{2}}}{(1-\Lambda^{-1})^{\frac{1}{2}}} \exp\left(\pm \frac{2\pi i \Lambda^{m+z}}{1-\Lambda^{-1}} l\varepsilon\right), & se\ \Lambda^{-(z+m+1)} < \pm\varepsilon < \Lambda^{-(z+m)}; \\ 0, & \text{fora do intervalo}, \end{cases} \tag{3.46}$$

onde l é o índice da Série de Fourier em cada intervalo ($-\infty < l < \infty$, l *inteiro*) e $+(-)$ indica definição da função para ε positivo (negativo). Além disso, usamos a condição da função ter o mesmo valor nos limites dos intervalos

$$\Phi_l^{(\pm)}(\Lambda^{-z}) = \Phi_l^{(\pm)}(1) \quad e \quad \Phi_{ml}^{(\pm)}(\Lambda^{-(z+m+1)}) = \Phi_{ml}^{(\pm)}(\Lambda^{-(z+m)}) \ . \tag{3.47}$$

Expandindo os operadores $s_{\varepsilon p}$ nesta nova base,

$$s_{\varepsilon p} = \sum_{m,l} \{ a_{pl}\Phi_l^{(+)} + b_{pl}\Phi_l^{(-)} + a_{pml}\Phi_{ml}^{(+)} + b_{pml}\Phi_{ml}^{(-)} \} \ , \tag{3.48}$$

podemos definir os operadores fermiônicos:

$$\begin{aligned} a_{pl} &= \int_{-1}^{1} d\varepsilon \{\Phi_l^{(+)}(\varepsilon)\}^* s_{\varepsilon p} \ , \qquad b_{pl} = \int_{-1}^{1} d\varepsilon \{\Phi_l^{(-)}(\varepsilon)\}^* s_{\varepsilon p} \ , \\ a_{pml} &= \int_{-1}^{1} d\varepsilon \{\Phi_{ml}^{(+)}(\varepsilon)\}^* s_{\varepsilon p} \ , \qquad b_{pml} = \int_{-1}^{1} d\varepsilon \{\Phi_{ml}^{(-)}(\varepsilon)\}^* s_{\varepsilon p} \ . \end{aligned} \tag{3.49}$$

Podemos entender estes operadores como destruidores de elétrons com energia média de acordo com os respectivos intervalos. Por exemplo, $a_{pml}^{\dagger}$ cria um elétron com energia média em torno de

$$\varepsilon_m = \frac{1+\Lambda^{-1}}{2}\Lambda^{-m-z} \ . \tag{3.50}$$

Reescrevendo a banda de condução em termos desses novos operadores temos

$$\begin{aligned} H_{bc} &= \sum_p \int d\varepsilon \, \varepsilon \, s_{\varepsilon p}^{\dagger} s_{\varepsilon p} = \\ &= \sum_p \int d\varepsilon \, \varepsilon \sum_{m,l} \{ a_{pl}^{+}\Phi_l^{(+)*} + b_{pl}^{+}\Phi_l^{(-)*} + a_{pml}^{+}\Phi_{ml}^{(+)*} + b_{pml}^{+}\Phi_{lm}^{(-)*} \} \ \times \\ &\quad \times \sum_{m',l'} \{ a_{pl'}\Phi_{l'}^{(+)} + b_{pl'}\Phi_{l'}^{(-)} + a_{pm'l'}\Phi_{m'l'}^{(+)} + b_{pm'l'}\Phi_{l'm'}^{(-)} \} \ . \end{aligned} \tag{3.51}$$

Como cada função $\Phi(\varepsilon)$ é nula fora do seu respectivo intervalo, os termos proporcionais a $a_{pl}^{+}b_{pl}$ são nulos, logo

$$
\begin{aligned}
H_{bc} &= \sum_{pl} \frac{(1+\Lambda^{-z})}{2} \left[a_{pl}^{+} a_{pl} - b_{pl}^{+} b_{pl}\right] + \\
&+ \sum_{pl \neq l'} \frac{[1-\Lambda^{-z}] \exp\left(\frac{2\pi i}{1-\Lambda^{-z}}(l'-l)\right)}{2\pi i (l'-l)} \left[a_{pl}^{+} a_{pl'} - b_{pl}^{+} b_{pl'}\right] + \\
&+ \sum_{pml} \frac{\Lambda^{-z-m}(1+\Lambda^{-1})}{2} [a_{pml}^{+} a_{pml} - b_{pml}^{+} b_{pml}] + \\
&+ \sum_{pml \neq l'} \frac{[1-\Lambda^{-1}]\, \Lambda^{-m-z} \exp\left(\frac{2\pi i \Lambda^{m+z}}{1-\Lambda^{-1}}(l'-l)\Lambda^{-z-m}\right)}{2\pi i\, (l'-l)} [a_{pml}^{+} a_{pml'} - b_{pml}^{+} b_{pml'}] \,. \qquad (3.52)
\end{aligned}
$$

Podemos simplificar ainda mais esta expressão. Observando a expressão do Hamiltoniano, Eq. 3.43, vemos que as impurezas interagem com a banda de condução através do termo $\int d\varepsilon\, s_{\varepsilon p}$. Usando as Eqs. 3.45, 3.46 e 3.48 resolvemos esta integral e obtemos o seguinte resultado,

$$
\int_{-1}^{1} d\varepsilon\, s_{\varepsilon p} = \left(1-\Lambda^{-z}\right)^{\frac{1}{2}} [a_{p0} + b_{p0}] + \left(1-\Lambda^{-1}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{m} \Lambda^{\frac{-m-z}{2}} [a_{pm0} + b_{pm0}] \,, \qquad (3.53)
$$

que é exato e nos diz que as impurezas interagem diretamente apenas com os estados $l = 0$, que são os mais localizados. Assim, na Eq. 3.52, vamos manter apenas os termos com $l = 0$:

$$
\begin{aligned}
H_{bc} &= \sum_{p} \frac{(1+\Lambda^{-z})}{2} \left[a_{p}^{+} a_{p} - b_{p}^{+} b_{p}\right] + \\
&+ \sum_{pm} \frac{\Lambda^{-z-m}(1+\Lambda^{-1})}{2} [a_{pm}^{+} a_{pm} - b_{pm}^{+} b_{pm}] \,, \qquad (3.54)
\end{aligned}
$$

onde omitimos o índice $l = 0$ nos operadores.

A Eq. 3.53 sugere que se definam os operadores fermiônicos

$$
f_{0p} = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{-1}^{1} d\varepsilon\, s_{\varepsilon p} \,, \qquad (3.55)
$$

onde $p = +, -$. Esses operadores fermiônicos são os únicos que se acoplam diretamente com as impurezas. Quando $p = +$ temos a combinação dos estados eletrônicos entre as duas impurezas de acordo com $s_{\varepsilon+}$ (3.15). Esta combinação é comumente chamada de *Canal Par*. Analogamente, quando $p = -$, a combinação dos estados é de acordo com $s_{\varepsilon-}$ e é denominada de *Canal Ímpar*. Dessa forma, o Hamiltoniano do sistema fica

$$\begin{aligned}
\frac{H}{D} &= \sum_p \frac{(1+\Lambda^{-z})}{2}[a_p^+ a_p - b_p b_p] + \sum_{pm} \frac{\Lambda^{-z-m}(1+\Lambda^{-1})}{2}[a_{pm}^+ a_{pm} - b_{pm}^+ b_{pm}] + \\
&+2G\,[\,A_+^2\, f_{0+}^\dagger\, f_{0+} + A_-^2\, f_{0-}^\dagger\, f_{0-} + A_+A_-(\, f_{0+}^\dagger\, f_{0-} + f_{0-}^\dagger\, f_{0+})\,]\, d_1 d_1^\dagger + \\
&+2G\,[\,A_+^2\, f_{0+}^\dagger\, f_{0+} + A_-^2\, f_{0-}^\dagger\, f_{0-} - A_+A_-(\, f_{0+}^\dagger\, f_{0-} + f_{0-}^\dagger\, f_{0+})\,]\, d_2 d_2^\dagger + \\
&- \frac{\Delta}{2}(d_1^\dagger d_2 + d_2^\dagger d_1)
\end{aligned} \tag{3.56}$$

Transformamos o Hamiltoniano 3.43, cujo operadores atuam no contínuo de energia, no Hamiltoniano 3.56, que está expresso em termos de operadores que atuam em intervalos determinados de energia. Ainda não definimos o número destes intervalos. Na próxima seção vamos determinar esse número para permitir que o Hamiltoniano seja resolvido numericamente.

3.3 Hamiltoniano na forma iterativa.

O acoplamento da impureza com a banda de condução do metal é representada pelo operador f_{0p}. A banda de condução está expressa por uma série infinita dos operadores a_p, b_{pm}, etc, o que significa que ainda não é tratável numericamente. Para isto é necessário truncarmos esta série. Mas se fizermos isto agora estaremos comprometendo o acoplamento da impureza com a banda de condução, porque f_{0p} também é expresso em termos desses operadores. Portanto, antes de truncarmos a série vamos expressar a banda de condução em uma nova base de operadores fermiônicos que contenha f_{0p}, isto é, fazemos uma transformação unitária do conjunto de operadores (a_p, b_p, a_{pm}, b_{pm}) para um novo conjunto de operadores f_{np} (f_{0p}, f_{1p},

IFSC — BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

...; onde f_{0p} já é conhecido). Essa transformação é tal que f_{np} só se acopla com f_{n-1p} e com f_{n+1p} [25]. A banda de condução fica então, na seguinte forma (matriz tridiagonal)

$$H_{bc} = \frac{(1+\Lambda^{-1})}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n^{(z)} \left(f_{n,+}^{\dagger} f_{n+1,+} + f_{n,-}^{\dagger} f_{n+1,-} + h.c. \right), \tag{3.57}$$

que é uma série infinita que concentra todo o acoplamento da impureza com a banda no termo f_{0p}, sendo portanto uma expressão mais conveniente para que façamos o truncamento. Os coeficientes ϵ_n^z são determinados numericamente [25]. Quando n é muito maior que a unidade, tem-se o comportamento assintótico

$$\epsilon_n^{(z)} \cong \frac{1+\Lambda^{-1}}{2} \Lambda^{1-z-\frac{n}{2}} \ , \qquad n >> 1. \tag{3.58}$$

Truncando a série de operadores na banda de condução, obtemos

$$H_{bc}^{N} = \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_n^{(z)} \left(f_{n,+}^{\dagger} f_{n+1,+} + f_{n,-}^{\dagger} f_{n+1,-} + h.c. \right), \tag{3.59}$$

onde $h.c$ é o hermitiano conjugado.

