Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos

Krissia de Zawadzki

*Relaxação magnética em ligas magnéticas
diluídas*

São Carlos

2014

Krissia de Zawadzki

*Relaxação magnética em ligas magnéticas
diluídas*

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de mestre em Ciências.

Área de Concentração: Física Aplicada Opção:
Física Computacional

Orientador: Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

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

São Carlos

2014

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

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

de Zawadzki, Krissia
Relaxação magnética em ligas magnéticas diluídas /
Krissia de Zawadzki; orientador Luiz Nunes de
Oliveira - versão corrigida -- São Carlos, 2014.
139 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em
Física Aplicada Computacional) -- Instituto de Física
de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2014.

1. Efeito Kondo. 2. Propriedades magnéticas. 3.
Nuvem Kondo. I. Nunes de Oliveira, Luiz , orient.
II. Título.

AGRADECIMENTOS

Esta dissertação é dedicada a todas as pessoas que contribuíram para que eu conseguisse chegar à pós-graduação e àqueles que tornaram esses dois anos um momento bastante especial em minha existência. Peço desculpas antecipadamente caso eu esqueça alguém, já que a lista de pessoas para agradecer é deveras grande.

Primeiramente, eu gostaria de agradecer ao Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira pela orientação e, principalmente, pela paciência. Com sua capacidade de explicar qualquer coisa de forma inteligível (quase uma bruxaria que só ele é capaz de fazer), Luiz é um exemplo de pesquisador, professor e pessoa. Além disso, foi ele quem incentivou meus primeiros passos na pesquisa acadêmica, sem os quais eu não teria entusiasmo e motivação para prosseguir. Sinto-me infinitamente honrada com a oportunidade de trabalhar em seu grupo de pesquisa.

Agradeço especialmente à minha pequena família, que hoje compreende minha mãe, tia, primos e irmã gêmea Andressa. À minha irmã, particularmente, por ouvir-me nos momentos de dificuldade e converter nossa semelhança em motivação para que eu buscasse cada vez mais conhecimento. Se estivessem aqui, eu agradeceria ao meu pai, meu irmão Eduardo e às minhas avós Ana e Regina (*in memorium*) pelas reminiscências de minha feliz infância. Eu também destaco aqui um amigo cuja constante presença o tornou parte de minha família: Vinicius (ou Pé de Pano) você é uma das pessoas mais inteligentes e admiráveis que conheci. Obrigada pela paciência em lidar diariamente com minhas falas intermináveis e por esclarecer alegremente conceitos obscuros em temas diversos. Apenas conseguirei superar sua falta nos anos vindouros, pensando que você será tão notável como médico quanto é como físico.

Acho oportuno homenagear todos os docentes que contribuíram para minha formação. Em especial, os professores Totó, Gonzalo, Agostinho, Paulo Miranda, Alcaraz, Valter, Lidério, Reginaldo, Leonardo e Miled pelas aulas didáticas e interessantes e a professora Tereza pelos aconselhamentos. Gostaria também de retribuir a atenção do professor Tito quando fui sua monitora de laboratório e à turma de Engenharia da Computação que me recebeu muito bem nesta tarefa.

Ao professor Luciano, agradeço a oportunidade de ter trabalhado como aluna de iniciação científica e pelos ensinamentos culturais. Aproveito para incluir aqui os colegas do antigo Grupo de Visão Cibernética: Débora, Mauro, Matheus, Thomas, Lucas, Renato, Cesar e Mônica todos vocês são especiais para mim.

Agradeço ao meu colega Paulo Matias por toda sua gentileza e disponibilidade ao longo de minha jornada no curso de Física Computacional. Eu diria que Paulo foi minha grande inspiração para iniciar e concluir a graduação, além de ter feito com que eu superasse diversas dificuldades computacionais. Seu conhecimento e suas fantásticas dicas fizeram da computação uma ferramenta indispensável em meu trabalho.

Tributo sinceros reconhecimentos à companhia dos colegas Raul e Celso nos cafés da tarde e nos cursos de pós-graduação. Aprecio deveras nossas conversas nessa última etapa de finalização das dissertações, pois elas foram fundamentais para criar uma expectativa mais positiva e atenuar a ansiedade do momento. Torço pelo sucesso de suas pesquisas no doutorado e espero que possamos manter o hábito da cafeína vespertina.

Agradeço aos meus amigos Heitor e Joseana (a nossa McGyver) por partilhar momentos doces (ou, como chamamos, de gordice) nos intervalos dos estudos. Aos colegas Hudson e Thiago, pelas conversas informais nas quais discutimos física e assuntos aleatórios. Ao colega Thiago Mosqueiro agradeço imensamente por disponibilizar o pacote LaTeX utilizado nesta dissertação. Também quero retribuir a felicidade de conviver com pessoas engajadas e verdadeiramente amigas como Luísa, Carla, Thereza e Marta.

Aos membros do grupo "Galera do Cinema", gostaria de agradecer pelos finais de semana de entretenimento e distração e à Comissão da quarta Semana Integrada SIFSC por aceitar-me neste ano como colaboradora. Ao meus colegas Tiago, Paulo, Bruno, Diego, Felipe (clap, clap, clap), Ciro, Prati e Karen, com os quais tive a honra de "atuar" no Grupo de Teatro Atuando em Psi ($GT|\psi\rangle$), agradeço por recordarem de minha pessoa em toda apresentação, mesmo eu tendo os deixado para dedicar-me mais à pesquisa.

Quero homenagear alguns funcionários do IFSC, especialmente a Beth, que me ajudou muito na época de graduação, a Cris, que eu destacaria pela eficiência para resolver as burocracias do grupo, e as bibliotecárias Cristina e Neusa, que corrigiram a dissertação adequando-a às normas técnicas.

Devo agradecer à FAPESP pelo apoio financeiro deste projeto.

Finalmente, gostaria de agradecer à banca examinadora pela disponibilidade para avaliar este trabalho.

The fundamental laws necessary for the mathematical treatment of a large part of physics and the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty lies only in the fact that application of these laws leads to equations that are too complex to be solved.

Paul Dirac.

RESUMO

ZAWADZKI, K. *Relaxação magnética em ligas magnéticas diluídas*. 2014. 139 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2014.

Na década de 60, Kondo mostrou que o mínimo de resistividade observado em alguns metais a baixas temperaturas é devido ao acoplamento antiferromagnético entre impurezas e a banda de condução do metal hospedeiro. Embora muitos resultados teóricos e experimentais tenham sido obtidos desde então, uma interessante questão remanesce: a estrutura da nuvem de elétrons de condução que blindar o momento magnético da impureza. Com o objetivo de estudar essa estrutura, apresentamos um procedimento de Grupo de Renormalização Numérico (NRG) para computar a taxa NMR de relaxação longitudinal $1/T_1$ de uma ponta de prova como função da temperatura e da distância R entre a ponta e a impureza. Introduzimos uma base quântica contendo dois conjuntos de estados de condução. Os elementos de um dos conjuntos, denotados f_n , são ondas s acopladas à impureza e descritas pelo Hamiltoniano de Anderson, que pode ser diagonalizado pelo procedimento tradicional de NRG. Cada elemento do segundo subconjunto, denotado $\bar{c}_\varepsilon$, é uma combinação linear de um estado de onda s centrado na ponta de prova com os f_n 's, de modo que os $\bar{c}_\varepsilon$ são ortogonais aos f_n 's. Diferente dos f_n 's, os $\bar{c}_\varepsilon$ são desacoplados da impureza. Com base nessas definições, mostramos que $1/T_1$ tem três componentes, que chamamos *escalar*, *vetorial* e *matricial*. A componente escalar, associada com os estados $\bar{c}_\varepsilon$ espalhados pela ponta de prova, é independente da temperatura e fracamente dependente de R . A componente $(1/T_1)_{mat}$, associada com os elétrons f_n , decai rapidamente com R . Damos atenção especial à componente vetorial $(1/T_1)_{vet}$, que está associada ao espalhamento cruzado de canais f_n e $\bar{c}_\varepsilon$, e domina para distâncias R grandes. A dependência térmica da taxa de relaxação mostra que há uma mudança no comportamento da curva quando passamos por $R_K \propto T_K^{-1}$. No limite de altas temperaturas, observamos que $(1/T_1)_{vet}(T)$ pode ser mapeada nas curvas de condutância $\mathcal{G}_{side}(T/T_K)$ e $\mathcal{G}_{SET}(T/T_K)$. Com respeito à dependência espacial, analisamos as oscilações de Friedel. A partir desses resultados verificamos a relação $R_K = \hbar v_F / K_B T_K$ e mostramos que as fases das oscilações de Friedel mudam quando olhamos para o interior e o exterior da nuvem.

Palavras-chave: Efeito Kondo. Propriedades magnéticas. Nuvem Kondo.

ABSTRACT

ZAWADZKI, K. *Magnetic relaxation in dilute magnetic alloys*. 2014. 139 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2014.

In the 1960's, Kondo showed that the resistivity minimum observed in a number of metals at low temperatures is due to the antiferromagnetic coupling between magnetic impurities and the conduction electrons of the metallic host. Although many theoretical and experimental results have been obtained since then, an interesting question remains unanswered: the structure of the cloud of conduction electrons that screen the magnetic moment of the impurity. To add insight into that structure, we here present a Numerical Renormalization Group (NRG) procedure to compute the NMR longitudinal relaxation rate $1/T_1$ of a probe at distance R from the impurity, as a function of R and of the temperature. We define a quantum basis containing two subsets of conduction states. The elements of one the subsets, denoted f_n , are s -wave states coupled to the impurity and described by the Anderson Hamiltonian, which can be diagonalized by the traditional NRG procedure. Each element of the second subset, denoted $\bar{c}_\epsilon$ is a linear combination of an s -wave state centered at the probe with the f_n 's, the combination constructed to make $\bar{c}_\epsilon$ orthogonal to the f_n 's. By contrast with the f_n 's, the $\bar{c}_\epsilon$'s are decoupled from the impurity. On the basis of these definitions, we show that $1/T_1$ has three components, which we name *scalar*, *vector*, and *matrix*. The scalar component, associated with the scattering of $\bar{c}_\epsilon$ states off the probe, is temperature independent and weakly dependent on R . The matrix component $(1/T_1)_{\text{mat}}$, associated with the scattering of f_n electrons, decays rapidly with R . The vector component $(1/T_1)_{\text{vet}}$ is due to cross-channel scattering between the f_n and the $\bar{c}_\epsilon$ subsets. We give central attention to the latter, which is dominant over $(1/T_1)_{\text{mat}}$ at large distances R . The T-dependence of the relaxation rate changes as we cross $R_K \propto T_K^{-1}$. At high temperatures limit, we observe the $(1/T_1)_{\text{vet}}(T)$ mapping in the universal conductance curves $\mathcal{G}_{\text{side}}(T/T_K)$ e $\mathcal{G}_{\text{SET}}(T/T_K)$. Regarding the spatial dependence, we analyze the Friedel oscillations. From our results we verify the relation $R_K = \hbar v_F / K_B T_K$ for the radius of the Kondo screening cloud and also show that the phase of the Friedel oscillations changes as we are inside or outside the cloud. launch the idea of a shell around R_K where screening effects remain important.

Keywords: Kondo effect. Magnetic properties. Kondo screening cloud.

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1.1 - Comportamento resistivo de materiais metálicos. **a)** A medida que a temperatura no metal é reduzida, sua resistência diminui até alcançar um valor residual (azul). Certos materiais metálicos se tornam supercondutores a partir de uma temperatura crítica (verde). Em ligas metálicas, tal como CoCu, a presença de impurezas dá origem ao Efeito Kondo, fazendo com que a resistência aumente com a redução da temperatura (vermelho). **b)** Pontos quânticos podem ser criados artificialmente em semicondutores dispondo um spin localizado entre fios metálicos. Sistemas dessa natureza permitem controlar o número de elétrons. Se esse número for ímpar, a condutância medida entre os dois fios aumenta a baixas temperaturas devido ao efeito Kondo (vermelho). Este comportamento não é verificado para um número par de elétrons, já que a condutância decresce a baixas temperaturas (azul).
Fonte: KOUWENHOVEN, L. P. (1). 26
- Figura 1.2 - Resistividade ρ em função da temperatura T . Comparação da curva experimental $\rho - T$ de ligas diluídas de $AuFe$ com os resultados do modelo de Kondo em seu trabalho de 1964. Fonte: KONDO, J. (2). . 27
- Figura 1.3 - Ilustração de pontos quânticos. **a)** Esses dispositivos de escala nanométrica consistem de eletrodos usualmente construídos por técnicas avançadas de epitaxia em nanocristais, por deposição iônica ou por litografia. Aplicando voltagens aos eletrodos metálicos é possível confinar elétrons em uma pequena região, formando pontos quânticos. Fonte: GOLDHABER-GORDON, D. (3). **b)** Um segundo exemplo, desta vez constituído por dois pontos quânticos. Pontos quânticos duplos são formados conectando dois pontos quânticos. Um efeito interessante decorre de pontos quânticos duplos: um dos pontos está no estado de Kondo, de modo que o spin do elétron confinado é compensado pelo spin dos elétrons ao redor. Fonte: ScienceDaily (4). 28
- Figura 1.4 - Nuvem Kondo em um sistema metálico infinito e isotrópico com a impureza localizada na origem. Fonte: elaborada pela autora. 29

Figura 2.1 - Metal hospedeiro semi-infinito na direção z com a impureza localizada à distância $\vec{d}$ do plano limitante $z = 0$. Fonte: elaborada pela autora.	34
Figura 2.2 - Para $R_K < d$ a nuvem Kondo não há truncamento pela superfície, de modo que o comportamento esperado é o de uma nuvem com raio inversamente proporcional a T_K , como descrito em (5). Fonte: elaborada pela autora.	34
Figura 2.3 - Para $R_K > d$ a nuvem Kondo é truncada pela superfície e seu tamanho dependeria da geometria do sistema. Fonte: elaborada pela autora.	35
Figura 2.4 - A relação de dispersão para as energias da banda de condução no intervalo $[-D, D]$ é aproximada por uma função linear, simétrica em torno do momento de Fermi k_F . Fonte: elaborada pela autora.	36
Figura 2.5 - Representação dos níveis de energia no Modelo de Anderson simétrico. Nesta situação $\varepsilon_d = -U/2$, e o estado da impureza pode assumir quatro configurações: vazia ($n_d = 0$), semi ocupada com um elétron com spin up ou down ($n_d = 1$) e cheia com dois elétrons com spins opostos ($n_d = 2$). Fonte: elaborada pela autora.	37
Figura 2.6 - Transições virtuais da impureza no regime de acoplamento forte para o Modelo de Anderson simétrico. Níveis da banda de condução são representados em dourado, enquanto a impureza é ilustrada em prateado. a) Estado inicial da impureza no nível ε_d com spin up. b) Uma vez que adicionar um elétron não é energeticamente possível por conta do valor de U , o elétron up da impureza ocupa um estado virtual e então é substituído por um elétron do metal. c) Da transição virtual resulta o <i>flip</i> (inversão) de spin da impureza. Fonte: elaborada pela autora.	38
Figura 3.1 - Cascas concêntricas em torno da impureza representando os estados na base Kondo. Fonte: WILSON, K. G. (10).	49
Figura 3.2 - A banda de condução é discretizada em escala logarítmica, definida por um parâmetro adimensional Λ . Fonte: elaborada pela autora.	51
Figura 3.3 - Representação do hopping de elétrons entre os sítios f_n da banda de condução. Cada elétron em um sítio f_n pode ser transferido para um sítio f_{n+1} e vice-versa. Fonte: elaborada pela autora.	55