À medida que n vai aumentando, os elementos da matriz H_{bc}^{N} vão se tornando cada vez menores. Por facilidade computacionais, é conveniente fazer que o menor termo da banda de condução ($\epsilon_{N-1}^{(z)}$) seja da ordem da unidade. Conseguimos isto aumentando a escala de energia em cada iteração, através da multiplicação de H_N pelo fator

$$\frac{2}{1+\Lambda^{-1}} \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \ , \tag{3.60}$$

Para não sobrecarregar a notação mantivemos o símbolo H_N ,

$$H_N \cdot \frac{2}{1+\Lambda^{-1}} \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \rightarrow H_N \, , \tag{3.61}$$

Assim, o Hamiltoniano do sistema fica

$$
\begin{aligned}
H_N \;=\; & \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \Bigg\{ \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_n^{(z)} \left(f_{n,+}^\dagger f_{n+1,+} + f_{n,-}^\dagger f_{n+1,-} + h.c. \right) + \\
& +2G' \left[A_+^2 f_{0+}^\dagger f_{0+} + A_-^2 f_{0-}^\dagger f_{0-} + A_+ A_- (f_{0+}^\dagger f_{0-} + f_{0-}^\dagger f_{0+}) \right] d_1 d_1^\dagger + \\
& +2G' \left[A_+^2 f_{0+}^\dagger f_{0+} + A_-^2 f_{0-}^\dagger f_{0-} - A_+ A_- (f_{0+}^\dagger f_{0-} + f_{0-}^\dagger f_{0+}) \right] d_2 d_2^\dagger + \\
& - \frac{\Delta'}{2} (d_1^\dagger d_2 + d_2^\dagger d_1) \Bigg\} \,,
\end{aligned}
\tag{3.62}
$$

com

$$
G' = \frac{2G}{1+\Lambda^{-1}} \quad \text{e} \quad \Delta' = \frac{2\Delta}{1+\Lambda^{-1}} \,. \tag{3.63}
$$

Observamos que H/D (Eq. 3.43) é recuperado no limite

$$
\frac{H}{D} = \lim_{N\to\infty} \frac{1+\Lambda^{-1}}{2} \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} H_N \,. \tag{3.64}
$$

Como exemplo, na Fig.3.3 temos a forma inicial e final dos operadores *"para o procedimento de Wilson no caso de* 01 *impureza (de* $c_{\vec{k}}$ *até* f_n*)"*. Em nosso caso (duas impurezas), temos $f_{n,+}$ e $f_{n,-}$, mas a idéia é a mesma: no início as funções de onda tinham energia definida mas estavam espalhadas em todo espaço. Agora elas têm uma extensão espacial finita em torno da impureza.

Na próxima seção vamos comentar as propriedades do Hamiltoniano 3.62.

3.4 Características de $\mathbf{H}_N$.

O modelo que estamos tratando não permite troca de elétrons entre as impurezas e a banda de condução. Esse fato é retratado no Hamiltoniano pela *Conservação da Carga das Impurezas* e pela *Conservação da Carga da Banda de Condução.*

Podemos observar isso, verificando que o operador número de partículas das impurezas

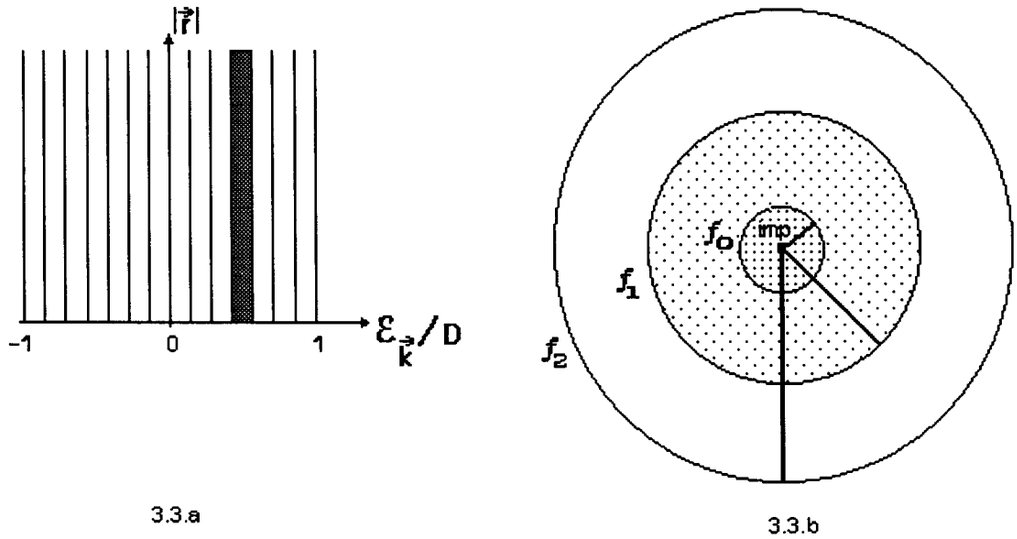

Figura 3.3: Diagrama esquemático da evolução dos operadores para o caso de apenas "01 IMPUREZA ". Em (a) temos o espaço de fase dos operadores $c_{\vec{k}}$ (distância da impureza em função da energia do elétron da banda). Em (b) temos a representação esquemática do raio de ação dos operadores f_n em torno da impureza.

$$QI = d_1^\dagger d_1 + d_2^\dagger d_2 \tag{3.65}$$

comuta com H_N. Em nosso modelo, a carga líquida das duas impurezas mantêm-se constante e igual a 1 (só nos interessa o elétron que fica tunelando de uma impureza para a outra).

Da mesma forma, o operador número de partículas da banda de condução,

$$Q_N = \sum_{n=0}^{N} (f_{n,+}^\dagger f_{n,+} + f_{n,-}^\dagger f_{n,-}) , \tag{3.66}$$

também comuta com H_N. Consequentemente, o número total de partículas é conservado.

Outra característica é a *Conservação de Paridade.* Como já dissemos, nosso modelo apresenta simetria de inversão: trocar $\vec{R}/2$ por $-\vec{R}/2$ e 1 por 2 resulta no mesmo Hamiltoniano. Isso significa que, quando o elétron tunelante troca de paridade (troca de canal), a banda

como um todo também tem de trocar de paridade.

Motivados pela construção do canal par e do canal ímpar (Eq. 3.55) fazemos a seguinte substituição:

$$d_+ = \frac{d_1 + d_2}{\sqrt{2}} \quad \text{(Combinação Ligante)}, \tag{3.67}$$

$$d_- = \frac{d_1 - d_2}{\sqrt{2}} \quad \text{(Combinação Antiligante)}. \tag{3.68}$$

Usando as Eq. 3.67 e 3.68, a Eq. 3.62 fica

$$\begin{aligned} H_N = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \Bigg\{ & \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_n^{(z)} \left(f_{n,+}^\dagger f_{n+1,+} + f_{n,-}^\dagger f_{n+1,-} + h.c. \right) + \\ & + 2G'(A_+^2 \, f_{0,+}^\dagger f_{0,+} + A_-^2 \, f_{0,-}^\dagger f_{0,-})(d_+ d_+^\dagger + d_- d_-^\dagger) + \\ & + 2G' A_+ A_- (f_{0,+}^\dagger f_{0,-} + f_{0,-}^\dagger f_{0,+})(d_+ d_-^\dagger + d_- d_+^\dagger) - \frac{\Delta'}{2}(d_+^\dagger d_+ - d_-^\dagger d_-) \Bigg\} , \end{aligned} \tag{3.69}$$

que nada mais é do que o Hamiltoniano completo (Eq. 3.43) discretizado, truncado e escalado. Na próxima seção vamos explicar o processo de resolução iterativo do Hamiltoniano.

3.5 Diagonalização Iterativa

A estrutura da Eq. 3.69 permite que se obtenha a seguinte relação de recorrência:

$$H_{N+1} = \Lambda^{\frac{1}{2}} H_N + \xi_N (f_{N,+}^\dagger f_{N+1,+} + f_{N,-}^\dagger f_{N+1,-} + f_{N+1,+}^\dagger f_{N,+} + f_{N+1,-}^\dagger f_{N,-}) , \tag{3.70}$$

onde

$$\xi_N = \Lambda^{\frac{N}{2}} \epsilon_n^{(z)} . \tag{3.71}$$

Essa relação que leva H_N em H_{N+1} é conhecida como *Transformação do Grupo de Renormalização Numérico*, e é o ponto chave que permite diagonalizar Hamiltoniano não quadrático. Podemos expressá-la assim,

$$H_{N+1} = \tau[H_N]\,, \tag{3.72}$$

Para iniciar o processo iterativo diagonalizamos analiticamente H_0, dado por

$$\begin{aligned}\Lambda^{\frac{1}{2}} H_0 &= 2G'(A_+^2\ f_{0,+}^\dagger f_{0,+} + A_-^2\ f_{0,-}^\dagger f_{0,-})(d_+ d_+^\dagger + d_- d_-^\dagger) + \\ &\quad +2G' A_+ A_-(\ f_{0,+}^\dagger f_{0,-} +\ f_{0,-}^\dagger f_{0,+})(d_+ d_-^\dagger + d_- d_+^\dagger) - \frac{\Delta'}{2}(d_+^\dagger d_+ - d_-^\dagger d_-)\end{aligned} \tag{3.73}$$

Em nosso modelo, uma das impurezas está ionizada. Por isso, restringimos a nossa base para auto-funções em que a carga líquida das impurezas é igual a 1 ($QI = 1$). Encontrados os autovalores e os autovetores de H_0 e usando a Lei de Transformação (Eq. 3.70), construímos a base de estados para H_1. Dai diagonalizamos H_1. Usando seus autovalores e autovetores e a Eq. 3.70, construimos H_2; e assim por diante.

Os autovetores de H_0 não formam uma base conveniente para aplicarmos a relação de recorrência (Eq. 3.70). Utilizando então as conservações de carga e paridade, construimos uma nova base que permite o uso da Transformação acima, com relativa facilidade . Nesta nova base o m-ésimo vetor é indicado por

$$|\ NQ\ \ NP\ \ m\ \rangle_N \tag{3.74}$$

onde NQ é número de cargas na banda de condução, NP é a paridade do estado ($NP = 0$, *par e* $NP = 1$, *ímpar*).

Ao passarmos de H_N para H_{N+1}, cada autovetor do subespaço N gera quatro novos estados do subespaço $N+1$, de acordo com os seguintes processos:

tipo 1:

$$| \, NQ \;\; NP \;\; m \, \rangle_N \;\rightarrow \text{operador identidade} \rightarrow | \, NQ - 1 \;\; NP \;\; m \, \rangle_{N+1}$$

tipo 2:

$$| \, NQ \;\; NP \;\; m \, \rangle_N \;\rightarrow \text{operador } f^{\dagger}_{N+1,+} \rightarrow | \, NQ \;\; NP \;\; m \, \rangle_{N+1}$$

tipo 3:

$$| \, NQ \;\; NP \;\; m \, \rangle_N \;\rightarrow \text{operador } f^{\dagger}_{N+1,-} \rightarrow \left| \, NQ \;\; \overline{NP} \;\; m \, \right\rangle_{N+1}$$

tipo 4:

$$| \, NQ \;\; NP \;\; m \, \rangle_N \;\rightarrow \text{operador } f^{\dagger}_{N+1,+} f^{\dagger}_{N+1,-} \rightarrow \left| \, NQ + 1 \; \overline{NP} \;\; m \, \right\rangle_{N+1}$$

Os tipos identificam qual processo de criação foi utilizado. $\overline{NP}$ representa paridade trocada (se era par tornou-se ímpar e vice-versa). Com os novos estados constrói-se a matriz hamiltoniana do subespaço seguinte. A aplicação sucessiva desse processo permite que se conheça os autovalores de H_N para qualquer valor de N.

A quantidade de estados criados é muito grande. Por isso, determinamos um nível máximo de energia: os estados que tiverem energia superior a esse corte são desprezados. Os estados com altas energias pouco contribuem para as propriedades termodinâmicas em baixas temperaturas. Assim, definimos esse corte de tal forma que o cálculo do calor específico não seja prejudicado.

A cada N, os autovalores cobrem um certo intervalo de energia, que aumenta com N devido ao fator de escala 3.60. Dessa maneira, também devemos escalar qualquer grandeza que seja comparada com as excitações da banda. Em nosso caso, essa grandeza é a temperatura, e ela aparece no cálculo do fator de Boltzman $\exp(-\beta H)$. Como temos o espectro de H_N, e não de H, devemos calcular expressões do tipo

$$\exp(-\beta D \frac{1+\Lambda^{-1}}{2} \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} H_N) \; . \tag{3.75}$$

Para isso nós definimos uma variável adimensional ($\bar{\beta}$) e deixamos para escalar a temperatura,

$$\exp(-\beta D\frac{1+\Lambda^{-1}}{2}\Lambda^{-\frac{N-1}{2}}H_N) \equiv \exp(-\bar{\beta}H_N)\ , \tag{3.76}$$

onde $\bar{\beta}$ é um número que deve ser escolhido próximo à unidade, visto que os menores autovalores de H_N são da ordem da unidade. Dessa forma,

$$\frac{1}{k_B T_N}D\frac{1+\Lambda^{-1}}{2}\Lambda^{-\frac{N-1}{2}} = \bar{\beta} \rightarrow T_N = \frac{1}{k_B\bar{\beta}}D\frac{1+\Lambda^{-1}}{2}\Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \tag{3.77}$$

Com essa relação obtemos a temperatura correspondente à faixa de energia do intervalo considerado.

No próximo capítulo usaremos os autovalores obtidos da diagonalização do Hamiltoniano para encontrar e analisar o calor específico e a taxa efetiva de tunelamento do nosso modelo.

TECA E

Capítulo 4

Resultados

No capítulo 03 nós desenvolvemos o Hamiltoniano até a forma em que ele pode ser diagonalizado numericamente. Neste capítulo vamos apresentar os resultados do cálculo do *calor específico* e da *taxa efetiva de tunelamento* usando os autovalores encontrados na diagonalização. Na primeira seção mostramos como calculamos o calor específico das impureza, a relação entre o pico da curva com a taxa de tunelamento e a oscilação numérica em altas temperaturas. Na segunda seção fazemos uma análise dos termos do Hamiltoniano que representam a interação do buraco com os elétrons de condução. Na terceira seção analisamos a dependência da curva de calor específico em função dos parâmetros de entrada e a combinação de dois destes parâmetros em um único parâmetro.

4.1 Calor Específico

Como estamos lidando com um Hamiltoniano não quadrático, utilizamos a seguinte expressão para calcular o calor específico :

$$\frac{C}{k_B} = \bar{\beta}^2 \left\{ \left\langle \varepsilon_N^2 \right\rangle - \langle \varepsilon_N \rangle^2 \right\} , \tag{4.1}$$

onde $\bar{\beta}$ é um número (Eq. 3.76), $\langle \mathcal{O} \rangle$ indica o valor médio do operador $\mathcal{O}$ e ε_N são os autovalores de H_N, expressão obtida no capítulo 3 que reproduzimos aqui:

$$H_{N+1} = \Lambda^{\frac{1}{2}} H_N + \xi_N (f^{\dagger}_{N,+} f_{N+1,+} + f^{\dagger}_{N,-} f_{N+1,-} + f^{\dagger}_{N+1,+} f_{N,+} + f^{\dagger}_{N+1,+} f_{N,+}) \,, \tag{4.2}$$

$$\text{onde} \qquad \xi_N = \Lambda^{\frac{N}{2}} \epsilon_n^{(z)} \qquad \text{e} \tag{4.3}$$

$$H_0 = 2G'(A_+^2 \; f^{\dagger}_{0,+} f_{0,+} + A_-^2 \; f^{\dagger}_{0,-} f_{0,-})(d_+ d_+^{\dagger} + d_- d_-^{\dagger}) +$$

$$+2G' A_+ A_- (f^{\dagger}_{0,+} f_{0,-} + \; f^{\dagger}_{0,-} f_{0,+})(d_+ d_-^{\dagger} + d_- d_+^{\dagger}) - \frac{\Delta'}{2}(d_+^{\dagger} d_+ - d_-^{\dagger} d_-) \,. \tag{4.4}$$

Encontramos a contribuição das impurezas (C_{imp}) ao calor específico subtraindo do calor específico total (C) a contribuição da banda livre (C_{bc}),

$$C_{imp} = C - C_{bc} \tag{4.5}$$

Com a Eq.4.2 calculamos numericamente C. O cálculo de C_{bc} é trivial, já que o termo do Hamiltoniano que representa a banda de condução do metal é quadrático e também é calculado numericamente com uma versão simplificada do programa.

Como parâmetros de entrada de nosso programa temos Δ, G e S. O parâmetro Δ representa a taxa de tunelamento livre do buraco (sem a interação com a banda de condução do metal). O parâmetro G é a transformada Fourier da interação Coulombiana. Nós já o definimos no capítulo 2 (2.23),

$$V(\vec{k}' - \vec{k}) = G \quad \rightarrow \quad \text{constante} \,, \tag{4.6}$$

onde usamos o fato da blindagem eletrostática dos elétrons de condução limitar o seu alcance, permitindo que o considerássemos como sendo constante. *Quando $G = 0$ não temos espalhamento e isto significa que a taxa de tunelamento efetiva (Δ^*) é a igual a taxa de tunelamento livre (Δ).* Δ e G são expressos em termos de meia largura de banda (D).

No capítulo 2 nós definimos o parâmetro S como representando a seguinte grandeza 2.32,

$$S = \frac{\sin k_F R}{k_F R}\,, \tag{4.7}$$

onde $k_F \equiv k(\varepsilon_F)$ é o módulo do momentum do elétron de condução no nível de Fermi e R é a distância entre as duas impurezas. *Quando $S = 0$ temos as impurezas infinitamente afastadas uma da outra ($R \to \infty$), ou com $k_F R$ num dos zeros da função seno. Quando $S = 1$ temos as impurezas localizadas no mesmo sítio ($R \to 0$).*

4.1.1 Procedimento Intercalado

A Fig. 4.1 mostra um gráfico de calor específico utilizando o *GRN* padrão, ou seja, sem o uso do fator de discretização z ($z = 1.0$). Como se nota, em consequência da discretização, a curva apresenta uma oscilação indesejável, que desaparece no limite $\Lambda \to 1$, pois a amplitude dessa oscilação é proporcional a $\exp(-\pi^2/\ln\Lambda)$ [18]. Isso não é característica só do calor específico, mas aparece também em curvas de susceptibilidade magnética, embora menos pronunciada neste último caso.

Para contornar essa dificuldade, Wanda e Luiz [17], mostraram no caso do modelo de nível ressonante, que a média sobre valores de z suaviza a curva da susceptibilidade. Sandra [18], mostrou que mesmo para o modelo de Anderson, que inclui correlação eletrônica, esse procedimento suaviza não só as curvas de susceptibilidade, mas também as de calor específico.

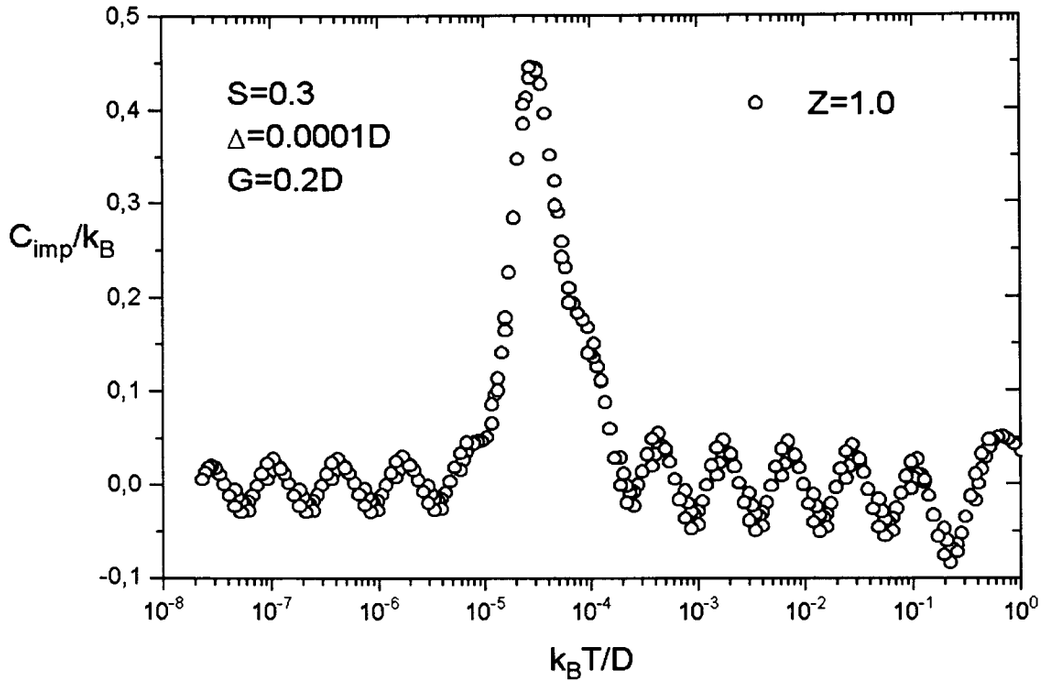

Figura 4.1: Curva de calor específico com parâmetros de discretização $\Lambda = 4$ e $z = 1.0$. Os parâmetros de entrada estão indicados na figura. Além do pico do calor específico temos oscilações menores provocadas pela discretização da banda de condução.

Assim, podemos suavizar o calor específico da seguinte maneira:

$$C_{imp}(T) = \int_0^1 C_{imp}(T, z)dz \tag{4.8}$$

Na prática, o que se verifica é que apenas dois valores de z que diferem por 0.5 são suficientes para suavizar qualquer curva obtida com $\Lambda = 4$. Isso é compreensível se examinarmos a Fig.4.2, onde se vê que o uso de $z = 0.5$ e $z = 1.0$, por exemplo, com $\Lambda = 4$, corresponde a usar $\Lambda = 2$ com $z = 1.0$.

Portanto, fixando $\Lambda = 4$, podemos suavizar curvas de calor específico, simplesmente

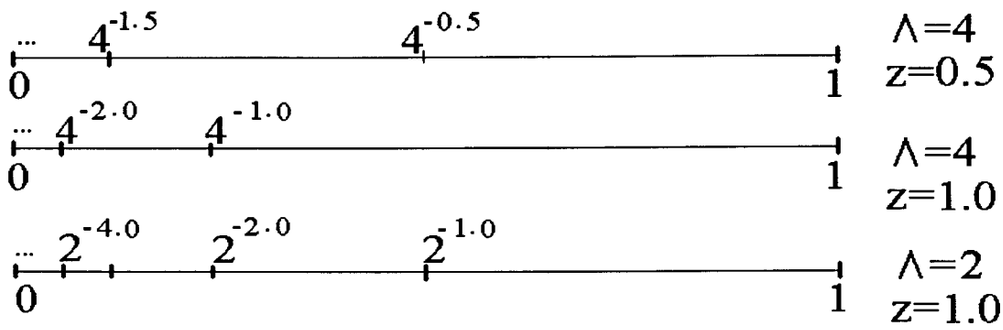

Figura 4.2: Discretização logarítmica da banda de condução (metade positiva) em três casos distintos. Em a usamos $\Lambda = 4$ e $z = 0.5$. Em b usamos $\Lambda = 4$ e $z = 1.0$. Em c usamos $\Lambda = 2.0$ e $z = 1.0$. Podemos notar que se somarmos a e b obtemos a discretização c.

fazendo

$$C_{imp}(T) = \frac{C_{imp}(T, z = 0.5) + C_{imp}(T, z = 1.0)}{2} \tag{4.9}$$

Esse processo é denominado de *procedimento intercalado.* Na Fig.4.3 apresentamos duas curvas com os mesmos parâmetros G, S e Δ. Uma delas tem $z = 1.0$ e a segunda é o resultado do procedimento intercalado.