Figura 3.4 - Representação dos 4 estados de muitos corpos na iteração $N = -1$. Há apenas o sítio da impureza com quatro possíveis configurações eletrônicas: cada estado $|0\rangle$, $c_{d\uparrow}^\dagger|0\rangle$, $c_{d\downarrow}^\dagger|0\rangle$ and $c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\downarrow}^\dagger|0\rangle$ pode ter, respectivamente, 0 elétrons, 1 elétron com spin up, um elétron com spin down, ou dois elétrons com spins opostos. Fonte: elaborada pela autora. 57

Figura 3.5 - Ilustração dos 16 estados de muitos corpos na iteração $N = 0$. Nesta iteração, participam os sítios c_d e f_0 , e o estado de maior carga possui dois elétrons em cada um destes sítio. Os estados que não foram identificados como $|Q, S, S_z, r\rangle$ correspondem às combinações singleto e tripleto de $c_{d\uparrow}^\dagger f_{0\downarrow}^\dagger|0\rangle$ e $c_{d\downarrow}^\dagger f_{0\uparrow}^\dagger|0\rangle$. Fonte: elaborada pela autora. 58

Figura 3.6 - Ciclo iterativo do NRG na solução do problema Kondo. A partir da solução analítica na iteração $N = -1$, construímos a base primitiva da iteração $N = 0$ que inicia o ciclo iterativo. No restante das iterações N , construímos a base primitiva na qual o Hamiltoniano H_N é diagonalizado. Os autovalores e autovetores de H_N são armazenados para o cálculo de propriedades físicas e para a construção da iteração $N + 1$. Fonte: elaborada pela autora. 60

Figura 3.7 - Setores ativos (em azul) para a iteração $N = 6$. A carga máxima é $Q_{max}^5 = 7$. Para $Q = 0$, o conjunto de spins permitidos é $[0, 1, 2, 3]$, enquanto para $Q = 7$ só é permitido $S = 1$. Em uma iteração par setores de carga par têm spins pares e setores de carga ímpar têm spins ímpares. Fonte: elaborada pela autora. 64

Figura 3.8 - Construção da base primitiva de um setor (Q, S) na iteração N a partir dos estados da iteração $N - 1$. Setores pais e filhos são ilustrados em vermelho e verde, respectivamente. **a)** Seja $\{|Q, S, S_z, l\rangle\}$ a base de estados do setor (Q, S) da iteração $N - 1$. A atuação dos operadores O_g ($g = S, \mathcal{W}, \mathcal{E}, \mathcal{N}$) nessa base dá origem aos estados filhos nos respectivos setores $(q - 1, s)$, $(q, s + 1/2)$, $(q + 1, s)$ e $(q, s - 1/2)$ na iteração N . Os gêneros atribuídos aos operadores O_g correspondem à localização geográfica dos setores filhos de Q, S : norte ($\mathcal{N}$), leste ($\mathcal{E}$), sul ($\mathcal{S}$) e oeste ($\mathcal{W}$). **b)** A base primitiva de um setor filho (q, s) na iteração N é implementada através da herança de estados dos setores pais oriundos da iteração $N - 1$. O setor (q, s) recebe estados dos setores $(Q - 1, S)$ via O_S , $(Q, S + 1/2)$ via O_W , $(Q + 1, S)$ via O_N e $(Q, S - 1/2)$ via O_W 66

Figura 3.9 - Setores pais (vermelho) e filhos (azul) nas iterações $N = -1$ e $N = 0$. A iteração $N = -1$ é composta pelos setores $(Q = 1, S = 0)$, $(Q = 0, S = \frac{1}{2})$ e $(Q = -1, S = 0)$, cada um contendo um estado. Esses estados são herdados na iteração $N = 0$, dando origem à base primitiva dos setores $(Q = 2, S = 0)$, $(Q = 1, S = \frac{1}{2})$, $(Q = 0, S = 0)$, $(Q = -1, S = \frac{1}{2})$ e $(Q = -2, S = 0)$. Na iteração $N = 1$, os setores filhos herdam os estados em $N = 0$ cujos autovalores são inferiores a E_{UV} . Fonte: elaborada pela autora. 67

Figura 3.10 -Esquema de cálculo dos invariantes NE e NW de um setor (Q, S) com os setores $(Q+1, S+\frac{1}{2})$ e $(Q+1, S-\frac{1}{2})$, respectivamente. Os setores circulados em vermelho correspondem aos pais de (Q, S) existentes na iteração anterior. **a)** Os invariantes nordeste $\langle q + 1, s + 1/2, r' || f_N || q, s, r \rangle$ recebem a contribuição de estados com origem nos setores pais $(Q + 1, S)$ e $(Q, S + \frac{1}{2})$. **b)** Os invariantes noroeste $\langle q + 1, s - 1/2, r' || f_N || q, s, r \rangle$ recebem a contribuição de estados com origem nos setores pais $(Q + 1, S)$ e $(Q, S - \frac{1}{2})$. Fonte: elaborada pela autora. 69

Figura 3.11 - Cálculo dos invariantes entre os estados da iteração $N = -1$. **a)** Os estados $|Q = 0, S = 1/2, 1\rangle$ e $|Q = 1, S = 0, 1\rangle$ juntos compõe o elemento de matriz $\langle Q = 1, S = 0, r' = 1 || f_{-1} || Q = 0, S = 1/2, r = 1 \rangle$ na direção NW do setor $(Q = 0, S = 1/2)$. **b)** Por sua vez, o invariante NE do setor $(Q = -1, S = 0)$ é construído a partir dos estados $|Q = -1, S = 0, r = 1\rangle$ e $|Q = 0, S = 1/2, r' = 1\rangle$. Fonte: elaborada pela autora. 72

Figura 4.1 - Disposição dos elementos invariantes $\langle \varphi || f_n^\dagger f_m || \psi \rangle$ em uma matriz de n linhas e m colunas, com $m, n = 0, \dots, N$. Cada elemento $\langle \varphi || f_n^\dagger f_m || \psi \rangle$ pode ser determinado pelos vizinhos $\langle \varphi || f_{n\pm 1}^\dagger f_{m\pm 1} || \psi \rangle$. Fonte: elaborada pela autora. 85

Figura 4.2 - Cálculo recursivo dos elementos de matriz reduzidos $\langle \varphi || f_n^\dagger f_m || \psi \rangle$ quando $|\varphi\rangle = |\psi\rangle$. No início da computação recursiva as linhas e colunas coloridas são conhecidas: a linha colorida em vermelho corresponde aos elementos de matriz da forma $\langle \varphi || f_N^\dagger f_m || \psi \rangle$ ($m = 0, \dots, N$) e a coluna mostrada em azul diz respeito aos invariantes $\langle \varphi || f_n^\dagger f_0 || \psi \rangle$ ($n = 0, \dots, N$). Para obter um invariante iii da linha $N - 1$ (circulado em vermelho) precisamos conhecer seus vizinhos i ao noroeste e ii ao nordeste, ambos localizados na linha N , aplicando a equação (4.33). Analogamente, para determinar um elemento iv na linha $N - 2$ (circulado em azul) devemos ter além de seus vizinhos noroeste ii e nordeste iii da linha $N - 1$ o invariante i da linha N . Com a equação (4.34) é possível determinar todos os elementos da mesma linha. Fonte: elaborada pela autora. 88

Figura 5.1 - Coeficientes $u_{10,m}$ e $u_{9,m}$ para $\Lambda = 3.0$. O valor absoluto é máximo quando $m = n/2$. Para $m > n/2$, os coeficientes decaem à taxa $\Lambda^{(n/2-m)/2}$. O valor máximo de n é definido pelos parâmetros do modelo, E_{min} e Λ , enquanto m é arbitrariamente grande. O mesmo gráfico para $n > 4$ revela que os u_{nm} dependem somente da diferença $n/2 - m$. Fonte: elaborada pela autora. 92

Figura 5.2 - Coeficientes $\gamma_n(R)$ para $k_F R = n\pi$ com $n \in [1000, 100, 10, 1]$. O número n de iteração característico $\mathcal{N}_{k_F R}$ no qual γ_n é máximo aparece destacado para cada um dos casos mostrados na figura. Fonte: elaborada pela autora. 95

Figura 5.3 - Coeficientes $\gamma_n(R)$ para $k_F R = (n + \frac{1}{2})\pi$ com $n \in [1000, 100, 10, 1]$. Para cada valor de $k_F R$ destacamos a iteração característica $\mathcal{N}_{k_F R}$, calculada através da equação (5.15). Conforme $k_F R$ fica menor, a contribuição dos coeficientes γ_0 vai se tornando cada vez maior, superando o pico típico em $n = \mathcal{N}_{k_F R}$. Comparando estes resultados com a figura 5.2, notamos que esse efeito é mais proeminente para valores $k_F R$ múltiplos de $\frac{\pi}{2}$, conforme esperado pela expansão dos γ_n na equação (5.10). Fonte: elaborada pela autora. 96

Figura 5.4 - Oscilações de Friedel no ponto fixo de temperatura $T \ll T_K$. Pontos destacados com setas correspondem aos máximos e aos nós das oscilações. O ponto $(n + 1/4)\pi$ combina os comportamentos destrutivo e construtivo. Fonte: elaborada pela autora. 98

Figura 5.5 - Contribuição vetorial para a taxa de relaxação $1/T_1$ com $k_F R = (n + \frac{1}{2})\pi$. A correspondente parcela da taxa é proporcional a $(k_F R)^2$ e decai para baixas temperaturas. A pequenas distâncias, no limite de altas temperaturas, a curva pode ser mapeada na condutância $\mathcal{G}_{side}$ de um dispositivo formato T. Fonte: elaborada pela autora. 99

Figura 5.6 - Contribuição para a taxa de relaxação $1/T_1$. com $k_F R = n\pi$. A contribuição começa muito pequena para altas temperaturas e aumenta até atingir um patamar constante em $T < T_K$. O comportamento global é análogo ao da condutância $\mathcal{G}_{SET}$ de um transistor de um elétron. Fonte: elaborada pela autora. 100

Figura 5.7 - Taxa de relaxação $(1/T_1)_{vet}$ em função da temperatura na ausência de oscilação. A altas temperaturas, a componente vetorial de $1/T_1$ mescla os comportamentos das condutâncias $\mathcal{G}_{side}$ e $\mathcal{G}_{SET}$. A mudança de comportamento ocorre nas vizinhanças do raio da nuvem Kondo $R_K = \hbar v_F / k_B T_K$, confirmando a hipótese de que o raio seria encontrado em uma escala de distância mesoscópica. Fonte: elaborada pela autora. . . 101

Figura 5.8 - Taxa de relaxação em função da temperatura e os limites da nuvem Kondo. Para $R \gg R_K$ a dependência térmica é análoga a da curva $\mathcal{G}_{SET}$, enquanto para $R \ll R_K$ ela pode ser mapeada na condutância $\mathcal{G}_{side}$. Fonte: elaborada pela autora. 102

Figura A.1 - Implementação da completeza (A.1) para o cálculo dos elementos de matriz $\langle \varphi | f_{n\mu}^\dagger f_{m\nu} | \psi \rangle$. Os estados $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ pertencem ao mesmo setor (q, s) , enquanto os estados $|\xi\rangle$ podem estar a sudeste SE ou sudoeste SW . Fonte: elaborada pela autora. 116

Figura B.1 - Setores contendo estados que contribuem direta ou indiretamente para o invariante $\langle q, s + 1, r' | f_N^\dagger f_N | q, s, r \rangle$. Uma vez que os dois estados primitivos (coloridos em laranja) devem ter o mesmo pai, o estado que lhes deu origem deve pertencer ao setor $(q, s + 1/2)$ (indicado pelo rótulo inclinado $s + 1/2$). As abas representam os gêneros dos estados primitivos. Fonte: elaborada pela autora. 125

Figura B.2 - Setores envolvidos no cálculo dos elementos de matriz $\langle q, s - 1, r' | f_N^\dagger f_N | q, s, r \rangle$. Quando o invariante deve ser tomado entre um ket e um bra de gêneros $\mathcal{E}$ e $\mathcal{W}$, respectivamente, estes foram herdados de estado da iteração $N - 1$ que pertencia ao setor $(q, s + 1/2)$. Fonte: elaborada pela autora. 126

Figura B.3 - Setores envolvidos no cálculo dos elementos de matriz da equação (B.34) para estados com gêneros $g_{p'} = g_p = \mathcal{E}$. O invariante $\langle q, s, p' | f_0^\dagger f_n | q, s, p \rangle$ é tomado entre estados do mesmo setor (q, s) herdados de $(q, s - 1/2)$ no início do ciclo iterativo. Fonte: elaborada pela autora. 129

Figura B.4 - Casos especiais de herança para os quais o invariante da equação (B.34) é não-nulo. São mostrados os seguintes pares de gêneros $g_{p'}-g_p$: **a)** $\mathcal{W}-\mathcal{W}$, **b)** $\mathcal{W}-\mathcal{E}$ e **c)** $\mathcal{E}-\mathcal{W}$. Fonte: elaborada pela autora. 131

Figura B.5 - Setores (q, s) e $(q, s + 1)$ envolvidos no cálculo da equação (B.41). Mostramos os possíveis gêneros dos estados herdados pelos setores pais (com rótulos inclinados): **a)** $\mathcal{E}-\mathcal{E}$, **b)** $\mathcal{W}-\mathcal{W}$ e **c)** $\mathcal{E}-\mathcal{W}$. Fonte: elaborada pela autora. 133

Figura B.6 - Setores (q, s) e $(q, s - 1)$ cujos estados participam da relação (B.44). Destacamos os casos não-triviais de herança para os gêneros $g_{p'}-g_p$: **a)** $\mathcal{E}-\mathcal{E}$, **b)** $\mathcal{W}-\mathcal{W}$ e **c)** $\mathcal{W}-\mathcal{E}$. Fonte: elaborada pela autora. 134

Figura C.1 - Geometrias de ponto quântico acoplado com um fio quântico. **a)** Dispositivo em formato T. O círculo laranja refere-se a um ponto quântico acoplado lateralmente a um fio quântico. Os potenciais de *gate* V_d e V_w controlam, respectivamente, a ocupação eletrônica do ponto e do orbital de Wannier. Esse dispositivo permite que haja interferência entre a corrente fluindo ao longo do fio (setas brancas) e os elétrons que conseguem passar do fio ao ponto. **b)** Transistor de um único elétron SET. Um ponto quântico faz a ponte entre dois fios quânticos não-interagentes. Um potencial V_d controla a energia no ponto quântico, enquanto os potenciais V_w deslocam a energia dos orbitais do fio próximo ao ponto. Fonte: elaborado pela autora. 136