Podemos também notar na Fig.4.3 que continua existindo uma grande oscilação (que vamos denominar de anomalia) em temperaturas muito altas. Como estamos interessados em baixas temperaturas, não nos preocupamos com ela. No final deste capítulo fazemos algumas considerações sobre essa anomalia.

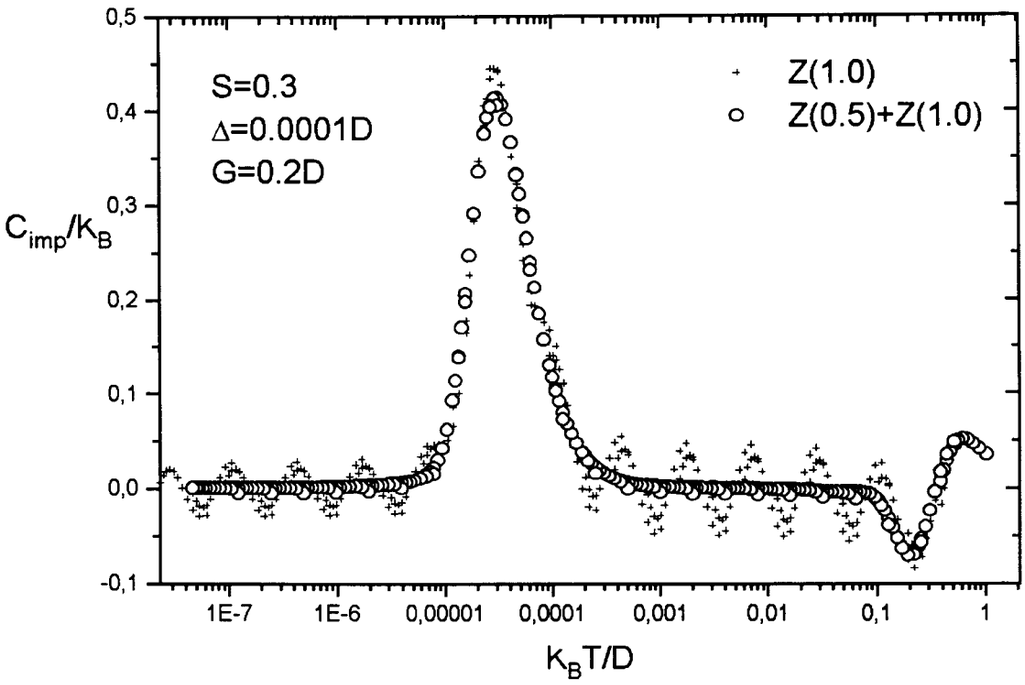

Figura 4.3: Duas curvas de calor específico, sendo que na segunda foi feito o processo de intercalamento. As oscilações númericas mencionadas anteriormente desaparecem.

4.1.2 Posição do pico do calor específico

Quando não há interação do buraco tunelante com a banda de condução ($G = 0$), C_{imp} é devido exclusivamente aos dois níveis acoplados das impurezas. O calor específico de um sistema de dois níveis acoplados pelo elemento de matriz $\Delta/2$ é

$$\frac{C}{k_B} = (\beta\Delta)^2 \frac{e^{-\beta\Delta}}{(1+e^{-\beta\Delta})^2} \,. \tag{4.10}$$

Na Fig.4.4, a linha cheia é a função F(T) que representa a expressão 4.10 e os pontos sobre essa linha são os resultados que obtivemos para $G = 0$ (com valores de S e Δ indicados).

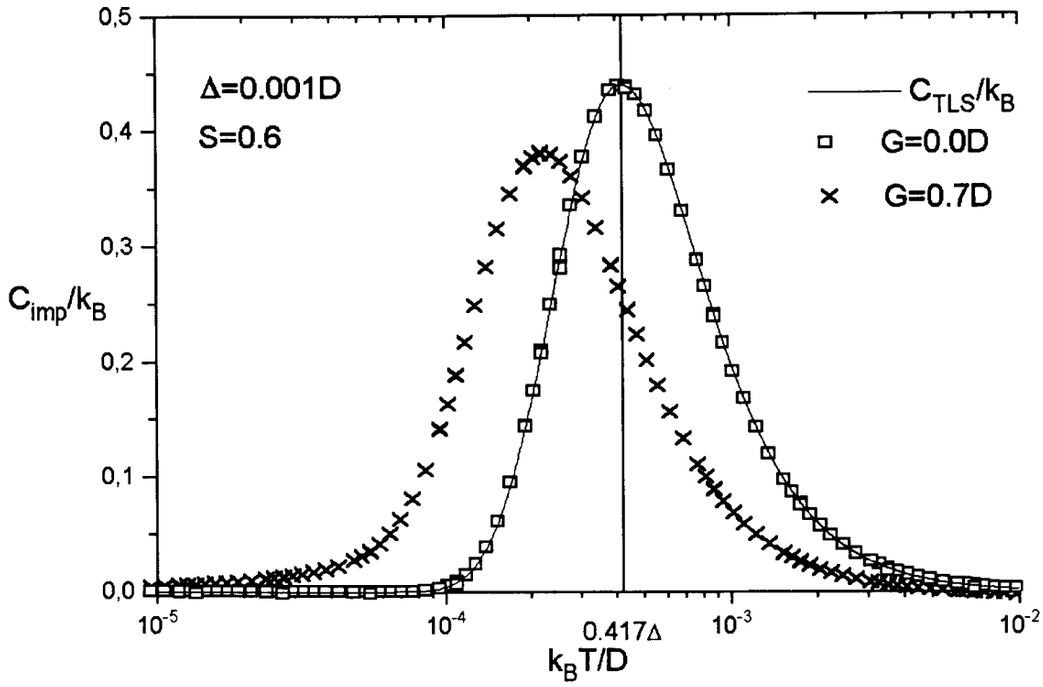

Figura 4.4: Duas curvas de Calor Específico com valores diferentes de G: quando $G = 0$ a taxa de tunelamento não é alterada e seu pico encontra-se no valor de energia 0.417Δ. Quando G é diferente de 0, o pico ocorre em outro valor de energia. Dizemos que a taxa de tunelamento é renormalizada para um valor Δ^* tal que a nova posição do pico ocorre em $0.417\Delta^*$. Observe que não há oscilação na curva.

A expressão 4.10 pode ser entendida da seguinte maneira: para temperaturas menores do que a separação Δ, apenas o estado fundamental (ligante) é acessível. À medida que a temperatura sobe, gradativamente o estado excitado (anti-ligante) passa a ser também acessível. Para temperaturas maiores que Δ, como nenhum outro estado é acessível, o calor específico decresce, se anulando.

Usando a expressão 4.10 determinanos a temperatura (T_P) onde ocorre o pico da curva de calor específico,

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

$$k_B T_P \cong 0.416778\Delta \ . \tag{4.11}$$

Na Fig.4.4 indicamos esse valor.

A Fig.4.4 também mostra a curva resultante para o caso em que $G \neq 0$ (parâmetros S e Δ os mesmos de $G = 0$). Quando se considera a interação Coulombiana entre o buraco e a banda, a curva de calor específico altera visivelmente. O pico abaixa sua intensidade e se desloca para temperaturas mais baixas, indicando assim uma renormalização na taxa de tunelamento. Essa alteração na taxa de tunelamento pode ser explicada pelo fato de que agora, ao tunelar de um sítio para outro, o buraco tem de arrastar os elétrons de condução junto. Aproveitando a forma da expressão 4.11, podemos encontrar a taxa efetiva de tunelamento (Δ^*) da seguinte forma,

$$k_B T_P^* \cong 0.416778\Delta^* \ . \tag{4.12}$$

onde T_P^* indica a nova posição do pico (que pode ser determinada pela curva [10]).

Na próxima seção discutimos a curva de calor específico para diversos valores dos parâmetros G, Δ e S.

4.2 C_{imp} em função de Δ, G e S

Primeiramente vamos analisar a influência do parâmetro Δ. Na Fig.4.5 plotamos duas curvas de calor específico mantendo G e S constantes e variando Δ. Podemos observar

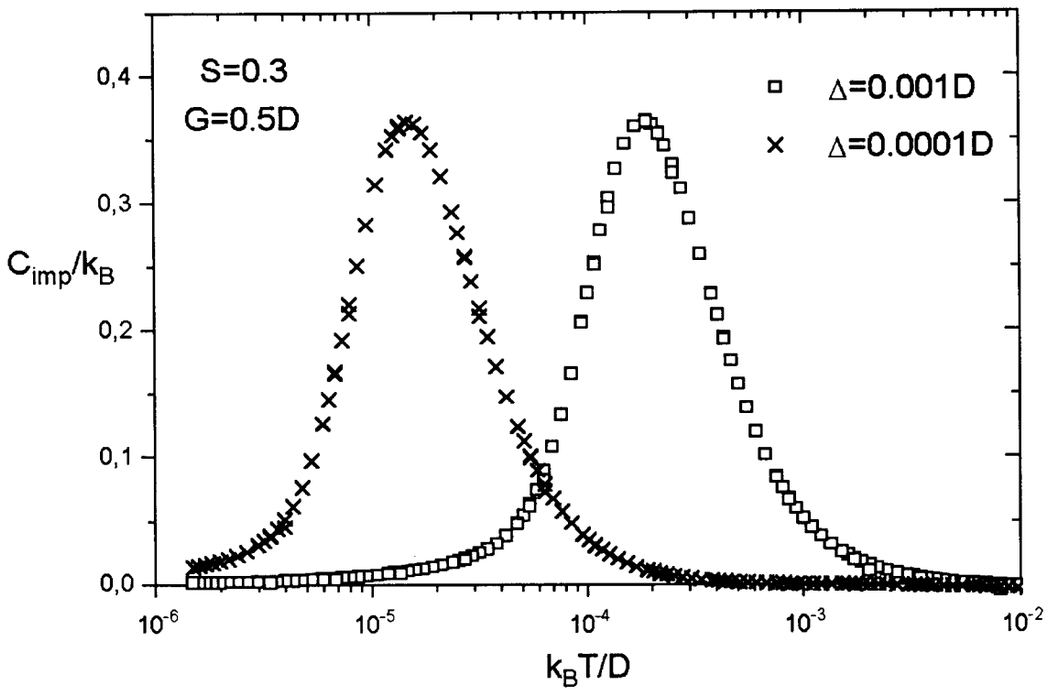

Figura 4.5: Curvas de Calor Específico com valores de G e S iguais mas valores de Δ diferentes. Podemos observar que as curvas são idênticas, apenas transladadas uma da outra.

que a alteração de Δ resulta apenas na translação horizontal da curva (o que está de acordo com o Hamiltoniano de nosso modelo), sendo que quanto menor o seu valor mais a curva se desloca para esquerda. Isto é facilmente compreensível porque quanto menor a diferença de energia entre os orbitais ligante e anti-ligante, menor o valor da temperatura a partir do qual o sistema tem os dois níveis acessíveis.

Os parâmetros G e S fazem mais do que transladar a curva de calor específico. Na Fig.4.6 fixamos Δ em $0.001D$, S em 0.5 e variamos o valor de G. Na Fig.4.7 também fixamos Δ em 0.001, mas agora fixamos G em 0.5 e variamos o valor de S.

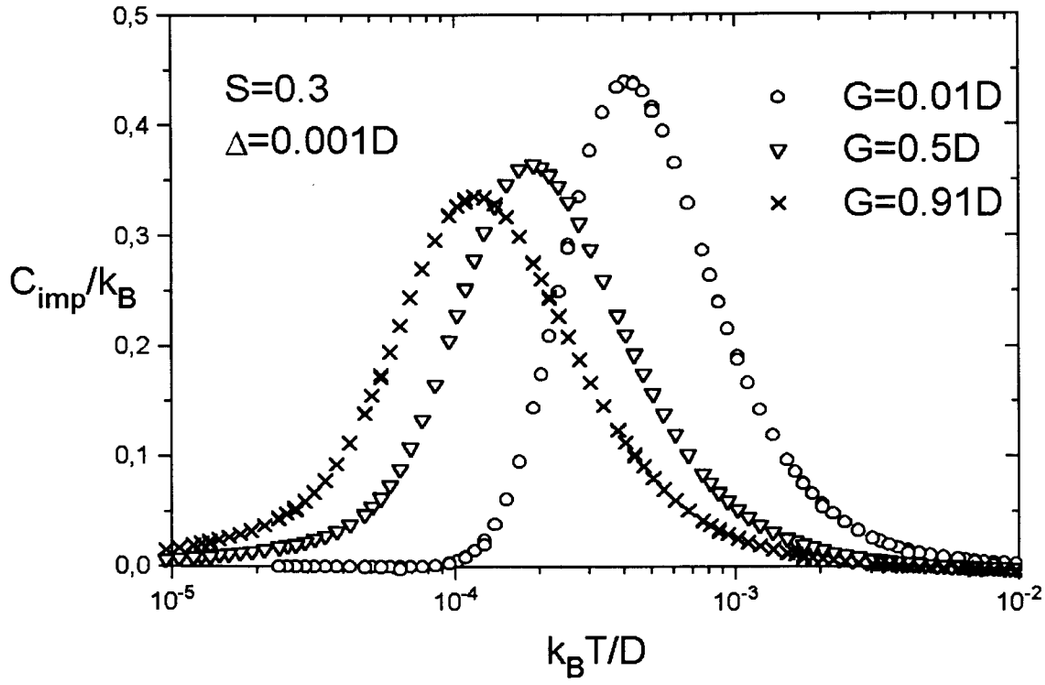

Figura 4.6: Curvas de calor específico mantendo S e Δ constantes e variando G. Quanto maior G, maior a renormalização da taxa de tunelamento.

Observamos na Fig.4.6 que quanto maior o valor de G, *maior* é a renormalização da taxa de tunelamento (diminuição do pico e deslocamento para a esquerda). Já na Fig.4.7, quanto maior o valor de S, *menor* é a renormalização de Δ. Em ambos os casos, a explicação é que a taxa efetiva de tunelamento é proporcional à projeção do estado da banda de condução espalhada pelo buraco na impureza 1, no estado da banda de condução espalhada pelo buraco na impureza 2. Essa projeção é menor quanto maior for a interação entre o buraco e a banda de condução (maior valor de G) ou quanto maior for a separação entre as impurezas (menor

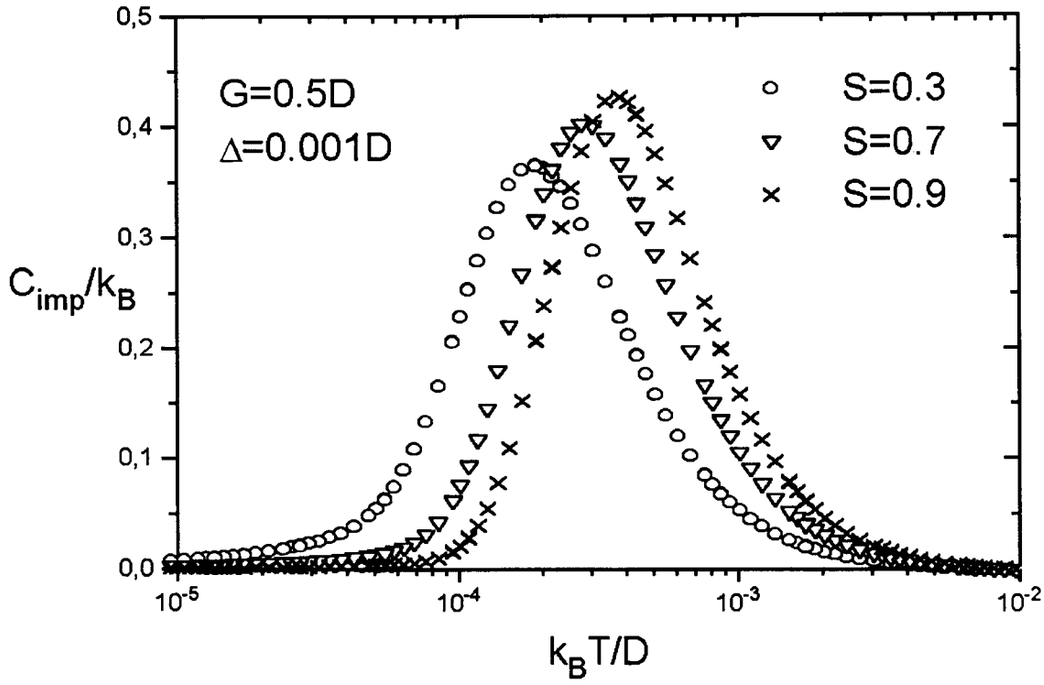

Figura 4.7: Curvas de calor específico mantendo Δ e G constantes e variando S. Quanto maior o valor de S, menor a renormalização. Compare com o efeito de G mostrado na figura anterior.

valor de S).

Uma situação interessante é quando $S = 1$. Nesse caso, as duas impurezas estão no mesmo sítio, o que equivale a uma única impureza com dois níveis eletrônicos d_1 e d_2. A curva de calor específico é exatamente aquela de um sistema sem a interação com a banda (C_{TLS} na Fig.4.4). Isso é fácil de compreender se observamos o Hamiltoniano de Kondo de tunelamento 4.4. Quando $S = 1$, o termo que contêm a troca de paridade entre os operadores se anula, pois $A_- = \sqrt{1-S}/2$. Esse termo é o responsável pelo tunelamento com troca de paridade do buraco com a banda (termo N_{kk}). Como veremos na seção 4.4, este termo é o que causa a renormalização e quando ele se anula, ela deixa de ocorrer. Na Fig.4.8 plotamos duas curvas com o mesmo Δ, uma delas com $S = 1.0$ e $G \neq 0$ e a outra com $S \neq 1$ mas $G = 0$ (sem

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

interação entre buraco e banda e por isso sem renormalização). Observamos que as duas curvas coincidem.

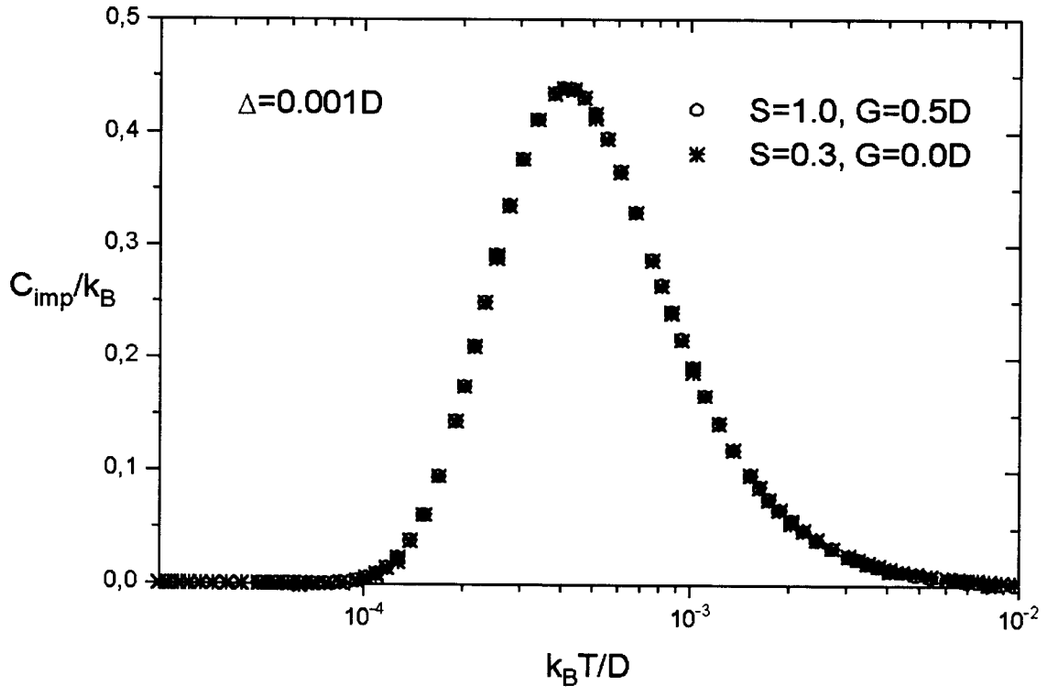

Figura 4.8: Duas curvas de calor específico com $\Delta = 0.001D$. Sabemos que quando $G = 0$ não há renormalização. Como as duas curvas coincidem, confirma-se que também quando $S = 1.0$, não importando o valor de G, não há renormalização.

4.3 Combinação dos Parâmetros G e S

As Figs.4.6 e 4.7 sugerem a possibilidade de existir uma expressão que combine G e S em um novo parâmetro, visto que o efeito de aumentar G é oposto ao de aumentar S. Esse novo parametro, α , juntamente com Δ, definiria completamente a curva de calor específico. A dependência de Δ^* com G e S, dada pela Eq. 2.31, traz a resposta. A expressão

$$\alpha = \sqrt{1 - S^2} \sin \delta \tag{4.13}$$

define o α que estamos procurando, sendo δ a defasagem na função de onda dos elétrons de condução no nível de Fermi provocado pelo potencial Coulombiano do buraco ($\delta = \arctan |\pi G/D|$). Assim, sistemas diferentes, mas com os mesmos valores de α e Δ possuem curvas de calor específico idênticas. A Fig.4.9 mostra dois grupos de curvas, um com $\alpha = 0.27$ e outro com $\alpha = 0.83$. Para cada grupo existem três conjuntos diferentes de G e S. A temperatura foi escalada por Δ^*, que foi calculado numericamente pelo uso da Eq. 2.29. A Fig.4.9 representa o resultado principal deste trabalho.