Figura C.2 - Condutâncias $\mathcal{G}_{SET}$ e $\mathcal{G}_{side}$ como função de T/T_K normalizadas pela condutância quântica $\mathcal{G}_2$. A curva vermelha mostra a condutância $\mathcal{G}_{side}$ através do dispositivo lateralmente acoplado. A medida que a temperatura é resfriada, a condutância decai a zero. Por outro lado, a condutância $\mathcal{G}_{SET}$, mostrada em verde, cresce para $T < T_K$ e tende à unidade no limite $T \rightarrow 0$. Note que para $T = T_K$ temos $G(T/T_K) = 0.5\mathcal{G}_2$ e as duas condutâncias coincidem. Fonte: elaborado pela autora. 139

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 - Elementos não-diagonais da matriz Hamiltoniano H_N entre os estados $ q, s, s_z, p'\rangle_N^{g'}$ e $ q, s, s_z, p\rangle_N^g$. Os fatores que aparecem na frente dos invariantes são os coeficientes de Clebsch-Gordan. As combinações não listadas de gêneros g e g' são nulas.	68
Tabela 3.2 - Elementos de matriz ${}^{g'}\langle q+1, s', s_z + \mu, p' f_{N\mu}^\dagger q, s, s_z, p \rangle_N^g$ não nulos a partir dos quais os invariantes são computados. A última coluna apresenta os coeficientes de Clebsch-Gordan para as combinações de gêneros que produzem elementos diferentes de zero.	70
Tabela 5.1 - Parâmetros de entrada do código adotados no cálculo da taxa de relaxação $(1/T_1)_{vet}$	98
Tabela A.1 - Coeficientes de Clebsch-Gordan referentes aos elementos de matriz SW . 118	
Tabela A.2 - Coeficientes de Clebsch-Gordan referentes aos elementos de matriz SE . 118	
Tabela B.1 - Elementos da matriz de coeficientes $\mathcal{G}$ para as possíveis combinações de gêneros. Embora a matriz seja diagonal, de modo que elementos entre estados com mesmo gênero são pressupostamente diferentes de zero, os elementos que efetivamente são não-nulos têm gêneros $\mathcal{E}$ e $\mathcal{W}$. 124	
Tabela B.2 - Coeficientes α_{gp} relacionando os elementos de matriz na (B.30). Das possíveis combinações dos gêneros $g = \mathcal{N}, \mathcal{E}, \mathcal{S}, \mathcal{W}$, os elementos não-nulos têm $p' \neq p$	127
Tabela B.3 - Matriz $\mathcal{A}_{g_{p'}, g_p}$ na soma à direita da equação (B.34). Além dos termos diagonais, destacamos as combinações $(g_{p'}, g_p) = (\mathcal{E}, \mathcal{W})$ e $(\mathcal{W}, \mathcal{E})$. . .	129
Tabela B.4 - Matriz de coeficientes $\mathcal{B}_{g_{p'}, g_p}$ na soma à direita da equação (B.41). . .	132
Tabela B.5 - Coeficientes $\mathcal{C}_{g'g}$ da matriz $\mathcal{C}$ definida à direita da equação (B.44). . .	133

SUMÁRIO

1	Introdução	25
2	O sistema quântico	33
2.1	O Modelo de Anderson de uma impureza	35
2.2	A ponta de prova	39
2.3	Base contínua	40
3	O Grupo de Renormalização numérico	45
3.1	Da Teoria de Renormalização ao Grupo de Renormalização Numérico	46
3.2	O Grupo de Renormalização	47
3.3	O Grupo de Renormalização Numérico no Problema Kondo	48
3.4	Discretização da banda de condução	50
3.5	Mudança de base e Transformação de Lanczos	52
3.6	Diagonalização iterativa	56
3.6.1	Iteração $N = -1$	59
3.6.2	Setores Q, S e base primitiva	63
3.6.3	Cálculo dos invariantes	69
3.6.4	Cálculo recursivo dos elementos de matriz	73
4	A taxa de relaxação magnética longitudinal	77
4.1	Calculando a relaxação de um sistema Kondo	78
4.2	Hamiltoniano da ponta de prova na base de Lanczos	79
4.2.1	Contribuição vetorial	81
4.2.2	Contribuição matricial	82

5	Resultados	91
5.1	Coeficientes da transformação de Grupo de Renormalização	91
5.2	A taxa de relaxação associada à contribuição vetorial	97
6	Conclusão	105
	REFERÊNCIAS	109
	Apêndice A – Relação de completeza	115
A.1	Calculando os elementos de matriz de $f_{n\mu}^\dagger f_{m\nu}$ por completeza	115
	Apêndice B – Calculando a contribuição matricial por rotação	121
B.1	Cálculo dos elementos de matriz de $f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow}$	121
B.1.0.1	$s' = s + 1$	125
B.1.0.2	$s' = s - 1$	126
B.2	Cálculo dos elementos de matriz de $f_{m\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow}$	127
B.3	Cálculo dos elementos de matriz de $f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow}$	128
B.3.1	Elementos de $f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow}$ entre estados com $s = s'$ e $s'_z \neq s_z$	128
B.3.1.1	East-East	129
B.3.2	Elementos de $f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow}$ entre estados com spins diferentes	131
B.3.2.1	$s' = s + 1$	131
B.3.2.2	$s' = s - 1$	132
	Apêndice C – Condutâncias em nanoestruturas	135
C.1	Condutância universal	135
C.2	Dispositivo em formato T	137
C.3	Transistor de um único elétron	138
C.4	Resultados numéricos	139

CAPÍTULO 1

Introdução

Before I came here I was confused about
this subject. Having listened to your
lecture I am still confused. But on a
higher level.

Enrico Fermi

Ao longo de décadas, teóricos buscaram explicar o comportamento da resistividade elétrica de metais com a variação da temperatura. Sabemos que na maioria dos metais, o aumento de temperatura é acompanhado por um aumento na resistividade: conforme a temperatura aumenta no metal, cada vez mais vibrações de seus núcleos são excitadas, levando a um espalhamento dos elétrons de condução que resulta em aumento da resistividade. De fato, este tipo de dependência é verificada para altas temperaturas (superiores à temperatura ambiente), até as quais a resistividade é praticamente a resistividade intrínseca do material. A baixas temperaturas, entretanto, verificou-se que a resistividade de muitos metais cresce a medida que a temperatura diminui após passar por um mínimo.

Essa descoberta, que intrigou os físicos por cerca de 30 anos, teve um histórico muito interessante até que, finalmente, Jun Kondo (2) propôs uma explicação para o fenômeno, hoje conhecido como Efeito Kondo.

Em 1934, a observação de um mínimo de resistividade em ouro a baixas temperaturas por Haas, Boer e van den Berg (6) foi um dos primeiros indícios da violação do modelo de resistividade postulado na teoria eletrônica dos metais. Isso levou à suspeita da existência de uma forma de espalhamento anômalo, verificado mesmo quando as vibrações da rede não são suficientes para incitá-lo. Em trabalhos posteriores, o grupo de pesquisadores associou a influência da pureza química e física à posição do mínimo em fios metálicos (7). Na década de 1960, reconheceu-se que o comportamento resistivo a baixas temperaturas estava associado à presença de impurezas magnéticas no metal (8).

Em 1964, van den Berg (8) mostrou que os mínimos de resistividade estariam correlacionados com número de impurezas presentes no metal hospedeiro. No mesmo ano, o físico Jun

Kondo foi capaz de elucidar a natureza desse fenômeno tal como hoje conhecemos: a presença de impurezas, defeitos ou vacâncias em metais hospedeiros contribui para a resistividade residual a baixas temperaturas (2). A figura 1.1 mostra o comportamento resistivo ou condutivo de alguns materiais, comparando-os com sistemas em que o efeito Kondo pode manifestar-se.

Figura 1.1 – Comportamento resistivo de materiais metálicos. **a)** A medida que a temperatura no metal é reduzida, sua resistência diminui até alcançar um valor residual (azul). Certos materiais metálicos se tornam supercondutores a partir de uma temperatura crítica (verde). Em ligas metálicas, tal como CoCu, a presença de impurezas dá origem ao Efeito Kondo, fazendo com que a resistência aumente com a redução da temperatura (vermelho). **b)** Pontos quânticos podem ser criados artificialmente em semicondutores dispondo um spin localizado entre fios metálicos. Sistemas dessa natureza permitem controlar o número de elétrons. Se esse número for ímpar, a condutância medida entre os dois fios aumenta a baixas temperaturas devido ao efeito Kondo (vermelho). Este comportamento não é verificado para um número par de elétrons, já que a condutância decresce a baixas temperaturas (azul). Fonte: KOUWENHOVEN, L. P. (1).

Utilizando a segunda aproximação de Born, Kondo calculou a probabilidade de espalhamento dos elétrons de condução devido à perturbação causada por impurezas e obteve um modelo para a resistividade com um termo logarítmico $\log(T)$ divergente para $T \rightarrow 0$. Ainda no mesmo trabalho, Kondo mostrou que o mínimo observado em metais no regime de baixas temperaturas ocorre quando interação de troca entre o spin da impureza e os elétrons de condução é antiferromagnética. Desde então, o efeito de impurezas magnéticas na resistência de metais - que no regime de baixas temperaturas apresenta um mínimo - é conhecido como *Efeito Kondo*.

Figura 1.2 – Resistividade ρ em função da temperatura T . Comparação da curva experimental $\rho-T$ de ligas diluídas de AuFe com os resultados do modelo de Kondo em seu trabalho de 1964. Fonte: KONDO, J. (2).

Até aquele momento, o modelo de Kondo fornecia a explicação teórica da origem física do fenômeno com resultados compatíveis com estudos experimentais - veja a Figura 1.2. Contudo, ainda era necessário encontrar uma solução isenta de divergências. Diversos métodos foram propostos na tentativa de superar tal dificuldade. Phillip Anderson desenvolveu um método de Grupo de Renormalização com o objetivo de eliminar energias altas em favor de uma interação efetiva J_{eff} entre a impureza e a banda de condução. Conhecido como "Poor Man's Scaling"(9), o método perturbativo de Anderson era inválido para J tendendo a valores grandes. Assim, uma vez que J_{eff} cresce a medida que as energias baixam, o método se tornava inescapavelmente impreciso depois de algumas rodadas do processo eliminatório.

Figura 1.3 – Ilustração de pontos quânticos. **a)** Esses dispositivos de escala nanométrica consistem de eletrodos usualmente construídos por técnicas avançadas de epitaxia em nanocristais, por deposição iônica ou por litografia. Aplicando voltagens aos eletrodos metálicos é possível confinar elétrons em uma pequena região, formando pontos quânticos. Fonte: GOLDHABER-GORDON, D. (3). **b)** Um segundo exemplo, desta vez constituído por dois pontos quânticos. Pontos quânticos duplos são formados conectando dois pontos quânticos. Um efeito interessante decorre de pontos quânticos duplos: um dos pontos está no estado de Kondo, de modo que o spin do elétron confinado é compensado pelo spin dos elétrons ao redor. Fonte: ScienceDaily (4).

Na década de 70, Kenneth Wilson (10) utilizou o problema Kondo como base para o desenvolvimento do Grupo de Renormalização Numérico (NRG). A técnica descrita por Wilson no trabalho que lhe rendeu o Nobel obteve resultados promissores no cálculo de observáveis físicos, tais como a susceptibilidade magnética e o calor específico, em todo o limite de temperaturas de interesse. Assim, a divergência do modelo de Kondo foi resolvida satisfatoriamente, já que as propriedades físicas derivadas via NRG são compatíveis com o comportamento esperado quando a temperatura vai a zero. Mais tarde, Krishna-murthy (11) consagrou o sucesso do método na solução do modelo de Anderson com uma impureza (12).

Embora o problema Kondo seja bem consolidado, ele continua sendo vastamente estudado e tem contribuído sobremaneira à compreensão de propriedades eletrônicas de uma série de materiais, tais como férmions pesados e supercondutores a altas temperaturas. Além disso, o problema se torna inspirador para o teste de novas ferramentas analíticas e numéricas em problemas de muitos corpos.

Com o advento da microscopia de tunelamento (*Scanning tunnel microscopy* - STM) foi possível estudar o efeito Kondo em experimentos de manipulação atômica e imageamento, com principais resultados em 1998 (13, 14). Atualmente, o efeito Kondo vem sendo explorado em pontos quânticos (15), onde é possível controlá-lo experimentalmente (16–21) - veja a figura 1.3. Há grande interesse da indústria tecnológica em pesquisas com pontos quânticos, pois esses dispositivos são essenciais à fabricação das novas gerações de chips.

Desse modo, o problema Kondo ainda é bastante atrativo às pesquisas em Matéria Condensada. Em particular, uma questão ainda aberta diz respeito à chamada *nuvem Kondo*. A nuvem Kondo corresponde à região dinamicamente polarizada que se forma ao redor da impureza devido às correlações eletrônicas e ao forte acoplamento da impureza com os elétrons metálicos a baixas temperaturas. Para um sistema isotrópico infinito, a nuvem poderia ser aproximada por uma esfera de raio R_K , como mostra a figura 1.4.

Figura 1.4 – Nuvem Kondo em um sistema metálico infinito e isotrópico com a impureza localizada na origem. Fonte: elaborada pela autora.

A primeira estimativa para o raio da nuvem Kondo concluiu que esse tamanho estaria relacionado ao comprimento de coerência Kondo $\xi_K = \hbar v_F / k_B T_K$. Para os valores típicos de temperatura Kondo $T_K \sim 1K$ e velocidade de Fermi v_F observados em metais, o raio seria encontrado na escala mesoscópica com $\xi_K \sim 1\mu m$ - o que contradiria a manifestação do efeito Kondo em sistemas nanoscópicos.

Um dos principais desafios remanescentes envolvendo o efeito Kondo consiste em medir e controlar a nuvem Kondo. Igualmente importantes são o estudo da formação e evolução temporal dos estados quânticos em sistemas de impurezas e da interação entre momentos magnéticos localizados. Há ainda muito a investigar em teorias e experimentos, lançando mão de ferramentas tecnológicas que abrangem desde métodos numéricos avançados até instrumentos ultra-precisos.

Até o presente, diversos trabalhos tentaram estimar o raio da nuvem R_K através de ambas abordagens teóricas e experimentais (22–26). Entretanto, discrepâncias entre os resultados

impediram que se chegasse a um valor R_K definitivo. Uma possível explicação para tais inconclusões advém da ideia de que o raio da nuvem Kondo é o mesmo, independente da geometria.

Com o objetivo de verificar se há dependência geométrica na formação da nuvem Kondo, propomos um método para estimar R_K em uma liga metálica diluída (um metal hospedeiro com baixa concentração de impurezas) com geometria especial. Em particular, vamos considerar um metal semi-infinito na direção z com a impureza localizada a uma distância d do plano que delimita o metal. Então, estudaremos a taxa de relaxação magnética $1/T_1$ (5, 27, 28) de uma ponta de prova como função da temperatura T e da sua distância R à impureza.