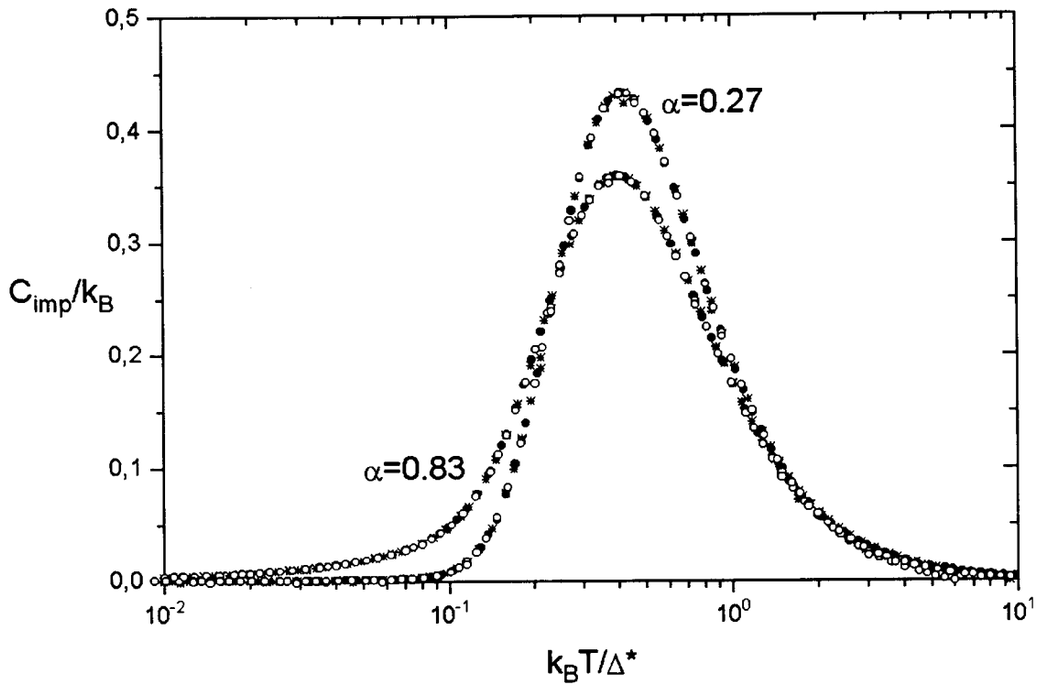

Figura 4.9: 6 curvas de calor específico com parâmetros G, Δ e S diferentes: 3 com $\alpha = 0.27$ e 3 com $\alpha = 0.83$. Quando a temperatura é escalada por Δ^*, os picos ocorrem na mesma posição ($K_BT = 0.4168\Delta^*$). É notável como as curvas que têm o mesmo α coincidem.

	$\alpha = 0.27$				$\alpha = 0.83$			
	S	Δ/D	G/D	Δ^*/Δ	S	Δ/D	G/D	Δ^*/Δ
•	0.1	10^{-4}	0.091	0.925	0.2	10^{-4}	0.497	0.345
*	0.3	10^{-2}	0.096	0.960	0.3	10^{-3}	0.549	0.435
○	0.8	10^{-3}	0.160	0.942	0.4	10^{-2}	0.659	0.545

(4.14)

4.4 Papel dos termos de interação

Como explicamos no capítulo 2, Kondo desconsidera o termo $L_{kk'}$ para o cálculo da taxa efetiva de tunelamento. O objetivo dessa seção é analisar o papel dos termos $L_{kk'}$ e $N_{kk'}$ no processo de renormalização da taxa de tunelamento. O Hamiltoniano de Kondo de tunelamento 2.1 é

$$H = H_s + H_I \ , \tag{4.15}$$

onde H_s representa a banda de condução e o tunelamento sem interação com a banda ,

$$H_s = \sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} \, a^\dagger_{\vec{k}} \, a_{\vec{k}} \ - \frac{\Delta}{2}(d^\dagger_+ d_+ - d^\dagger_- d_-) \tag{4.16}$$

e H_I representa o tunelamento do buraco com interação,

$$H_I = \sum_{\vec{k}\,\vec{k}'} \left[L_{\vec{k}'\,\vec{k}} + M_{\vec{k}'\vec{k}}(d^\dagger_+ \, d_+ - \ d^\dagger_- \, d_-) + N_{\vec{k}'\,\vec{k}}(d^\dagger_+ \, d_- + \ d^\dagger_- \, d_+) \right] \, a^\dagger_{\vec{k}'} \, a_{\vec{k}} \, . \tag{4.17}$$

Como já explicamos no capítulo 2, o termo $M_{\vec{k}'\,\vec{k}}$ é muito pequeno e pode ser desprezado. Os termos $L_{kk'}$ e $N_{kk'}$ estão definidos no capítulo 2 (Eqs. 2.17,2.18). Utilizando expressões do cap. 3, podemos reescrevê-los da seguinte forma:

$$L_{kk'} = 2G' \left(A^2_+ \, f^+_{0+} f_{0+} + A^2_- \, f^+_{0-} f_{0-} \right) \left(d^\dagger_+ d_+ + d^\dagger_- d_- \right) \ , \tag{4.18}$$

$$N_{kk'} = 2G' A_+ A_- \left(f^+_{0+} f_{0-} + f^+_{0-} f_{0+} \right) \left(d^\dagger_+ d_- + d^\dagger_- d_+ \right) \ . \tag{4.19}$$

No capítulo 3 nós desenvolvemos esse Hamiltoniano até chegarmos nas expressões 4.2 e 4.4, sendo essas as expressões que foram diagonalizadas. Para saber se $L_{kk'}$ realmente não altera a taxa de tunelamento, construímos H_{0L}, que é o Hamiltoniano H_0 (Eq. 4.4) apenas com este termo mais a banda de condução:

$$H_{0L} = 2G'(A_+^2 f_{0,+}^\dagger f_{0,+} + A_-^2 f_{0,-}^\dagger f_{0,-})(d_+ d_+^\dagger + d_- d_-^\dagger) - \frac{\Delta'}{2}(d_+^\dagger d_+ - d_-^\dagger d_-) \,. \tag{4.20}$$

Diagonalizamos o Hamiltoniano 4.2 usando H_{0L} para 3 situações diferentes.

- No primeiro caso utilizamos o Hamiltoniano completo (H_0) e os seguintes parâmetros de entrada: $S = 0.1$, $\Delta \ = 0.0001D$ e $G = 0.2D$.

- No segundo caso utilizamos novamente o Hamiltoniano completo (H_0), mas agora fizemos $G = 0$. Assim, temos o caso em que não há interação entre o buraco e os elétrons de condução.

- No terceiro caso utilizamos H_{0L} com os mesmos parâmetros de entrada do primeiro caso: $S = 0.1$, $\Delta \ = 0.0001$ e $G = 0.2$.

Na Fig.4.10 plotamos a curva de calor específico obtida em cada caso.

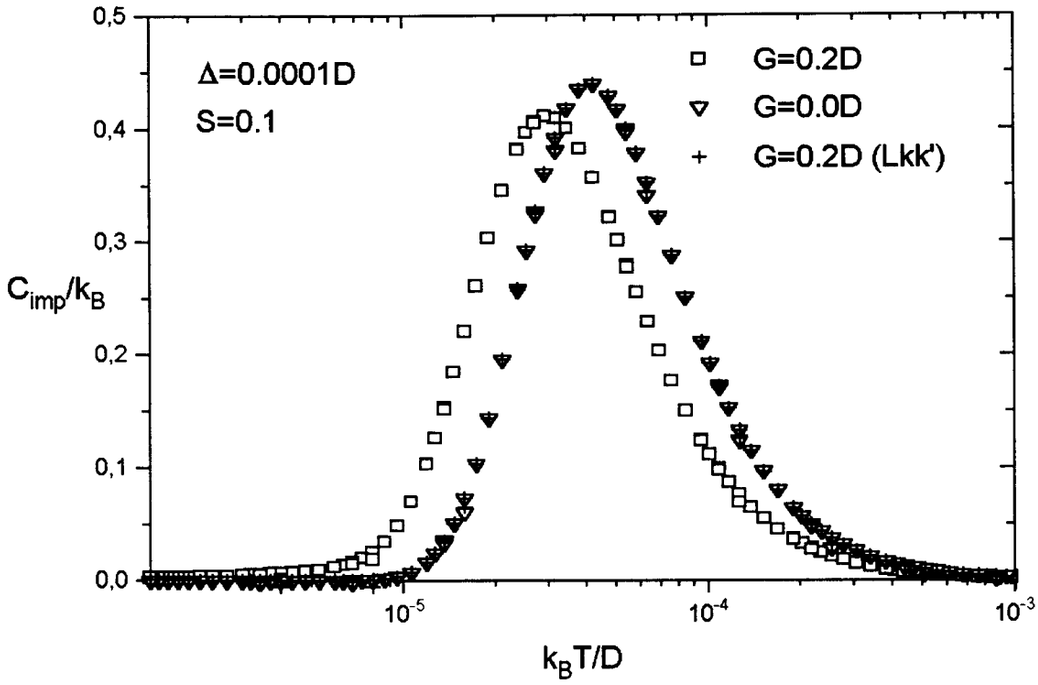

Figura 4.10: Curvas de Calor Específico para 3 situações diferentes: no primeiro caso usamos o hamiltoniano completo (H_0) para $S = 0.1$, $\Delta = 0.0001$ e $G = 0.2$. No segundo caso novamente usamos H_0 mas agora com $G = 0$. No terceiro caso usamos H_{0L} com $G = 0.2$. O primeiro e o segundo casos são equivalentes.

A Fig.4.10 mostra claramente que o termo $L_{kk'}$ sozinho não renormaliza a taxa de tunelamento, pois a sua curva coincide ao caso em que não há renormalização ($G = 0$).

Resta-nos saber qual o papel de $N_{kk'}$. Poderíamos pensar: "como $L_{kk'}$ não renormaliza a taxa de tunelamento, é evidente que $N_{kk'}$ é o único termo importante ". Para verificarmos isso, procedemos de maneira análoga: construímos H_{0N} (Hamiltoniano H_0 apenas com $N_{kk'}$ mais a banda de condução),

$$H_{0N} = 2G' A_+ A_- (f^\dagger_{0,+} f_{0,-} + f^\dagger_{0,-} f_{0,+})(d_+ d^\dagger_- + d_- d^\dagger_+) - \frac{\Delta'}{2}(d^\dagger_+ d_+ - d^\dagger_- d_-)\,, \tag{4.21}$$

e resolvemos 4.2 para 2 situações diferentes;

- No primeiro caso utilizamos o Hamiltoniano completo (H_0) e os seguintes parâmetros de entrada: $S = 0.1$, $\Delta = 0.0001$ e $G = 0.5$.

- No segundo caso utilizamos H_{0N} com os mesmos parâmetros de entrada do primeiro caso: $S = 0.1$, $\Delta = 0.0001$ e $G = 0.5$.

Na Fig.4.11 temos a curva de calor específico para cada caso.