Experimentalmente nossa abordagem é semelhante à reportada por Boyce e Slichter (5, 5) em 1964 em medidas de ressonância magnética. Nesse trabalho, o grupo mediu o deslocamento Knight de impurezas de ferro em um hospedeiro de cobre como função da temperatura, da distância da ponta de prova às impurezas e da concentração destas. Como resultado, eles obtiveram a seguinte relação para a polarização:

$$\chi(r, T) = f(r)g(T). \quad (1.1)$$

Além de verificarem a expressão 1.1 para o deslocamento Knight, Boyce e Slichter mostraram que a relaxação do sistema é muito pouco afetada pela distância e, assim, concluíram que não seria possível precisar qual a distância r associada ao tamanho R_K da nuvem Kondo. Contudo, uma vez que o sinal medido pela ponta de prova física decai rapidamente com a distância, esses resultados valem apenas nas proximidades das impurezas. Na prática, tais resultados não valem na escala mesoscópica, onde supostamente estaria o raio da nuvem Kondo. Caso pudéssemos simular a medida da taxa de relaxação para distâncias suficientemente grandes (sem limitações experimentais), gostaríamos de verificar se $1/T_1$ é um procedimento válido para estimar o raio da nuvem Kondo.

Nesta dissertação, propomos uma abordagem inicial para tratar esse problema computacionalmente. Em nossa formulação, o Hamiltoniano que representa a ponta de prova, denotado H_{probe} , é responsável pela transição entre estados de spin dos elétrons metálicos e da ponta de prova. Como consequência, a taxa de relaxação $1/T_1$ é uma combinação de três termos: $(1/T_1)_{sca}$, $(1/T_1)_{vet}$ e $(1/T_1)_{mat}$. A contribuição $(1/T_1)_{sca}$, que chamamos *escalar*, corresponde a uma constante de fundo, independente da temperatura. A componente $(1/T_1)_{vet}$, ou *vetorial*, diz respeito à interferência entre os estados metálicos acoplados à impureza e os estados de condução da ponta de prova. Por fim, o termo que chamamos *matricial*, denotado $(1/T_1)_{mat}$, é devido somente aos estados de condução do sistema não perturbado, ou seja,

aos estados de ondas s dos elétrons de condução ao redor da impureza.

Uma vez que nosso interesse é voltado às medidas de $1/T_1$ na região experimentalmente inacessível, vamos começar tratando de distâncias R e d tais que a ponta de prova e a impureza encontram-se longe da superfície e interagem a longo alcance. Nessa situação, a taxa $(1/T_1)_{mat}$ pode ser desprezada, pois decai rapidamente quando R aumenta. Assim, vamos analisar o comportamento da taxa $(1/T_1)_{vet}$ da contribuição vetorial.

O cálculo da taxa $1/T_1$ requer essencialmente que diagonalizemos o Hamiltoniano do sistema não-perturbado, descrito pelo Hamiltoniano de Anderson H_A . Essa tarefa é realizada através do método de Grupo de Renormalização Numérico (NRG), que nos permite obter o espectro de H_A , seus autovalores e, também, computar elementos de matriz reduzidos (conhecidos como invariantes).

Os desenvolvimentos que propomos aqui para o cálculo da taxa de relaxação podem ser generalizados para outras geometrias, incluindo também os efeitos de borda nas proximidades das superfícies metálicas. Em trabalhos futuros, estaremos interessados na taxa de relaxação associada à contribuição matricial, que tornam-se importantes quando reduzimos R progressivamente e onde os efeitos de borda não podem ser desprezados. Nesse sentido, o presente trabalho representa uma primeira contribuição para a investigação da influência da geometria à formação da nuvem Kondo.

CAPÍTULO 2

O sistema quântico

More is different.

P.W. Anderson

Quando uma impureza magnética (Fe, por exemplo) se encontra em um ambiente metálico não magnético (Au, por exemplo), surge uma interação antiferromagnética entre os elétrons do metal e os da impureza. Em torno desta, no regime de baixas temperaturas, forma-se uma região dinamicamente polarizada, tradicionalmente chamada de *nuvem de Kondo*.

A medida do tamanho da nuvem, que em primeira instância seria associada ao seu raio R_K , representa uma interessante questão que permanece indefinida no problema Kondo. Do modelo de Kondo para a resistividade em ligas com impurezas à atual fase de estudos em pontos quânticos, foram propostos diversos trabalhos buscando estimar teoricamente ou medir experimentalmente o tamanho da nuvem Kondo. Contudo, não há consenso entre os resultados obtidos, de modo que não foi possível encontrar R_K .

Um aspecto não considerado nos trabalhos precedentes é a geometria do sistema, que acreditamos afetar a formação da nuvem Kondo. Nossa proposta consiste, então, em escolher um sistema de geometria particular e verificar como esta altera alguma propriedade intrinsecamente relacionada à polarização dos spins da nuvem. Nesse sentido, estudaremos a taxa de relaxação magnética de um spin de prova imerso no sistema metálico.

O sistema que investigamos é constituído de duas partes. A primeira, ilustrada na figura 2.1, refere-se ao metal hospedeiro de geometria semi-infinita com uma impureza magnética localizada no eixo z a uma distância d do plano $z = 0$. Esse termo é descrito quanticamente pelo Hamiltoniano de Anderson.

A segunda parte do nosso sistema constitui a ponta de prova, que tratamos como uma perturbação do sistema original. Consideramos que a ponta de prova é fixa na posição $\vec{R}$, a uma distância R da impureza. Mostraremos como o Hamiltoniano da ponta de prova H_{probe} é utilizado no cálculo da taxa de relaxação magnética $1/T_1$.

Figura 2.1 – Metal hospedeiro semi-infinito na direção z com a impureza localizada à distância $\vec{d}$ do plano limitante $z = 0$. Fonte: elaborada pela autora.

Fisicamente, nossa abordagem pressupõe que a relaxação da ponta de prova seja sensível à nuvem Kondo e dependa da distância R e da temperatura T . Caso contrário, esperamos observar um comportamento equivalente ao do metal hospedeiro na ausência de impurezas.

No regime de baixas temperaturas, a nuvem Kondo pode se formar de duas formas distintas. No caso em que $R_k < d$, a nuvem consegue se formar dentro do material como se não existisse superfície - como ilustramos na figura 2.2. Neste caso, espera-se que o raio da nuvem seja dado por $\xi_K = \hbar v_F / k_B T_K$ (22), .

Figura 2.2 – Para $R_K < d$ a nuvem Kondo não há truncamento pela superfície, de modo que o comportamento esperado é o de uma nuvem com raio inversamente proporcional a T_K , como descrito em (5). Fonte: elaborada pela autora.

Por outro lado, se $R_k > d$, de modo que a nuvem é parcialmente truncada pela superfície - como ilustrado na figura 2.3 - o tamanho da nuvem ficaria dependente da geometria do sistema.

Figura 2.3 – Para $R_K > d$ a nuvem Kondo é truncada pela superfície e seu tamanho dependeria da geometria do sistema. Fonte: elaborada pela autora.

A seguir, mostraremos como cada uma das partes envolvidas no nosso sistema - o metal hospedeiro com a impureza e a ponta de prova - são representados quanticamente pelos Hamiltonianos de Anderson H_A e H_{probe} .

2.1 O Modelo de Anderson de uma impureza

O Modelo de Anderson (12) é um modelo de Hamiltoniano usado para descrever quanticamente sistemas metálicos com impurezas magnéticas diluídas. O Hamiltoniano de Anderson H_A engloba três termos, referentes à banda de condução do metal hospedeiro com elétrons não-interagentes, ao orbital da impureza localizado e à hibridização:

$$H_A = H_{cond} + H_d + H_{int}. \quad (2.1)$$

A banda de condução, de largura energética $2D$, tem densidade de estados dada por:

$$\rho = \frac{N}{2D}, \quad (2.2)$$

e é definida pelo Hamiltoniano H_{cond} :

$$H_{cond} = \sum_{\mathbf{k}\mu} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\mu}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\mu}, \quad (2.3)$$

onde $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ são as energias dos elétrons da banda com momento $\mathbf{k}$, medidas a partir do nível de Fermi, e $c_{\mathbf{k}\mu}^{\dagger}$ ($c_{\mathbf{k}\mu}$) são os operadores de criação (aniquilação) de elétrons com spin $\mu = \pm \frac{1}{2}$.

Em um metal real, a descrição dos elétrons livres da banda de condução pela eq. (2.3) corresponde a estados de onda s ou p .

A banda de condução é isotrópica ($\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_k$) e estende-se de $-D$ a D em torno de k_F . Consideramos que a relação de dispersão é aproximadamente linear, ou seja,

$$\varepsilon = \frac{v_F}{D}(k - k_F), \quad (2.4)$$

onde v_F é a velocidade associada ao nível de Fermi e k_F é o momento de Fermi.

A aproximação linear em 2.4 tem como justificativa nosso interesse em energias ($k_B T \ll \varepsilon_F$) bem menores do que a energia de Fermi. Veja a figura 2.4.

Figura 2.4 – A relação de dispersão para as energias da banda de condução no intervalo $[-D, D]$ é aproximada por uma função linear, simétrica em torno do momento de Fermi k_F .
Fonte: elaborada pela autora.

A impureza é descrita pelo Hamiltoniano H_d :

$$H_d = \sum_{\mu} \varepsilon_d c_{d\mu}^{\dagger} c_{d\mu} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}, \quad (2.5)$$

onde ε_d denota a energia da impureza no orbital d e U é a repulsão Coulombiana no nível duplamente ocupado.

O acoplamento (hibridização) é responsável pela troca de elétrons entre a banda de condução e o nível localizado na impureza. O Hamiltoniano correspondente, H_{int} , é

$$H_{int} = \sqrt{\frac{\Gamma}{\pi}} \sum_{\mathbf{k}\mu} (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{d}} c_{\mathbf{k}\mu}^{\dagger} c_{d\mu} + H.c.), \quad (2.6)$$

onde d é posição da impureza no metal hospedeiro.

As equações (2.3), (2.5) e (2.6) definem o modelo de Anderson para descrever um metal hospedeiro com uma impureza, também conhecido como *Single Impurity Anderson Model* (SIAM). Em particular, o termo de interação H_{int} descreve a repulsão - de largura finita Γ - entre os elétrons da impureza localizada e os níveis da banda de condução.

Figura 2.5 – Representação dos níveis de energia no Modelo de Anderson simétrico. Nesta situação $\varepsilon_d = -U/2$, e o estado da impureza pode assumir quatro configurações: vazia ($n_d = 0$), semi ocupada com um elétron com spin up ou down ($n_d = 1$) e cheia com dois elétrons com spins opostos ($n_d = 2$). Fonte: elaborada pela autora.

Os parâmetros energéticos U , ε_d e Γ determinam alguns limites do modelo de Anderson. Por exemplo, quando $\varepsilon_d = -U/2$ ocorre a degenerescência dos estados vazio e totalmente cheio da impureza, como ilustra a figura 2.5. Nesta situação, chamada de modelo de Anderson simétrico, o Hamiltoniano correspondente,

$$H_A^S = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k + \sqrt{\frac{\Gamma}{\pi}} \sum_k (c_k^\dagger c_d + H.c.) - \frac{U}{2} (c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\uparrow} - c_{d\downarrow}^\dagger c_{d\downarrow})^2, \quad (2.7)$$

torna-se invariante pelas trocas $c_k^\dagger \leftrightarrow c_{-k}$ e $-c_d^\dagger \leftrightarrow c_d$, dando origem à simetria partícula buraco.

Figura 2.6 – Transições virtuais da impureza no regime de acoplamento forte para o Modelo de Anderson simétrico. Níveis da banda de condução são representados em dourado, enquanto a impureza é ilustrada em prateado. **a)** Estado inicial da impureza no nível ε_d com spin up. **b)** Uma vez que adicionar um elétron não é energeticamente possível por conta do valor de U , o elétron up da impureza ocupa um estado virtual e então é substituído por um elétron do metal. **c)** Da transição virtual resulta o *flip* (inversão) de spin da impureza. Fonte: elaborada pela autora.

Quando a interação repulsiva é suficientemente grande, isto é, para $U \gg \Gamma$, o nível da impureza ε_d não pode ser encontrado com dois elétrons de spins opostos. Forma-se um spin localizado no nível da impureza e o sistema entra no regime de acoplamento antiferromagnético, no qual são permitidas transições virtuais entre os estados da banda de condução e da impureza. Nessa situação, o Hamiltoniano (2.1) reproduz exatamente o modelo de impurezas estudado por Kondo e pode ser reescrito na forma (11):

$$H_K = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k + 2J\vec{S} \cdot \sum_{k,q,\mu,\nu} c_{k\mu}^\dagger \vec{\sigma}_{\mu\nu} c_{q\nu}, \quad (2.8)$$

onde $\vec{S}$ é o spin da impureza, $\vec{\sigma}$ é o vetor composto pelas matrizes de Pauli e $J > 0$ é a

constante de acoplamento calculada como (29)

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

Por outro lado, no limite não-interagente $U \ll \Gamma$, a impureza se amalgama com a banda de condução e apenas aumenta a densidade de estados desta última. Esse limite tem pouco interesse.

Ambos os Hamiltonianos (2.1) e (2.8) permitem descrever sistemas Kondo, embutindo a física do acoplamento entre a impureza e os elétrons de condução. Contudo, há dificuldades em resolvê-los analiticamente, já que as somas sobre os momenta k estendem-se por toda a banda de condução de uma forma contínua. Para superar essa dificuldade, recorreremos ao método do Grupo de Renormalização Numérico (NRG), que nos permite diagonalizar numericamente o Hamiltoniano (2.1). Antes de derivar a expressão do Hamiltoniano passível de tratamento numérico, precisamos definir a o Hamiltoniano H_{probe} descrevendo a interação do sistema não perturbado (metal hospedeiro e a impureza magnética) com a ponta de prova.

2.2 A ponta de prova

Voltando ao Hamiltoniano (2.8), observamos que o termo proporcional a J em H_K tem dois efeitos, respectivos à parcela longitudinal (z) e às transversais (x e y). A contribuição devida a σ_z polariza antiferromagneticamente os elétrons ao redor da impureza. As parcelas proporcionais a σ_x e σ_y dão origem a processos de espalhamento que invertem, simultaneamente, os spins da impureza e do elétron de condução espalhado. Assim, este último termo faz com que o spin da impureza sofra inversões a uma taxa Ω que depende da temperatura e da polarização dos elétrons em torno da impureza.

A altas temperaturas a polarização não consegue compensar a taxa Ω . Por exemplo, na inversão do spin da impureza entre os estados $\mu = \uparrow$ e $-\mu = \downarrow$, a polarização deve trocar de sinal, passando de positiva a negativa. Contudo, isto requer que os spins de muitos elétrons de condução sejam invertidos. Na prática, estes últimos ficam eficazmente desacoplados da impureza de forma que a taxa de relaxação da impureza pode ser calculada como se não houvesse polarização.

Um efeito diferente ocorre ao resfriar o metal, pois a taxa de relaxação tende a diminuir, ou seja, porque o tempo médio de relaxação tende a aumentar. A medida em que o tempo médio

de relaxação cresce, este aos poucos se aproxima do tempo médio de inversão da polarização. Na temperatura de Kondo T_K , as taxas de relaxação da impureza e de inversão da polarização se tornam comparáveis e a polarização passa a exercer um efeito viscoso sobre a relaxação da impureza, originando, portanto, um efeito de ressonância. Dada a degenerescência dos estados $\uparrow$ e $\downarrow$ da impureza, a frequência de ressonância é nula. A largura da ressonância é determinada pela taxa de inversão da polarização e assim é da ordem de $\hbar/k_B T_K$, onde k_B é a constante de Boltzman. Para valores típicos de temperatura $T_K \sim 1K$ a largura de ressonância é aproximadamente 0.1 meV.

A inversão da polarização pode ser medida por ressonância magnética (5, 27). Para tanto, é preciso medir a relaxação magnética de um spin de prova posicionado a uma distância R da impureza. Em torno desta, a baixas temperaturas, forma-se a nuvem Kondo com extensão espacial R_K . Desse modo, esperamos que quando a ponta estiver no interior da região polarizada, ou seja, $R < R_K$, ela seja sensível à dinâmica da nuvem.

A perturbação (28) da ponta de prova no sistema não perturbado (metal e impureza) é descrita pelo Hamiltoniano H_{probe} , definido por

$$H_{probe} = -A \left[\Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{R}) \Psi_{\downarrow}(\vec{R}) I_{-} + \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{R}) \Psi_{\uparrow}(\vec{R}) I_{+} \right], \quad (2.10)$$

onde A é a interação de troca efetiva constante entre os elétrons de condução e a ponta; $\Psi_{\mu}(\vec{R}) = \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{R}} c_{k\mu}$ é o operador de campo responsável pelo aniquilamento de um elétron da ponta num sítio $\vec{R}$; $I_{-(+)}$ é o operador de spin de abaixamento (levantamento), representando o estado magnético da ponta de prova.

Na equação (2.10) a ausência do termo longitudinal $\Psi_{\mu}(R)^{\dagger} \Psi_{\mu}(R) I_z$ deve-se ao fato de que o mesmo não contribui para a troca de spin e, por conseguinte, não afeta a taxa de relaxação.

A seguir, exploraremos os conjuntos de transformações de bases quânticas que nos permitem escrever o Hamiltoniano do na eq.(2.1) de forma computável.

2.3 Base contínua

Nosso sistema é caracterizado essencialmente pelos Hamiltonianos H_A e H_{probe} , das equações (2.1) e (2.10), os quais carregam as dependências espaciais da impureza e da ponta de prova. Desse modo, antes de iniciar o procedimento do NRG, é conveniente fazer uma mu-

dança de base, de forma que o Hamiltoniano H seja escrito apenas em termos de operadores embutindo tais dependências.

Introduzimos a base contínua de operadores c_ε e d_ε que representam ondas esféricas em torno de $\vec{d}$ e $\vec{R}$, respectivamente. Como tais operadores não são ortogonais, é preciso construir uma nova base $\{c_\varepsilon, \bar{c}_\varepsilon\}$ através do método de Gram-Schmidt. Fazendo isto, seremos capazes de definir a mudança para a base $\{f_n\}$ do Grupo de Renormalização, na qual H_A pode ser numericamente tratado.

Utilizando a relação de dispersão na equação (2.4), definimos a base de operadores $\{c_\varepsilon, d_\varepsilon\}$ como combinação dos c_k :

$$c_{\varepsilon\mu} = \frac{1}{\sqrt{\rho}} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}} c_{\mathbf{k}\mu}, \quad (2.11)$$

e

$$d_{\varepsilon\mu} = \frac{1}{\sqrt{\rho}} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} c_{\mathbf{k}\mu}, \quad (2.12)$$

onde $\vec{d}$ e $\vec{R}$ são as posições da impureza e da ponta de prova, respectivamente, e ρ é a densidade de estados dada na equação (2.2).

Os operadores $c_{\varepsilon\mu}$ ($c_{\varepsilon\mu}^\dagger$) e $d_{\varepsilon\mu}$ ($d_{\varepsilon\mu}^\dagger$) atuam de modo análogo aos c_k ($c_k^\dagger$). Os $c_{\varepsilon\mu}$ aniquilam um elétron localizado em $\vec{d}$, com energia ε e spin μ , no estado de onda s do sistema não perturbado (íon de Anderson), enquanto os $d_{\varepsilon\mu}$ destroem um elétron da ponta de prova na posição $\vec{R}$. Eles obedecem às relações de comutação

$$\{c_{\varepsilon\mu}^\dagger, c_{\varepsilon'\mu'}\} = \delta(\varepsilon - \varepsilon') \delta_{\mu,\mu'}, \quad (2.13)$$

e

$$\{d_{\varepsilon\mu}^\dagger, d_{\varepsilon'\mu'}\} = \delta(\varepsilon - \varepsilon') \delta_{\mu,\mu'}. \quad (2.14)$$

Os operadores c_ε e d_ε não são ortogonais, pois seu comutador é

$$\{c_{\varepsilon\mu}^\dagger, d_{\varepsilon'\mu'}\} = \frac{\sin(k|\vec{R} - \vec{d}|)}{k|\vec{R} - \vec{d}|} \delta(\varepsilon - \varepsilon') \delta_{\mu,\mu'}. \quad (2.15)$$

Assim, deveremos encontrar uma base de operadores ortogonais entre si para reescrever o Hamiltoniano total do sistema nesta nova base. Para isso, aplicamos o método de Gram-Schmidt (28) para definir o operador $\bar{c}_\varepsilon$ ortogonal a c_ε , dado por

$$\bar{c}_{\varepsilon\mu} = \frac{1}{\sqrt{1 - W^2}} (d_{\varepsilon\mu} - W(\varepsilon, R) c_{\varepsilon\mu}), \quad (2.16)$$

onde

$$W(\varepsilon, R) = \frac{\sin(kR)}{kR}, \quad (2.17)$$

com $R = |\vec{R} - \vec{d}|$ sendo a distância entre a impureza e a ponta de prova e

$$kR = k_F R \left(1 + \frac{\varepsilon}{D}\right). \quad (2.18)$$

A equação (2.18) define k como função explícita das energias, sem a aproximação $k = k_F$. Somente podemos desprezar o segundo termo entre os parênteses à direita na equação (2.18) quando o produto $k_F R \varepsilon / D$ for muito menor do que a unidade, porque as funções trigonométricas de kR dependem apenas de $kR \bmod \pi$, que é da ordem da unidade.

Não podemos desprezar o valor efetivo de k , pois as oscilações da função $\sin(k|\vec{R} - \vec{d}|)$ têm efeito apreciável mesmo quando seu argumento varia muito pouco, isto é, quando ($k \ll k_F$). Isto ficará mais claro no Capítulo 4, onde mostraremos como a adoção de $k(\varepsilon)$ é importante para o cálculo da taxa de relaxação.

Podemos agora reescrever os Hamiltonianos (2.3) e (2.6) na base $\{c_\varepsilon, \bar{c}_\varepsilon\}$. O Hamiltoniano de condução H_{cond} na eq. (2.3) fica expresso em termos de autoestados que representam ondas s esféricas com centros de simetria situados no íon de Anderson (H_c)

$$H_c = \int_{-D}^D d\varepsilon \varepsilon c_{\varepsilon\mu}^\dagger c_{\varepsilon\mu}, \quad (2.19)$$

e na ponta de prova ($H_{\bar{c}}$)

$$\bar{H}_c = \int_{-D}^D d\varepsilon \varepsilon \bar{c}_{\varepsilon\mu}^\dagger \bar{c}_{\varepsilon\mu}. \quad (2.20)$$

Segue que o Hamiltoniano da banda de condução recebe ambas as contribuições (2.19) e (2.20), ou seja,

$$H_{cond} = \int_{-D}^D d\varepsilon \varepsilon (c_{\varepsilon\mu}^\dagger c_{\varepsilon\mu} + \bar{c}_{\varepsilon\mu}^\dagger \bar{c}_{\varepsilon\mu}). \quad (2.21)$$

O Hamiltoniano de hibridização fica escrito como:

$$H_{int} = \sqrt{\frac{\Gamma}{\pi}} \int_{-D}^D d\varepsilon (c_\varepsilon^\dagger c_d + c_d^\dagger c_\varepsilon). \quad (2.22)$$

Finalmente, o Hamiltoniano da ponta de prova na eq. (2.10) toma a forma

$$\begin{aligned}
H_{probe} = & -A \left[\int \int_{-D}^D d\varepsilon d\varepsilon' \sqrt{1-W(\varepsilon, R)} \sqrt{1-W(\varepsilon', R)} \bar{c}_{\varepsilon\mu}^\dagger \bar{c}_{\varepsilon'\nu} \right. \\
& + \int \int_{-D}^D d\varepsilon d\varepsilon' \sqrt{1-W(\varepsilon, R)} W(\varepsilon', R) \bar{c}_{\varepsilon\mu}^\dagger c_{\varepsilon'\nu} \\
& + \int \int_{-D}^D d\varepsilon d\varepsilon' W(\varepsilon, R) \sqrt{1-W(\varepsilon', R)} c_{\varepsilon\mu}^\dagger \bar{c}_{\varepsilon'\nu} \\
& \left. + \int \int_{-D}^D d\varepsilon d\varepsilon' W(\varepsilon, R) W(\varepsilon', R) c_{\varepsilon\mu}^\dagger c_{\varepsilon'\nu} \right] \mathbf{I}_- + H.c., \quad (2.23)
\end{aligned}$$

onde $W(\varepsilon, R)$ é dado em (2.17) e $\nu = -\mu$.

Para facilitar a manipulação do Hamiltoniano H_{probe} definido em (2.23), vamos definir os operadores $\phi_\mu(R)$ and $\Phi_{0\mu}(R)$ como combinações dos c_ε e $\bar{c}_\varepsilon$. Então,

$$\phi_\mu(R) \equiv \int_{-D}^D d\varepsilon W(\varepsilon, R) c_{\varepsilon\mu}, \quad (2.24)$$

e

$$\Phi_{0\mu}(R) \equiv \int_{-D}^D d\varepsilon \sqrt{1-W(\varepsilon, R)} \bar{c}_{\varepsilon\mu}, \quad (2.25)$$

de modo que a equação (2.23) fica reescrita como

$$H_{probe} = -A \left[\Phi_{0\uparrow}^\dagger \Phi_{0\downarrow} + \phi_\uparrow^\dagger \phi_\downarrow + (\Phi_{0\uparrow}^\dagger \phi_\downarrow + \phi_\uparrow^\dagger \Phi_{0\downarrow}) \right] \mathbf{I}_- + H.c.. \quad (2.26)$$

As relações (2.24) e (2.25) separam os estados $|\psi\rangle$ do Hamiltoniano de Anderson H_A , dado por

$$H_A = \int_{-D}^D \varepsilon c_{\varepsilon\mu}^\dagger c_{\varepsilon\mu} d\varepsilon + \sqrt{\frac{\Gamma}{\pi}} \int_{-D}^D d\varepsilon (c_\varepsilon^\dagger c_d + c_d^\dagger c_\varepsilon) + H_d, \quad (2.27)$$

dos estados $|\bar{\psi}\rangle$ de $\bar{H}_c$.

Assim, o sistema compreendendo o metal e a impureza não-perturbados e a ponta de prova é representado pelo Hamiltoniano

$$\tilde{H} = H_A + \bar{H}_c, \quad (2.28)$$

cujos autoestados são desacoplados, ou seja,

$$|\Psi\rangle = |\psi\rangle|\bar{\psi}\rangle, \quad (2.29)$$

e, portanto, os autovalores podem ser separados em contribuições independentes

$$E_\Psi = E_\psi + \bar{E}_{\bar{\psi}}. \quad (2.30)$$

A relação (2.29) mostra que os $\bar{c}_\varepsilon$ são desacoplados da impureza. Desse modo, podemos tratar o operador $\Phi_{0\mu}(R)$, apresentado na equação (2.25), perturbativamente. Por sua vez, a definição de $\phi_\mu(R)$ em (2.24) deve ser projetada na base $\{f_n\}$ do Grupo de Renormalização Numérico - o que mostraremos no capítulo 4.

Com o Hamiltoniano (2.27) definido na base contínua $\{c_\varepsilon\}$, encerramos o tratamento puramente analítico do nosso sistema quântico não-perturbado. A seguir, no capítulo 3, introduzimos os fundamentos do Grupo de Renormalização através dos quais é possível transformar $\tilde{H}$ em uma forma numericamente solúvel.

CAPÍTULO 3

O Grupo de Renormalização numérico

Physicists like to think that all you have
to do is say, these are the conditions,
now what happens next?

Richard P. Feynman

O Grupo de Renormalização Numérico (NRG) (10, 11, 30) consiste em um método desenvolvido por Wilson (10) na década de 70 na tentativa de tratar sistemas quânticos de muitos corpos com impurezas. Originalmente utilizada no problema Kondo, a técnica de Wilson obteve grande avanço, uma vez que as tentativas analíticas outrora elaboradas para resolver o problema perturbativamente falhavam para baixas energias e, por conseguinte, não contemplavam a escala típica de baixas temperaturas. Em particular, o NRG obteve resultados promissores no cálculo de observáveis físicos - como susceptibilidade magnética e calor específico - em todo o limite de temperaturas de interesse do efeito Kondo (regimes de momento local e acoplamento forte, a altas e baixas temperaturas, respectivamente). Mais tarde, o sucesso do método foi comprovado por Krishna-murthy (11) no modelo de Anderson (12) com uma impureza. Assim, não tardou para que o NRG rendesse a Wilson o Prêmio Nobel (em 1982).

Os conceitos de renormalização, pontos fixos e fluxo iterativos, hoje bastante conhecidos na teoria da Matéria Condensada são ingredientes essenciais do Grupo de Renormalização Numérico. Aplicações recentes do método incluem a diagonalização do Hamiltoniano de diversos modelos de metais com impurezas e ligas diluídas, bem como o cálculo de propriedades de excitação e transporte e correlações espaciais.

Ao longo deste capítulo, apresentaremos os fundamentos do Grupo de Renormalização Numérico e mostraremos como ele será utilizado no nosso problema da medida da nuvem Kondo.

3.1 Da Teoria de Renormalização ao Grupo de Renormalização Numérico

O Grupo de Renormalização Numérico remete à Teoria de Renormalização devida aos trabalhos de Bethe, Shwinger, Tomonaga, Feynman e Dyson (31–39) para eliminar as divergências em Eletrodinâmica Quântica. O Grupo de Renormalização (RG) foi o passo inicial nas técnicas voltadas ao cálculo do limite estatístico do contínuo em uma teoria local, caracterizado pela ausência de um comprimento característico ξ e de escalas de tempo. Contudo, o RG aplicava-se somente a problemas passíveis de expansão por diagramas de Feynman, ao mesmo tempo que a física no limite do contínuo não era palpável por este método.

A ideia básica do Grupo de Renormalização consiste na existência de um acoplamento local entre várias escalas de comprimento ou de energia (10), de modo que flutuações entre comprimentos (energias) intermediários tendem a ser idênticos a menos de um fator de escala. A medida que consideramos escalas de energia cada vez mais baixas, é produzido um efeito cascata, pois cada pequena mudança em um dado passo afeta todos os demais. A primeira etapa do RG consiste na determinação de um passo particular (isto é, uma escala de energia) da cascata, a partir do qual serão definidos os demais passos (iterações) para a solução do problema de interesse. Nesse processo, a cada iteração é associado um Hamiltoniano $\mathcal{H}_N$ representando uma interação efetiva no sistema e acessando as escalas energéticas que ainda não foram resolvidas. Nas próximas iterações, os Hamiltonianos $\mathcal{H}_{N+1}$ são construídos através de uma transformação de renormalização do Hamiltoniano da iteração precedente $\mathcal{H}_N$.