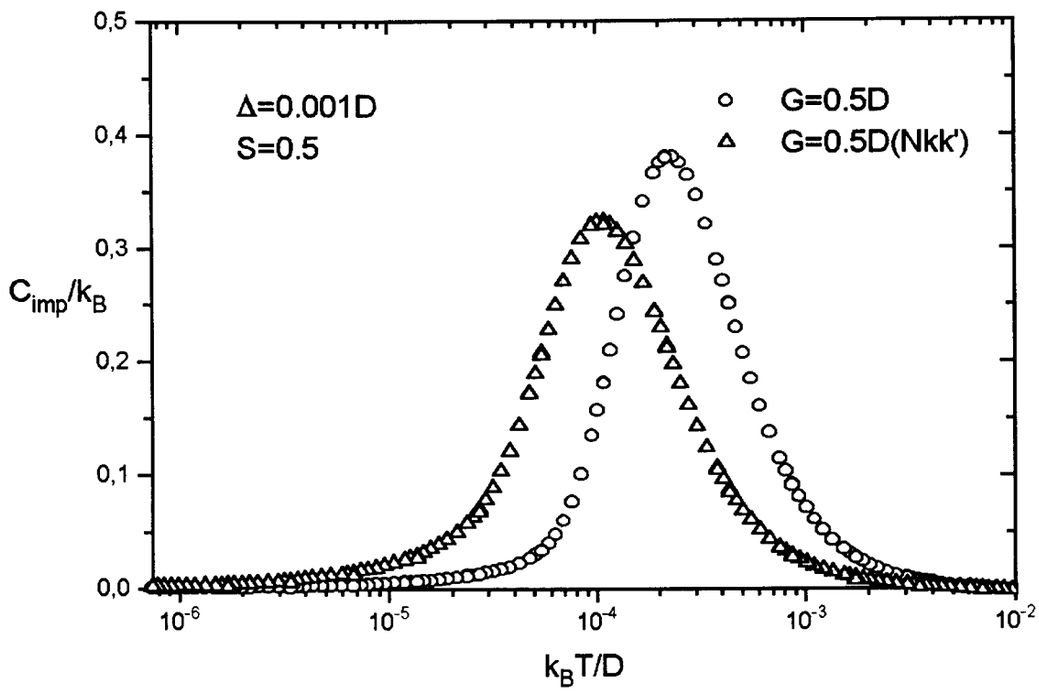

Figura 4.11: Curvas de calor específico para 2 situações diferentes: no primeiro caso usamos H_0 com $S = 0.1$, $\Delta = 0.0001D$ e $G = 0.5D$. No segundo caso usamos H_{0N} com $G = 0.5D$. Observamos que as curvas são diferentes.

Observamos que escolhemos um valor alto de G para realçar a diferença entre as duas curvas. Como se esperava, o termo $N_{kk'}$ realmente é o responsável pela renormalização da

taxa de tunelamento. Mas ele sozinho não fornece o valor correto da taxa efetiva (valor obtido quando usamos o Hamiltoniano completo H_0). Sem dúvida, o termo $N_{kk'}$ é o mais importante do processo de renormalização, e para valores pequenos de G, a influência do termo $L_{kk'}$ é desprezível (confirmando o cálculo perturbativo de Kondo).

4.4.1 Anomalia em Temperaturas Muito Altas

Queremos salientar neste momento uma oscilação espúria em temperaturas muito altas, resultante da discretização logarítmica. Na Fig.4.12 mostramos uma curva de calor específico com essa oscilação.

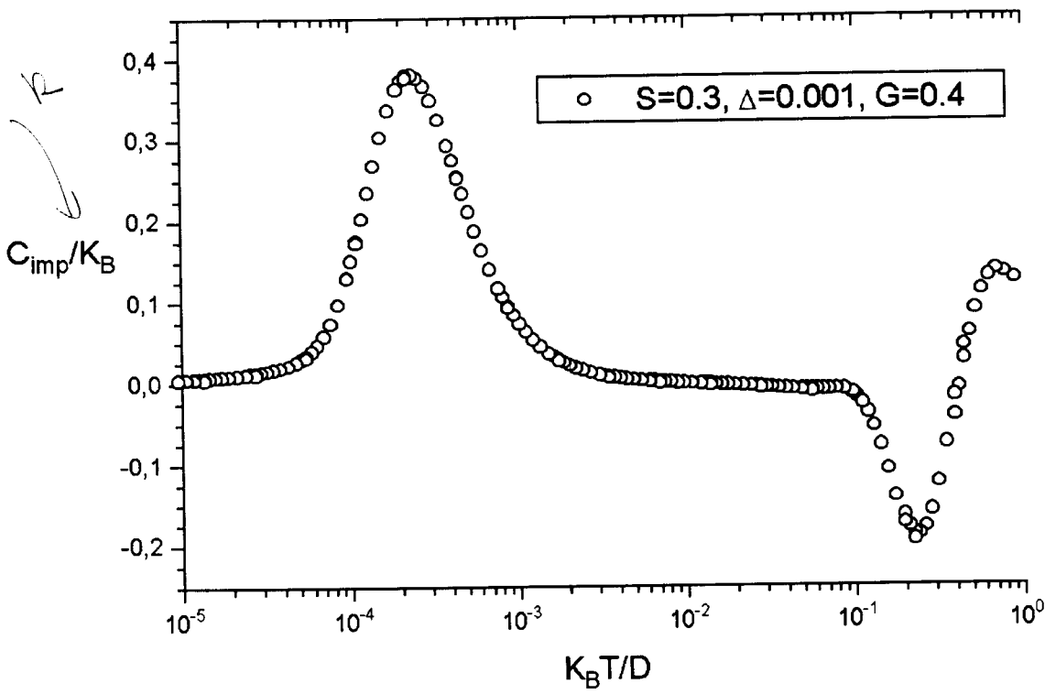

Figura 4.12: Curva de Calor Específico para parâmetros arbritários. A oscilação espúria aparece acima de 0.1D. Isso equivale a temperaturas superiores a 5000k.

Essa oscilação aparece sempre no topo da banda, justamente onde o número de inter-

valos é menor. Ela sofre influencia apenas do parâmetro G, desaparecendo quando $G = 0$. Essa oscilação não é característica do nosso sistema em particular, aparecendo também em outros modelos (por exemplo, modelo de Anderson com nível ressonante). Isso indica que essa anomalia é intrínsica ao GRN : sempre que discretizarmos logaritmicamente a banda de condução enfatizando as baixas temperaturas, teremos esse efeito colateral do método numérico em temperaturas muito altas. Como ela em nada afeta a região de baixa temperaturas, que é a região que estamos interessados, não nos aprofundamos na sua análise.

4.4.2 Relação entre Δ^* e Δ para mesmo α.

Na Fig.4.13 temos quatro conjuntos de pontos relacionando as razões (Δ^*/Δ) e (Δ/D). Cada conjunto de pontos tem determinado parâmetro α.

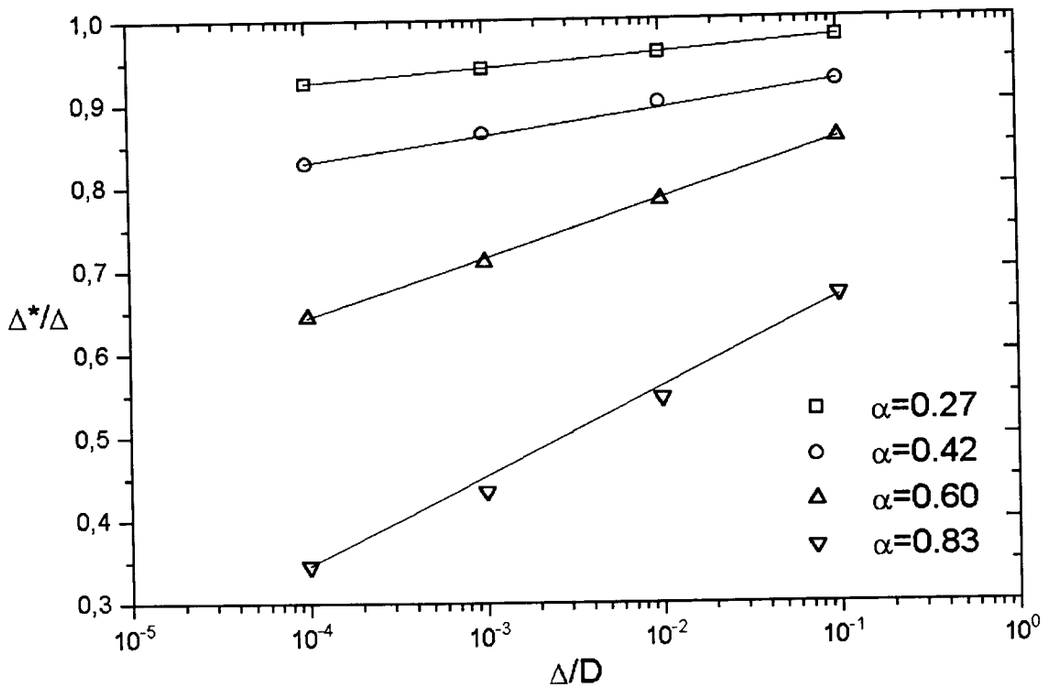

Figura 4.13: Relação de Δ^* e Δ para quatro conjuntos de pontos que possuem valores distintos de α (retas para orientação visual).

Como podemos ver, cada conjunto de pontos parece obedecer a uma relação bem definida. No final do cap. 02 apresentamos a expressão aproximada (Eq.2.30) proposta por Kondo [8] para relacionar Δ^* e Δ. Yamada *et al* [5] encontraram o valor exato do expoente dessa expressão e, por último, Valter e Luís [10], baseados nestes trabalhos, proporam a seguinte relação:

$$\frac{\Delta^*}{\Delta} = Q_o \left(\frac{\Delta}{D}\right)^{\frac{K}{1-K}} \tag{4.22}$$

onde

IFSC — SER... TECA E

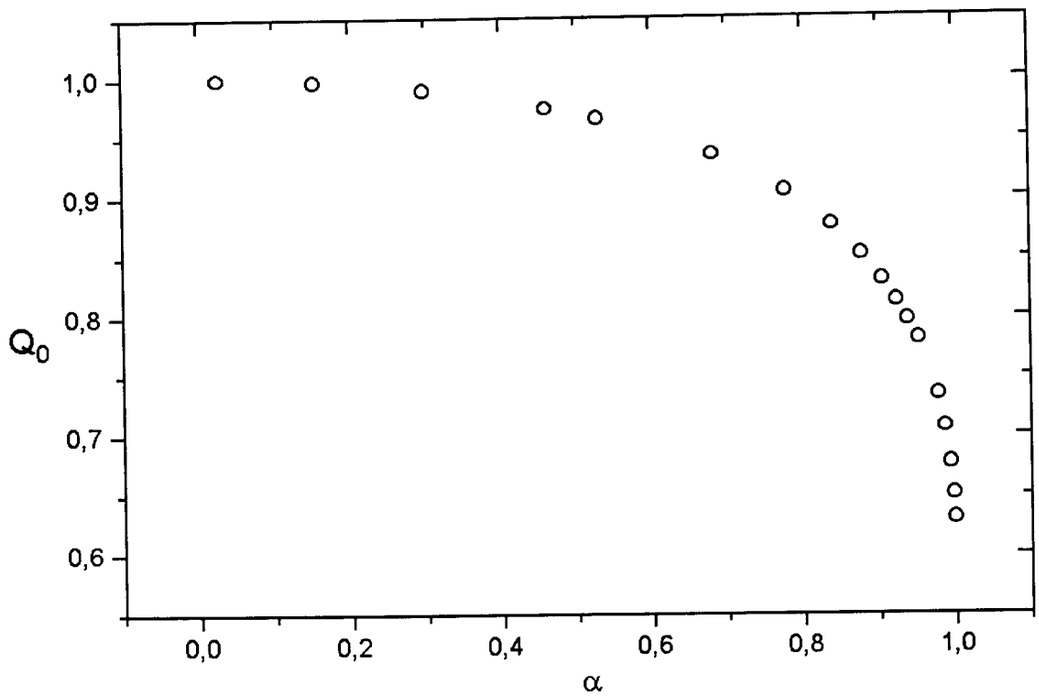

Figura 4.14: Pré-fator Q_o em função do parâmetro α. Para valores de α até 0.6 (o que corresponde a valores pequenos de G) Q_o é próximo de 1.

$$\pi\sqrt{K} = \arcsin\left(\sqrt{1-S^2}\sin\delta\right), \qquad \delta = \arctan\left(G/D\right) \tag{4.23}$$

O pré-fator Q_o pode ser determinado numericamente, como fazem Valter e Luís [10]. Na Fig.4.14 mostramos Q_o em função de α.