A possibilidade do RG de trabalhar a solução de um sistema iterativamente é bastante atrativa ao tratamento numérico. Para tanto, basta elaborar um conjunto de transformações de renormalização dispensando o uso de diagramas de Feynman e capaz de ser implementada em forma de algoritmo em um programa de computador.

À época em que Wilson propôs o NRG, o estudo perturbativo de sistemas quânticos com impurezas era barrado por divergências no limite de baixas temperaturas - o acoplamento spin-spin entre a impureza e a banda de condução apresentava uma divergência no termo quadrático $J^2 \ln(D/kT)$ no limite $T \rightarrow 0$. Desse modo, a análise de sistemas quânticos com impurezas requeria o desenvolvimento de um método válido simultaneamente para altas energias (graus de liberdade quasi-contínuos do ambiente) e baixíssimas energias de excitação (acoplamento forte da impureza com o restante do sistema). A escolha dos intervalos de energia que caracterizam o sistema na transição entre estes dois regimes deveria permitir o estudo da física contida nos subintervalos energéticos, preservando o limite do contínuo de

estados.

Nesse contexto, o desafio de resolver o problema Kondo aproveitando o potencial numérico oferecido pelo Grupo de Renormalização foi a motivação para o Grupo de Renormalização Numérico concebido por Kenneth Wilson (40). A solução do problema Kondo apresentada por Wilson (10) foi o primeiro exemplo de implementação de um programa de NRG capaz de incorporar aspectos quantitativos e qualitativos importantes, outrora considerados impossíveis de serem derivados pelas teorias vigentes. O NRG trazia não somente resultados satisfatórios, como também a possibilidade de controlar a precisão dos cálculos, alcançava o valor de até 1% para sistemas Kondo mais simples (10).

A seguir, apresentaremos a definição formal do Grupo de Renormalização seguido pelas bases do Grupo de Renormalização Numérico aplicado por Wilson ao efeito Kondo.

3.2 O Grupo de Renormalização

O Grupo de Renormalização é uma transformação τ que leva o Hamiltoniano $\mathcal{H}(\mathbf{K})$ especificado pelo conjunto de parâmetros $\mathbf{K} = (K_1, K_2, \dots)$ em um novo Hamiltoniano $\mathcal{H}(\mathbf{K}')$ com um novo conjunto de parâmetros $\mathbf{K}' = (K'_1, K'_2, \dots)$, isto é,

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

ou, equivalentemente,

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

O Hamiltoniano $\mathcal{H}(\mathbf{K})$ representa uma interação efetiva do sistema para uma dada escala energética. Por sua vez, o Hamiltoniano $\mathcal{H}(\mathbf{K}')$ corresponde a esta interação em uma escala reduzida. Por conseguinte, deve haver uma razão entre as escalas acessadas por transformações τ sucessivas, que pode ser caracterizada por um parâmetro Λ . Assim, a sequência

$$\mathbf{K}' = \tau_\Lambda(\mathbf{K}), \quad \mathbf{K}'' = \tau_\Lambda(\mathbf{K}'), \quad \mathbf{K}''' = \tau_\Lambda(\mathbf{K}''), \quad \text{etc.} \quad (3.3)$$

dá origem a uma sequência de pontos que, quando Λ é uma variável contínua, torna-se uma trajetória no espaço de parâmetros $\mathbf{K}$. A transformação τ_Λ , em geral não-linear e não-inversível, constitui um semi-grupo satisfazendo a propriedade

$$\tau_{\Lambda'}\{\tau_\Lambda(\mathbf{K}')\} = \tau_{\Lambda'\Lambda}(\mathbf{K}). \quad (3.4)$$

Uma importante característica de uma transformação $\tau_\Lambda(\mathbf{K})$ do RG consiste na existência de pontos $\mathbf{K}^*$ para os quais vale

$$\tau_\Lambda(\mathbf{K}^*) = \mathbf{K}^*, \quad (3.5)$$

ou seja, a atuação de τ_Λ sobre $\mathbf{K}^*$ o deixa invariante.

Pontos do tipo $\mathbf{K}^*$ satisfazendo (3.5) são denotados *pontos fixos* e são especiais por trazerem inúmeras vantagens analíticas. A principal delas, diz respeito à possibilidade de linearizar a transformação τ nas proximidades do ponto fixo $\mathbf{K}^*$. Desse modo, dado um ponto $\mathbf{K} = \mathbf{K}^* + \delta\mathbf{K}$ na vizinhança de $\mathbf{K}^*$, podemos fazer a seguinte expansão:

$$\tau_\Lambda\{\mathbf{K}\} = \mathbf{K}^* + \mathbf{L}_\Lambda^* \delta\mathbf{K} + O(\delta K^2), \quad (3.6)$$

onde $\mathbf{L}_\Lambda^*$ é uma transformação linear qualquer.

Na seção subsequente mostaremos como os fundamentos do Grupo de Renormalização foram utilizados por Wilson na formulação do Grupo de Renormalização Numérico aplicado ao efeito Kondo.

3.3 O Grupo de Renormalização Numérico no Problema Kondo

Como mencionamos, o NRG proposto por Wilson (10) foi a primeira abordagem teórica que obteve sucesso na solução do problema Kondo. Diversos trabalhos precedentes foram devotados ao estudo de metais com impurezas magnéticas no limite de baixas temperaturas. Buscava-se não apenas a confluência entre os resultados teóricos e experimentais, mas também a possibilidade de prever e comparar o comportamento destes sistemas para $T \rightarrow 0$. Particularmente, o NRG devido a Wilson foi uma continuação dos desenvolvimentos de RG derivados em trabalhos precedentes (41–44), cujos principais resultados mostravam-se válidos somente para altas temperaturas.

A essência do NRG de Wilson no problema Kondo consiste em transformar o Hamiltoniano de Kondo de tal modo que ele seja solúvel numericamente. Na prática, isso equivale a reescrever o Hamiltoniano de Kondo em uma base de estados apropriada e desenvolvê-lo iterativamente a partir de uma transformação de renormalização, como em (3.1). Para tanto, a banda de condução é associada a uma base infinita de estados discretos, denominada *base de Kondo*, distribuídos ao redor da impureza de acordo com o parâmetro Λ . Pictoricamente, podemos

ilustrar estes estados por meio cascas concêntricas ao redor da impureza, como mostra a figura 3.1.

Figura 3.1 – Cascas concêntricas em torno da impureza representando os estados na base Kondo.
Fonte: WILSON, K. G. (10).

Uma vez definida a base discreta referente à banda de condução, a solução iterativa do Hamiltoniano pode ser obtida através da adição sucessiva de estados da base de Kondo ao estado da impureza: na iteração inicial, resolvemos um sistema que equivale à impureza acoplada com o primeiro estado da banda de condução; na próxima iteração, adicionamos os segundos estados da banda de condução e resolvemos o Hamiltoniano para a combinação desses estados com os primeiros e com a impureza; nas próximas iterações, adicionamos o terceiro estado, seguido pelo quarto estado, e assim sucessivamente.

Obviamente, o tratamento numérico do problema exige um limite para o número máximo de iterações a serem processadas. Ao mesmo tempo, o aumento do número de estados e suas combinações ao longo das iterações torna a computação cara em tempo e memória. Ambas limitações podem ser solucionadas através de truncamentos: o número de iterações

fica condicionado ao *corte infravermelho* associado à escala térmica de interesse, ao passo que o número de estados em cada iteração fica limitado pela *energia ultravioleta*.

Em suma, a técnica NRG para o problema Kondo pode ser resumida nas etapas a seguir:

1. Discretização da banda de condução em escala logarítmica, definida por um parâmetro adimensional Λ .
2. Mudança de base para obtenção de uma cadeia infinita representando a banda discretizada. Normalmente, esta etapa é guiada por uma *Transformação de Lanczos* (45) que gera, por recorrência, uma base $\{f_n\}$ com f_0 sendo o operador que representa a semente da transformação.
3. Truncamento da cadeia infinita que define o Hamiltoniano, limitando o número máximo de iterações a um valor inteiro N tal que os coeficientes da escala de energia da banda de condução $\mathcal{E}(\Lambda, N)$ são bem menores do que $k_B T/D$.
4. Diagonalização iterativa do Hamiltoniano do sistema. Uma vez diagonalizado o Hamiltoniano H_{N-1} , descartam-se os autoestados com energias muito superiores a $k_B T$, projeta-se o Hamiltoniano H_N na base de autovetores remanescentes e diagonaliza-se a matriz resultante. A cada iteração, resulta o espectro e os autovetores necessários para se calcular observáveis físicos.

Nas próximas seções, exploraremos cada uma dessas etapas, detalhando sua motivação e justificando as aproximações.

3.4 Discretização da banda de condução

O passo inicial para a solução do problema Kondo via NRG consiste em representar o Hamiltoniano de Kondo em uma base quântica capaz de reproduzir numericamente o espectro contínuo associado à banda de condução e que, ao mesmo tempo, permita acessar todas as escalas energéticas de interesse. Em outras palavras, devemos *discretizar* a banda de condução de modo que cada estado da base seja associado a um intervalo energético com escala definida.

Em princípio, poderíamos ser tentados a dividir a banda de condução em uma escala linear, porém esta escolha nos levaria a introduzir energias características que não existem no sistema, além de limitar o cálculo para temperaturas T , tal que $k_B T \gg \Delta$, onde Δ é o espaçamento entre os intervalos energéticos definidos pela discretização linear.

A escolha da discretização logarítmica é conveniente neste tipo de problema, pois no cálculo de muitas propriedades físicas do sistema aparecem integrais da energia da forma

$$\int_{E_0}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon}, \quad (3.7)$$

cujo resultado $\ln(\varepsilon)$, diverge no limite superior.

Com a discretização logarítmica, a banda de condução pode ser representada por uma cadeia infinita de estados, ao passo que a interação entre a impureza e os elétrons do metal é feita pelo acoplamento com um único estado. Mais detalhes na seção 3.5, equação (3.23). Em termos práticos, a divisão logarítmica permite alcançar escalas de energias tão pequenas quanto se queira, separando altas de baixas energias. Em termos computacionais, sua principal vantagem diz respeito ao número de intervalos necessários para se atingir valores típicos de energia do sistema, que na escolha da escala linear pode chegar a 4^{10^6} !

A discretização logarítmica é feita dividindo o intervalo energético da banda de condução $[-D, D]$ em subintervalos modelados por um parâmetro adimensional $\Lambda > 1$, que é a razão entre duas energias discretas sucessivas. Dada uma energia ε_k no Hamiltoniano da banda de condução, sempre podemos encontrar $\varepsilon'_k = \varepsilon_k/\Lambda$ tal que a divisão resulta em intervalos energéticos definidos por

$$\mathcal{J}_{m\pm} = [D\Lambda^{-m-1}, D\Lambda^{-m}] \quad (m = 0, 1, 2, \dots), \quad (3.8)$$

de tamanho $d_m = D\Lambda^{-m}(1 - \Lambda^{-1})$ entre $[-D, D]$. Note que $\mathcal{J}_{m\pm} \rightarrow \mathcal{J}_{m+1\pm}$ é invariante sobre a transformação de escala $\varepsilon_k \rightarrow \varepsilon_k/\Lambda$. $\forall$

A equação (3.8) determina uma sequência de intervalos $\mathcal{J}_m$ tais que a razão entre intervalos sucessivos é Λ . Esse processo dá origem à discretização logarítmica da banda de condução ilustrado na figura 3.2.

Figura 3.2 – A banda de condução é discretizada em escala logarítmica, definida por um parâmetro adimensional Λ . Fonte: elaborada pela autora.

Uma vez definidos os intervalos energéticos discretizando a banda de condução, prosseguimos com o método NRG construindo a base de operadores fermiônicos $\{a_m, b_m\}$ associados aos intervalos $\mathcal{I}_{m\pm}$ e apresentando o conjunto de transformações para a base de Kondo $\{f_n\}$ na qual a o Hamiltoniano H_A é solúvel numericamente.

3.5 Mudança de base e Transformação de Lanczos

Dentro de cada um dos intervalos $\mathcal{I}_{m\pm}$ apresentados em (3.8), definimos o conjunto de operadores fermiônicos $a_{m\mu}(b_{m\mu})$ e $\bar{a}_{m\mu}(\bar{b}_{m\mu}^\dagger)$ como combinações dos $c_{\varepsilon\mu}$. Não é necessário discretizar os $\bar{c}_\varepsilon$: eles serão tratados analiticamente* no cálculo da taxa $1/T_1$. Segue que

$$a_{m\mu} = \frac{\Lambda^{m/2}}{\sqrt{D(1-\Lambda^{-1})}} \int_{\mathcal{I}_{m+}} c_{\varepsilon\mu} d\varepsilon, \quad (3.9)$$

$$b_{m\mu} = \frac{\Lambda^{m/2}}{\sqrt{D(1-\Lambda^{-1})}} \int_{\mathcal{I}_{m-}} c_{\varepsilon\mu} d\varepsilon, \quad (3.10)$$

Na base $\{a_m, b_m\}$, o Hamiltoniano da banda de condução em (2.3) fica expresso na forma

$$H_{cond} = \sum_{m\pm} \mathcal{E}_{m\pm}(\Lambda) (a_{m\mu}^\dagger a_{m\mu} - b_{m\mu}^\dagger b_{m\mu}), \quad (3.11)$$

onde as energias $\mathcal{E}_{m\pm}$ são calculadas como

$$\mathcal{E}_{m\pm}(\Lambda) = \frac{\int_{\mathcal{I}_{m\pm}} d\varepsilon}{\int_{\mathcal{I}_{m\pm}} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon}} = \pm \frac{D(1-\Lambda^{-1})}{\log \Lambda} \Lambda^{-m}, \quad (3.12)$$

onde utilizamos a expressão de Vivaldo (46, 47) derivada na formulação generalizada do NRG.

Cada energia $\mathcal{E}_{m\pm}(\Lambda)$ corresponde à média da energia cinética dos elétrons livres dentro do intervalo $\mathcal{I}_{m\pm}$.

Agora, a partir da base $\{a_{m\mu}, b_{m\mu}\}$, vamos construir a base ortogonal $\{f_n\}$ na qual o Hamiltoniano Kondo será resolvido via NRG. Para tanto, definimos os operadores f_n como sendo combinações dos a_m e b_m com os respectivos coeficientes u_{nm} e v_{nm} sendo transformações ortogonais. Matematicamente, escrevemos

$$f_{n\mu} = \sum_m (u_{nm} a_{m\mu} + v_{nm} b_{m\mu}), \quad (3.13)$$

*Mais detalhes no Capítulo 4.

valendo as transformações inversas:

$$a_{m\mu} = \sum_n u_{nm} f_{n\mu}, \quad (3.14)$$

$$b_{m\mu} = \sum_n v_{nm} f_{n\mu}, \quad (3.15)$$

A base $\{f_n\}$ deve satisfazer as seguintes relações exigidas pela ortogonalidade:

$$\sum_n u_{nm} u_{nm'} = \delta_{m,m'}, \quad (3.16)$$

$$\sum_n u_{nm} v_{nm'} = 0, \quad (3.17)$$

$$\sum_n v_{nm} v_{nm'} = \delta_{m,m'}, \quad (3.18)$$

$$\sum_m u_{nm} u_{n'm} + v_{nm} v_{n'm} = \delta_{n,n'}, \quad (3.19)$$

$$v_{nm} = (-1)^n u_{nm}. \quad (3.20)$$

Vamos também definir o operador f_0 :

$$f_{0\mu} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_m \alpha_m (a_{m\mu} + b_{m\mu}), \quad (3.21)$$

onde

$$\alpha_m = \left(\frac{1 - \Lambda^{-1}}{D} \right)^{1/2} \Lambda^{-m/2}. \quad (3.22)$$

Então, usando a eq. (3.21), o acoplamento entre a impureza e a banda de condução, descrito pelo Hamiltoniano (2.6), pode ser reescrito como

$$H_{int} = \sqrt{2}V \left(c_d^\dagger f_0 + f_0^\dagger c_d \right). \quad (3.23)$$

Portanto, no Hamiltoniano de interação (3.23), a impureza se acopla com um único estado da base f_0 , resultando em um termo que não é afetado pela discretização.