Para valores pequenos de α, o que corresponde a valores pequenos de G, o pré-fator Q_0 é bastante próximo de 1. Isto está de acordo com os resultados obtidos por Kondo e Yamada.

No próximo capítulo discutimos alguns resultados apresentados e propomos algumas questões para projetos futuros.

Capítulo 5

Conclusões e sugestões

Neste trabalho nós estudamos o calor específico de um sistema formado por duas impurezas adsorvidas num metal e que contém um buraco (elétron) tunelando entre elas. A presença dos elétrons da banda de condução do metal altera a taxa de tunelamento do buraco através da interação eletrostática. O estudo do calor específico permitiu que analisássemos a influência dos seguintes fatores na renormalização da taxa de tunelamento: distância entre as impurezas (S), acoplamento entre elas ($\Delta/2$) e a interação eletrostática entre o buraco e os elétrons de condução (G). Modelamos esse sistema por dois níveis acoplados pelo elemento de matriz $\Delta/2$ e que sofrem interação Coulombiana com a banda de condução. Utilizamos o Hamiltoniano de Kondo de tunelamento para representar esse modelo e usamos o Grupo de Renormalização Numérico (*GRN*) para diagonalizá-lo.

O *GRN* é um método numérico que foi utilizado inicialmente para tratar problemas de uma impureza. Seguindo os passos de trabalhos precedentes, fizemos as devidas adaptações para o caso de duas impurezas. O *GRN* mostrou-se eficiente na tarefa de diagonalizar o Hamiltoniano de Kondo de tunelamento. Com o processo de intercalamento do parâmetro z eliminamos as oscilações originárias do método. Entretanto, observamos em nosso trabalho uma anomalia na curva de calor específico em temperaturas muito altas (acima de $0.01D$). Essa anomalia também resulta do método numérico e é compreensível o seu aparecimento uma vez que construímos

a diagonalização logarítmica de forma a enfatizar justamente a região de temperaturas baixas (região próxima do nível de Fermi), logo, é intrínsica do *GRN*. Por exemplo, ela aparece também quando usamos esse método numérico para diagonalizar o Hamiltoniano de nível ressonante. Como a anomalia não influencia em nada na região de temperatura em que trabalhamos, não nos aprofundamos mais na sua compreensão.

O Hamiltoniano de Kondo de tunelamento contém três termos ($M_{kk'}, L_{kk'}$ e $N_{kk'}$) que representam o tunelamento com interação Coulombiana entre o buraco e os elétrons da banda de condução. O termo $M_{kk'}$ representa a integral de *overlap* entre estados localizados nas impurezas e, por isso, tem um valor pequeno. O termo $L_{kk'}$ representa o tunelamento sem troca de paridade da função de onda do buraco e da banda. O termo $N_{kk'}$ representa o tunelamento com a troca de paridade. Para o cálculo da taxa efetiva de tunelamento, Kondo utilizou Teoria de Perturbação e considerou apenas o termo $N_{kk'}$, desconsiderando o termo $M_{kk'}$ (por ser pequeno) e o termo $L_{kk'}$ (dizendo apenas que 'não era importante'). Usando o *GRN* foi possível analisar a influência dos termos $N_{kk'}$ e $L_{kk'}$ na taxa efetiva de tunelamento. Diagonalizamos o Hamiltoniano de Kondo e calculamos a curva de calor específico em três casos: considerando $L_{kk'}$ e $N_{kk'}$ (Hamiltoniano completo), considerando apenas $L_{kk'}$ e considerando apenas $N_{kk'}$. Quando usamos apenas o termo $L_{kk'}$ não ocorre nenhum tipo de renormalização na taxa de tunelamento. Quando usamos apenas o termo $N_{kk'}$ ocorre a renormalização, mas o valor obtido é diferente daquele que obtemos quando usamos o Hamiltoniano completo. Esses resultados demonstram que a troca de paridade é essencial para haver renormalização da taxa de tunelamento e portanto o termo $N_{kk'}$ é o mais importante. O termo $L_{kk'}$ apenas corrige quantitativamente o valor da taxa. Com o *GRN*, não há dificuldade nenhuma em trabalhar com o Hamiltoniano completo.

Calculamos curvas de calor específico para sistemas com várias combinações dos parâmetros G, Δ e S. Observamos que a variação do parâmetro Δ apenas translada a curva na horizontal.

O parâmetro G e S além de transladar a curva alteram o valor do pico da curva de calor específico: quanto maior o valor de G maior é a renormalização da taxa de tunelamento e quanto maior o valor de S, menor é essa renormalização. Isso nos induziu a encontrar uma expressão que combinasse estes dois parâmetros, de forma que sistemas com o mesmo Δ mas com combinações diferentes de G e S apresentassem a mesma curva de calor específico. Encontramos essa expressão e denominamos esse novo parâmetro de α. Assim, a curva de calor específico de um sistema fica bem definida com Δ e α. Fisicamente, podemos concluir que sistemas com impurezas distantes mas pequena interação com a banda de condução podem ter a mesma taxa de tunelamento que sistemas com impurezas próximas, mas com grande interação com a banda, desde que eles tenham o mesmo acoplamento Δ e o mesmo parâmetro α.

Deste trabalho surgem algumas questões que podem ser estudadas futuramente. Em primeiro lugar pode-se aprofundar na compreensão da anomalia devido ao método numérico e verificar se existe uma maneira de eliminá-la. Também é interessante considerar o termo $M_{kk'}$ no Hamiltoniano e verificar como a presença dele influencia a taxa de tunelamento. Além disso pode-se colocar outros termos que enriquecem o fenômeno, como hibridização (troca de elétron entre as impurezas e a banda) ou tunelamento assistido por elétron da banda.

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

Bibliografia

[1] N. La Sc. Junior. *Tunelamento Ressonante atraves de impurezas doadoras em estruturas de dupla barreira.* PhD thesis, IFSC/DFCM, 1994.

[2] G. Zarand; A. Zawadowski. *Role of excited states in the low-temperature dynamics of tunneling centers in metals: the orbital kondo effect.* Physical Review B, 50, N. 2, P. 932, 1994.

[3] G. Ye; J. Wang; Y. Xu; Z. Jiao; Q. Zhang. *Evidence of anomalous hopping and tunneling effects on the conductivity of a fractal pt-film system.* Physical Review B, 50, N. 18, P. 13163, 1994.

[4] A. Moliton; B. Lucas. *Electronic properties in disordered solids. iii. hopping transport mechanisms associated to pair models and polaron conduction.* Annales der Physique, 19, N. 3, P. 299, 1994.

[5] K. Yamada; A. Sakurai; M. Takeshige. *Application of the orthogonality theorem to the motion of a charged particle in metals.* Physical Review B, 70, N. 01, P. 73, 1983.

[6] A. J. Leggett; S. Chakravarty; A. T. Dorsey; M. P. A. Fisher; A. Garg; W. Zwerger. *Dynamics of the dissipative two-state system.* Rev. of Mod. Phys., 59, N. 01, P. 01, 1987.

[7] R. Kubo. *Statistical Mechanics.* North-Holland Publishing Company, 1971.

[8] J. Kondo. *Localized atomic states in metals.* Physica, 84BP. 207, 1976.

[9] V. L. Líbero; L. N. Oliveira. *Spectral density for fermion tunneling between two centers in a metallic environment.* Phys. Rev. Letters, 65, N. 16, P. 2042, 1990.

[10] V. L. Líbero; L. N. De Oliveira. *Renormalization of the tunneling rate between two centers in a metal.* Physica B, 171P. 106, 1991.

[11] K. G. Wilson. *The renormalization group: Critical phenomena and the kondo problem.* Reviews of Modern Physics, 47, N. 04, P. 773, 1975.

[12] K. G. Wilson. *Renormalization group and critical phenomena: Phase-space cell analysis of critical behavior.* Phys. Rev. B, 4, N. 9, P. 3184, 1971.

[13] K. G. Wilson. *Renormalization group and critical phenomena: Renormalization group and the kadanoff scaling picture.* Phys. Rev. B, 4, N. 9, P. 3174, 1971.

[14] L. Kadanoff. *Static phenomena near critical points: Theory and experiment.* Reviews of Modern Physics, 39, N. 2, P. 395, 1967.

[15] K. G. Wilson. *The renormalization group and critical phenomena.* Reviews of Modern Physics, 55, N. 03, P. 583, 1983.

[16] L. N. Oliveira; V. L. Libero; H. O. Frota; M. Yoshida. *Renormalization-group of dynamical properties for impurity models.* Physica, B, N. 171, P. 61, 1991.

[17] W. C. Oliveira. *Método Generalizado do Grupo de Renormalizaćão Numérico para o Cálculo de Propriedades Termodinâmicas de Impurezas em Metais.* PhD thesis, Instituto de Fisica de Sao Carlos - Universidade de Sao Paulo, 1994.

[18] S. C. Costa. Calor especifico do modelo de anderson de uma impureza por grupo de renormalizacao numerico. Master's thesis, Instituto de Fisica de Sao Carlos - Universidade de Sao Paulo, 1995.

[19] K. G. Wilson. *Renormalization group methods.* Advances in Mathematics, 16P. 170, 1975.

[20] H. R. Krishna-Murthy; J. W. Wilkins; K. G. Wilson. *Renormalization-group approach to the anderson model of dilute magnetic alloys - static properties for the symmetric case.* Physical Review B, 21, N. 03, P. 1004, 1980.

[21] B. A. Jones; C. M. Varma; J. W. Wilkins. Physical Review Letters, 61P. 125, 1988.

[22] A. J. Millis; B. G. Ketliar; B. A. Jones. *Field Theories in Condensed Matter Physics.* Addison-Wesley; Redwood City, CA, 1990.

[23] H. O. Frota; L. N. Oliveira. *Photoemission spectroscopy for the spin-degenerate anderson model.* Physical Review B, 33P. 7871, 1986.

[24] M. Yoshida; M. A. Whitaker; L. N. Oliveira. *Renormalization-group calculation of excitation properties for impurity models.* Physical Review B, 41, N. 13, P. 9403, 1990.

[25] J. L. N. Mello. *Diagonalizacao do Hamiltoniano de Falicov e Kimball para Duas Impurezas em Meio Metalico.* PhD thesis, Instituto de Fisica de Sao Carlos - Universidade de Sao Paulo, 1992.