Usando a transformação de Lanczos (45), admitimos que cada operador $f_{n\mu}$ se acopla

com $f_{n\pm 1\mu}$. Então, H_{cond} em (3.11) fica escrito na base $\{f_n\}$ como

$$H_{cond} = \sum_{n=0}^{\infty} t_n (f_n^\dagger f_{n+1} + f_{n+1}^\dagger f_n), \quad (3.24)$$

onde os coeficientes energéticos t_n são dados por (11)

$$t_n = D\Lambda^{-n/2} \frac{1 - \Lambda^{-(n+1)}}{\sqrt{1 - \Lambda^{-(2n+3)}} \sqrt{1 - \Lambda^{-(2n+1)}}} \frac{1 + \Lambda^{-1}}{\log \Lambda}, \quad (3.25)$$

Para n suficientemente grande, os coeficientes t_n da última equação (3.25) comportam-se assintoticamente como

$$t_n \approx \mathcal{D}_n = D \frac{1 - \Lambda^{-1}}{\log \Lambda} \Lambda^{-n/2}, \quad (3.26)$$

com erro $O(\Lambda^{-n})$.

Expandindo a soma do Hamiltoniano (3.24), é possível determinar os coeficientes $u_{n,m}$ e $v_{n,m}$ da transformação (3.13). Em particular, para $n = 0$, comparando as relações (3.21) e (3.24), estes coeficientes são definidos pela relação

$$u_{0m} = v_{0m} = D \left(\frac{1 - \Lambda^{-1}}{\log \Lambda} \right)^{1/2} \Lambda^{-m/2}. \quad (3.27)$$

Para $n = 1$, substituímos (3.27) para encontrar os u_{1m} and v_{1m} , de modo que

$$u_{1m} = -v_{1m} = D \left(\frac{1 - \Lambda^{-3}}{\log \Lambda} \right)^{1/2} \Lambda^{-3m/2}. \quad (3.28)$$

As equações (3.24), (3.27) e (3.28) indicam uma relação de recorrência envolvendo os u_{1m} e os u_{0m} . Em geral, podemos expandir a soma em H_{cond} até $N + 1$ e compará-la com a soma expandida até N . Coletando os termos u_{nm} , u_{n+1m} e u_{n-1m} , é possível generalizar a recorrência para todos os elementos da cadeia, ou seja,

$$t_{n-1}u_{n-1,m} + t_n u_{n+1,m} = \mathcal{D}_{2m} u_{nm}, \quad (3.29)$$

$$t_{n-1}v_{n-1,m} + t_n v_{n+1,m} = -\mathcal{D}_{2m} v_{nm}. \quad (3.30)$$

O Hamiltoniano na eq. (3.24) é conhecido como Hamiltoniano de "hopping", uma vez que o acoplamento de cada operador f_n com f_{n+1} é análogo a uma troca (ou "pulo") de elétrons entre sítios vizinhos, como ilustra a figura 3.3. Esse Hamiltoniano não contém termos diagonais $f_n^\dagger f_n$, pois a energia média de um estado criado pelo operador f_n será a energia de Fermi, que já foi descontada.

Figura 3.3 – Representação do hopping de elétrons entre os sítios f_n da banda de condução. Cada elétron em um sítio f_n pode ser transferido para um sítio f_{n+1} e vice-versa. Fonte: elaborada pela autora.

Finalmente, juntamos as equações (2.5), (3.23) e (3.24) para escrever o Hamiltoniano (2.1) na base discreta $\{f_n, c_d\}$, isto é,

$$H = \sum_{n=0}^{\infty} t_n (f_n^\dagger f_{n+1} + H.c.) + \sqrt{2}V(c_d^\dagger f_0 + H.c.) + H_d. \quad (3.31)$$

Com a equação (3.31), conseguimos obter uma expressão para o Hamiltoniano que resolve a questão da discretização. Contudo, o Hamiltoniano H_A na base $\{f_n, c_d\}$ ainda não é numericamente tratável, pois embute somas infinitas nos termos em f_n e f_0 - veja as eqs.(3.24) e (3.21). Para superar esta dificuldade devemos truncar a série infinita que aparece na eq. (3.24), preservando o termo de acoplamento.

Uma vez que os coeficientes t_n em (3.24) e α_m em (3.21) decaem exponencialmente com n , poderíamos ser tentados a truncar ambas as somas em (3.24) e (3.21). Entretanto, isto afetaria o operador f_0 e tornaria a precisão do cálculo dependente da magnitude de V multiplicando f_0 . Truncando somente a soma da equação (3.24), o acoplamento é preservado.

Dada uma energia térmica $k_B T$, onde k_B é a constante de Boltzman, e um parâmetro adimensional $\gamma \ll 1$, podemos limitar a soma infinita em (3.24). O Hamiltoniano H_{cond} truncado torna-se

$$H_{cond}^{trunc} = \sum_{n=0}^{N-1} t_n (f_n^\dagger f_{n+1} + f_{n+1}^\dagger f_n), \quad (3.32)$$

onde N é o mínimo inteiro satisfazendo

$$t_N < \gamma k_B T. \quad (3.33)$$

Tendo determinado o número máximo de iterações com a condição (3.33), vamos obter a transformação de renormalização para a solução do problema Kondo.

É conveniente escalar o Hamiltoniano de tal modo que o menor autovalor proveniente da diagonalização seja da ordem da unidade, isto é,

$$H_N = \frac{1}{\mathcal{D}_N} \left(\sum_{n=0}^{N-1} t_n (f_n^\dagger f_{n+1} + H.c.) + \sqrt{2}V(c_d^\dagger f_0 + H.c.) + H_d \right), \quad (3.34)$$

onde $\mathcal{D}_N$ é dado em (3.26).

A equação (3.34) define uma transformação de Grupo de Renormalização, ou seja, ela constitui uma transformação que adiciona progressivamente escalas de energia cada vez menores ao Hamiltoniano, tal que as menores energias são da ordem da unidade. Se denotarmos esta transformação por τ , segue que

$$\tau[H_{N-1}] \equiv H_N = \sqrt{\Lambda} H_{N-1} + \frac{t_{N-1}}{\mathcal{D}_N} (f_{N-1}^\dagger f_N + H.c.). \quad (3.35)$$

Por meio da transformação τ em (3.35), podemos construir o ciclo iterativo para a diagonalização do Hamiltoniano de Kondo.

3.6 Diagonalização iterativa

Podemos interpretar fisicamente o Hamiltoniano H_N como um conjunto de $N + 1$ sítios, tal que cada sítio pode conter nenhum, um ou dois elétrons. Portanto, cada iteração possui 2^{2N+4} estados de muitos corpos.

Ao adicionar sítios e elétrons, modificamos a carga e o spin do sistema. Uma vez que a projeção (3.34) do Hamiltoniano na base $\{f_n, c_d\}$ conserva carga e spin, podemos escrever os operadores Q e S associados nessa base como

$$Q = (c_d^\dagger c_d - 1/2) + \sum_{n=0}^N (f_n^\dagger f_n - 1/2), \quad (3.36)$$

e

$$\vec{S} = \frac{1}{2} \left(c_{d\mu}^\dagger \vec{\sigma}_{\mu\nu} c_{d\nu} + \sum_{n=0}^N f_{n\mu}^\dagger \vec{\sigma}^{\mu\nu} f_{n\nu} \right), \quad (3.37)$$

onde $\sigma_i (i = x, y, z)$ são as matrizes de Pauli.

Uma observação importante com respeito à carga medida pelo operador Q é que os valores que ela assume estão no intervalo $[-(N+2), +(N+2)]$. Assim, atribuímos a carga mínima ao estado com 0 elétrons e a carga máxima ao estado com o máximo número de elétrons possível para uma dada iteração (que é $2N+4$ na N -ésima iteração). Por exemplo, na iteração $N = -1$, os possíveis valores de carga dos estados da impureza são $q \in \{-1, 0, 1\}$, na iteração $N = 0$ são $q \in \{-2, -1, 0, 1, 2\}$, na iteração $N = 1$ são $q \in \{-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3\}$, etc.

Dadas as leis de conservação do sistema, é natural representarmos o Hamiltoniano na base de autoestados simultâneos dos operadores Q , S e S_z . O uso da base $\{|Q, S, S_z\rangle\}$ é

conveniente, pois a projeção do Hamiltoniano nos estados da base é uma matriz diagonal por blocos. Cada bloco contém $p_{max} < N$ estados $|Q, S, S_z, p\rangle$ ($r = 1, \dots, p_{max}$) de mesma carga, spin e componente z do spin, de modo que seus autovalores e autovetores podem ser facilmente computados através das rotinas tradicionais de diagonalização.

Para ilustrar esta ideia, imagine que estamos na iteração $N = -1$. Nesta situação, temos um único sítio c_d que representa a impureza e os 4 estados que ela pode ter, como mostra a figura 3.4.

Obter a iteração $N = 0$ a partir da iteração $N = -1$ significa acrescentar o sítio f_0 ao sítio c_d e gerar todas as configurações eletrônicas possíveis para estes dois sítios que obedecem ao Princípio de Exclusão de Pauli e às regras de soma de spins. Veja a Figura 3.5.

Figura 3.4 – Representação dos 4 estados de muitos corpos na iteração $N = -1$. Há apenas o sítio da impureza com quatro possíveis configurações eletrônicas: cada estado $|0\rangle$, $c_{d\uparrow}^\dagger |0\rangle$, $c_{d\downarrow}^\dagger |0\rangle$ and $c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\downarrow}^\dagger |0\rangle$ pode ter, respectivamente, 0 elétrons, 1 elétron com spin up, um elétron com spin down, ou dois elétrons com spins opostos. Fonte: elaborada pela autora.

Outra simplificação que pode ser feita é aproveitar a simetria em S_z para economizar no cálculo de energias degeneradas, já que estados de mesma carga Q e mesmo spin S , diferindo apenas pelo sinal de S_z , são degenerados. Assim, estados com cargas e spins iguais formam subespaços ou *setores* (Q, S) , onde os cálculos são amigáveis.

Figura 3.5 – Ilustração dos 16 estados de muitos corpos na iteração $N = 0$. Nesta iteração, participam os sítios c_d e f_0 , e o estado de maior carga possui dois elétrons em cada um destes sítio. Os estados que não foram identificados como $|Q, S, S_z, r\rangle$ correspondem às combinações singlete e tripleto de $c_{d\uparrow}^\dagger f_{0\downarrow}^\dagger |0\rangle$ e $c_{d\downarrow}^\dagger f_{0\uparrow}^\dagger |0\rangle$. Fonte: elaborada pela autora.

Para obtermos o conjunto de autovalores e autovetores do Hamiltoniano H_N na iteração N , projetamos este operador na base de estados de cada setor (Q, S) e diagonalizamos as matrizes que representam os blocos de H_N . Pelo menos na primeira iteração (que pode ser $N = -1$ ou $N = 0$) este cálculo é feito analiticamente. Nas próximas iterações $N + 1$, o Hamiltoniano H_{N+1} é construído a partir da transformação de renormalização (3.35) que relaciona os elementos de H_{N+1} aos autovalores de H_N e aos elementos de matriz $\langle Q, S, S_z, r | f_N^\dagger | Q', S', S'_z, r' \rangle$. A base de estados na nova iteração $\{|q, s, s_z, r\rangle_{N+1}\}$ também pode ser construída a partir da base da iteração anterior $\{|Q, S, S_z, p\rangle_N\}$, lembrando que a adição de sítios e elétrons corresponde à mudança de carga e spin com as regras de seleção

$$Q' = Q + 1, \quad (3.38)$$

$$S' = S \pm \frac{1}{2}. \quad (3.39)$$

A relação de herança entre os setores pais e filhos faz com que o número de estados aumente rapidamente entre iterações sucessivas. Isso é muito custoso computacionalmente, pois requer memória para armazenar muitos autovalores, autovetores e elementos de matriz, enquanto aumenta o tempo de processamento de todos estes dados.

É conveniente truncarmos o espectro de H_N , mantendo apenas autovalores $\lambda_i < E_{UV}$, onde E_{UV} é a energia de corte Ultravioleta UV adimensional. Na prática, após a diagonalização de H_N na base de estados de um setor (Q, S) , mantemos apenas os $R(Q, S) < L(Q, S)$ autovalores e seus respectivos autoestados $|Q, S, S_z, r_i\rangle$. Os últimos entram no cálculo dos elementos de matriz e na construção da base primitiva da iteração $N + 1$.

Em suma, o ciclo iterativo da solução de H_N compreende as etapas: construção da base primitiva $\{|q, s, s_z, p\rangle_N\}$ na qual o Hamiltoniano H_N é projetado, diagonalização de H_N , truncamento dos estados com energias $\lambda_i > E_{UV}$, cálculo dos elementos de matriz reduzidos $\langle q, s, s_z, r | f_N^\dagger | q', s', s'_z, r' \rangle$, também conhecidos como *invariantes*. Ilustramos o fluxo computacional na Figura 3.6.

A seguir, apresentaremos cada uma das etapas envolvidas no ciclo.

3.6.1 Iteração $N = -1$

O princípio de nossa solução consiste na diagonalização do Hamiltoniano (3.34) para $N = -1$ na base de 4 estados de muitos corpos ilustrada na figura (3.4). Na representação

Figura 3.6 – Ciclo iterativo do NRG na solução do problema Kondo. A partir da solução analítica na iteração $N = -1$, construímos a base primitiva da iteração $N = 0$ que inicia o ciclo iterativo. No restante das iterações N , construímos a base primitiva na qual o Hamiltoniano H_N é diagonalizado. Os autovalores e autovetores de H_N são armazenados para o cálculo de propriedades físicas e para a construção da iteração $N + 1$. Fonte: elaborada pela autora.

$|Q, S, S_z, r\rangle$ esta é dada por

$$|Q = -1, S = 0, S_z = 0, 1\rangle = |0\rangle \quad (3.40)$$

$$|Q = 0, S = 1/2, S_z = 1/2, 1\rangle = c_{d\uparrow}^\dagger |0\rangle \quad (3.41)$$

$$|Q = 0, S = 1/2, S_z = -1/2, 1\rangle = c_{d\downarrow}^\dagger |0\rangle \quad (3.42)$$

$$|Q = 1, S = 0, S_z = 0, 1\rangle = c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\downarrow}^\dagger |0\rangle. \quad (3.43)$$

Nesta iteração, o Hamiltoniano do sistema toma a forma

$$H_{-1} = \tilde{V}(c_d^\dagger f_0 + H.c.) + \tilde{\varepsilon}_d c_d^\dagger c_d + \tilde{U} n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}, \quad (3.44)$$

com $\tilde{V} = \frac{\sqrt{2\Gamma/\pi}}{\mathcal{D}_{-1}}$, $\tilde{\varepsilon}_d = \frac{\varepsilon_d}{\mathcal{D}_{-1}}$ e $\tilde{U} = \frac{U}{\mathcal{D}_{-1}}$.

Os setores Q, S que representam os subespaços de estados onde H_{-1} é diagonalizado são $Q = -1, S = 0$, $Q = 0, S = 1/2$ e $Q = 1, S = 0$. Desse modo, determinamos as matrizes Hamiltoniano em cada setor Q, S e encontramos seus autovalores e autovetores.

- $(Q = -1, S = 0)$

Neste setor a base é composta por um único estado $|Q = -1, S = 0, S_z = 0, 1\rangle = |0\rangle$, que é o próprio autovetor de H_{-1} no subespaço. O Hamiltoniano H_{-1} neste subespaço

tem dimensão 1, pois

$$\left(\langle 0|H_{-1}|0\rangle \right) = \left(0 \right), \quad (3.45)$$

com autovalor $\lambda_1 = 0$ e autovetor $|0\rangle$.

- $(Q = 0, S = 1/2)$

Neste setor a base é composta por dois estados degenerados: $|Q = 0, S = 1/2, S_z = 1/2, 1\rangle = c_{d\uparrow}^\dagger|0\rangle = |1\rangle$ e $|Q = 0, S = 1/2, S_z = -1/2, 1\rangle = c_{d\downarrow}^\dagger|0\rangle = |2\rangle$. O Hamiltoniano H_{-1} pode ser projetado em qualquer um dos dois estados $|1\rangle$ ou $|2\rangle$, isto é,

$$\left(\langle 1|H_{-1}|1\rangle \right) = \left(\langle 2|H_{-1}|2\rangle \right) = \left(\tilde{\varepsilon}_d \right), \quad (3.46)$$

com autovalor $\lambda_2 = \tilde{\varepsilon}_d$ e autovetor $|1\rangle$ ou $|2\rangle$.

Dada a simetria em S_z , podemos escolher qualquer um dos dois autovetores.

- $(Q = 1, S = 0)$

Neste setor a base é composta por um único estado $|Q = 1, S = 0, S_z = 0, 1\rangle = c_{d\uparrow}^\dagger c_{d\downarrow}^\dagger|0\rangle = |3\rangle$, que é o próprio autovetor de H_{-1} no subespaço. que é o autovetor de H_1 Assim como o setor $(Q = -1, S = 0)$ O Hamiltoniano H_{-1} neste subespaço tem dimensão 1. Veja:

$$\left(\langle 3|H_{-1}|3\rangle \right) = \left(2\tilde{\varepsilon}_d + \tilde{U} \right). \quad (3.47)$$

O autovalor e o autovetor associado à matriz H_{-1} em (3.47) são $2\tilde{\varepsilon}_d + \tilde{U}$ e $|3\rangle$, respectivamente.

Obtido o espectro $\vec{\lambda} = (\lambda_i)$ ($i = 0, 1, 2$) de H_{-1} , determinamos a energia do estado fundamental $E_g = \min(\lambda_i)$. Então, descontamos E_g de cada autovalor λ_i de modo que todas as energias sejam medidas a partir do estado fundamental.

Antes de prosseguirmos para a iteração $N = 0$, devemos determinar os elementos de matriz $\langle Q', S', S'_z | c_{d\mu}^\dagger | Q, S, S_z \rangle$ ($\mu = \uparrow, \downarrow$) do operador $c_{d\mu}^\dagger$ entre os pares de estados em (3.40). Uma vez que o operador $c_{d\mu}^\dagger$ atua em um estado $|Q, S, S_z\rangle$ modificando sua carga e seu spin, calculamos apenas os elementos de matriz entre estados satisfazendo as regras de seleção (3.38), (3.39) e $S'_z = S_z + \mu$.

Uma simplificação conveniente consiste em computar os elementos de matriz reduzidos $\langle Q', S' || c_{d\mu}^\dagger || Q, S \rangle$, também conhecidos como *invariantes*. Independentes de S_z , os invariantes são relacionados com os elementos de matriz através do Teorema de Wigner-Eckart

(48)

$$\langle Q+1, S', s_z + \mu | f_{N\mu}^\dagger | Q, S, S_z \rangle = \langle Q+1, S' | f_{N\mu}^\dagger | Q, S \rangle \begin{pmatrix} S' & \left| \begin{smallmatrix} \frac{1}{2} & S \\ S_z + \mu & \mu \end{smallmatrix} \right. \\ S_z + \mu & \mu \end{pmatrix}, \quad (3.48)$$

onde o fator em parênteses é o coeficiente de Clebsch-Gordan para a adição de spin $\vec{S} = \vec{S}' + \vec{s}$, com $\vec{s}$ sendo uma variável de spin $1/2$.

Na nossa notação, definimos

$$\langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \rangle = \begin{pmatrix} j & \left| \begin{smallmatrix} j_2 & j_1 \\ m_2 & m_1 \end{smallmatrix} \right. \\ m & m_2 \end{pmatrix}. \quad (3.49)$$

Em termos computacionais, o teorema de Wigner-Eckart é proveitoso à economia de memória, já que qualquer cálculo que dependa explicitamente de S_z pode ser obtido através dos invariantes multiplicados pelos coeficientes de Clebsch-Gordan apropriados.

Na iteração $N = -1$, os elementos de matriz permitidos pelas regras de seleção (3.38) e (3.39) são:

$$\begin{aligned} & \langle Q=1, S=0, S_z + \mu, 1 | c_{d\mu}^\dagger | Q=0, S=1/2, S_z=1/2, 1 \rangle \\ &= \langle Q=1, S=0 | c_d^\dagger | Q=0, S=1/2 \rangle \begin{pmatrix} 0 & \left| \begin{smallmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} + \mu & \mu \end{smallmatrix} \right. \\ \frac{1}{2} + \mu & \mu \end{pmatrix} = -\sqrt{2}, \end{aligned} \quad (3.50)$$

e

$$\begin{aligned} & \langle Q=1, S=1/2, S_z + \mu, 1 | c_{d\mu}^\dagger | Q=-1, S=0, S_z=0, 1 \rangle \\ &= \langle Q=1, S=1/2 | c_{d\mu}^\dagger | Q=-1, S=0 \rangle \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \left| \begin{smallmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 + \mu & \mu \end{smallmatrix} \right. \\ 0 + \mu & \mu \end{pmatrix} = 1. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Uma vez computados todos os invariantes e os autovalores de H_{-1} , a iteração $N = -1$ é fechada. Prosseguimos com a iteração $N = 0$, que inicia o ciclo iterativo até o máximo valor N satisfazendo a equação (3.33).

Como mencionamos anteriormente, qualquer iteração N do ciclo pode ser construída a partir de cálculos da iteração $N - 1$, pois os Hamiltonianos H_N e H_{N-1} estão relacionados pela transformação (3.35). Seja $\{|Q, S, S_z, p\rangle\}_N$ a base de estados da N -ésima, segue que

$$\begin{aligned} \langle Q', S', S'_z, p' | H_N | Q, S, S_z, p \rangle &= \sqrt{\Lambda} \langle Q', S', S'_z, p' | H_{N-1} | Q, S, S_z, p \rangle \\ &+ \frac{t_{N-1}}{\mathcal{D}_N} \langle Q', S', S'_z, p' | (f_{N-1}^\dagger f_N + H.c.) | Q, S, S_z, p \rangle. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Em particular, para $N = 0$, a equação (3.52) explicita a forma como H_0 pode ser construído a partir dos resultados da iteração $N = -1$. A seguir, mostraremos como construir a base $\{|Q, S, S_z, p\rangle\}_N$ a partir da base $\{|Q, S, S_z, p\rangle\}_{N-1}$ e demonstraremos como a nova base permite determinar a matriz Hamiltoniano H_N ($N > 0$) por meio dos autovalores λ_{N-1} e dos elementos de matriz $\langle q', s', s'_z | f_N^\dagger | q', s', s'_z \rangle$.

3.6.2 Setores Q, S e base primitiva

Como vimos na seção 3.6, as configurações eletrônicas possíveis para uma dada iteração N definem os pares (Q, S) permitidos pela adição de carga e spin, bem como a base de estados de H_N . Cada valor de carga Q está associada a um conjunto definido de spins $[S] = [S, S+1, S+2, \dots]$, assim como para um valor de spin S temos o conjunto de cargas $[Q] = [Q, Q+1, Q+2, \dots]$. Em princípio,[†] a paridade da carga máxima Q_{max}^N da iteração N fica condicionada à paridade da iteração, ou seja, para N par segue que Q_{max}^N é par e para N ímpar a carga Q_{max}^N é ímpar. Em geral, $Q_{max}^N = N + 2$.

Nesse sentido, podemos identificar os setores (Q, S) ativos e inativos da iteração N com casas pretas e brancas de um tabuleiro de xadrez, onde as linhas correspondem à carga Q e as colunas ao spin S . Embora pictoricamente conveniente, esta analogia não é totalmente perfeita, uma vez que nem todas as casas de uma linha Q possíveis no jogo real são ativas em uma iteração N , valendo o mesmo para as colunas S . Na prática, fixamos o número máximo de linhas Q_{MAX} e colunas S_{MAX} do tabuleiro, de modo que quando $Q_{max}^N > Q_{MAX}$ a carga máxima da iteração N pode ser Q_{MAX} ou $Q_{MAX} - 1$. As casas ativas da iteração N formam um triângulo cuja base está na coluna $S = 0$. Na figura 3.7 ilustramos os setores (Q, S) ativos na iteração $N = 6$ com $Q_{MAX} = 7$ e $S_{MAX} = 7$.

No início da iteração N ($N = 0, 1, \dots$) são conhecidos o conjunto de autovalores $\lambda_{N-1}^{Q, S, l}$ ($l = 1, \dots, L(Q, S)$) (onde $L(Q, S)$ denota a dimensão do subespaço (Q, S) na iteração $N-1$) e os invariantes $\langle Q+1, S', l' | f_{N-1}^\dagger | Q, S, l \rangle_{N-1}$, com $S' = S \pm 1/2$, $l = 1, \dots, L(Q, S)$ e

[†]Considerando a cadeia $\{f_n\}$ como infinita, sem restringir a carga máxima e o spin máximo para todo o ciclo iterativo.

$$l' = 1, \dots, L(Q + 1, S').$$

Figura 3.7 – Setores ativos (em azul) para a iteração $N = 6$. A carga máxima é $Q_{max}^5 = 7$. Para $Q = 0$, o conjunto de spins permitidos é $[0, 1, 2, 3]$, enquanto para $Q = 7$ só é permitido $S = 1$. Em uma iteração par setores de carga par têm spins pares e setores de carga ímpar têm spins ímpares. Fonte: elaborada pela autora.

A cada iteração N introduzimos o operador f_N no sistema. Pictoricamente, introduzir f_N representa adicionar um novo sítio ao sistema em $N - 1$, como ilustrado nas figuras 3.4 e 3.5. No contexto do tabuleiro de setores (Q, S) , tal operação corresponde a uma inversão de cores, ou seja, os setores ativos em $N - 1$ tornam-se inativos em N . Ambas representações permitem relacionar a base de estados entre as iterações N e $N - 1$.

Dado um autovetor $|Q, S, S_z, l\rangle_{N-1}$ de H_{N-1} , geramos quatro bases de estados $|q, s, s_z, p\rangle_N$

com carga, spin e componente z de spin bem determinados, através das relações

$$|Q - 1, S, S_z, p_3\rangle_N^S = O_S |Q, S, S_z, l\rangle_{N-1}, \quad (3.53)$$

$$|Q, S - 1/2, S_z - 1/2, p_4\rangle_N^W = O_W |Q, S, S_z, l\rangle_{N-1}, \quad (3.54)$$

$$|Q, S + 1/2, S_z + 1/2, p_2\rangle_N^E = O_E |Q, S, S_z, l\rangle_{N-1}, \quad (3.55)$$

$$|Q + 1, S, S_z, p_1\rangle_N^N = O_N |Q, S, S_z, l\rangle_{N-1}, \quad (3.56)$$

onde os operadores O_g ($g = S, W, E, N$) são definidos pelas identidades

$$O_S |Q, S, S_z, l\rangle_{N-1} \equiv |Q, S, S_z, l\rangle_{N-1}, \quad (3.57)$$

$$\begin{aligned} O_W |Q, S, S_z, l\rangle_{N-1} \equiv & \begin{pmatrix} S - \frac{1}{2} & \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & S \\ S_z - \frac{1}{2} & S_z - 1 \end{array} \right. \\ S_z - \frac{1}{2} & \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & S \\ -\frac{1}{2} & S_z \end{array} \right. \end{pmatrix} f_{N\uparrow}^\dagger |Q, S, S_z, l\rangle_{N-1} \\ & + \begin{pmatrix} S - \frac{1}{2} & \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & S \\ S_z - \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{array} \right. \\ S_z - \frac{1}{2} & \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & S \\ -\frac{1}{2} & S_z \end{array} \right. \end{pmatrix} f_{N\downarrow}^\dagger |Q, S, S_z, l\rangle_{N-1} \end{aligned} \quad (3.58)$$

$$\begin{aligned} O_E |Q, S, S_z, l\rangle_{N-1} \equiv & \begin{pmatrix} S + \frac{1}{2} & \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & S \\ S_z + \frac{1}{2} & S_z \end{array} \right. \\ S_z + \frac{1}{2} & \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & S \\ -\frac{1}{2} & S_z + 1 \end{array} \right. \end{pmatrix} f_{N\uparrow}^\dagger |Q, S, S_z, l\rangle_{N-1} \\ & + \begin{pmatrix} S + \frac{1}{2} & \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & S \\ S_z + \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{array} \right. \\ S_z + \frac{1}{2} & \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & S \\ -\frac{1}{2} & S_z + 1 \end{array} \right. \end{pmatrix} f_{N\downarrow}^\dagger |Q, S, S_z, l\rangle_{N-1}, \end{aligned} \quad (3.59)$$

$$O_N |Q, S, S_z, l\rangle_{N-1} \equiv f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow}^\dagger |Q, S, S_z, l\rangle_{N-1}. \quad (3.60)$$

Dizemos que os estados $|Q, S, S_z, l\rangle_{N-1}$ são os *pais* (*parent*) dos quatro estados *filhos* (*child*) e associamos a cada estado filho um genero $g = S, W, E$ e N , tal como apresentamos nas equações (3.53)-(3.56). Os rótulos $g = S, W, E$ e N são atribuídos em analogia às coordenadas geográficas sul (south), oeste (west), leste (east) e norte (north) que direcionam estados dos setores pais - ativos na iteração $N - 1$ - para os filhos da iteração N . Na figura 3.8 ilustramos como a base de (Q, S) dá origem aos filhos $(q - 1, s)$, $(q, s + 1/2)$, $(q + 1, s)$ e $(q, s - 1/2)$.

Como cada setor filho (q, s) herda estados de 4 setores pais nas direções S, W, E e N , sua dimensão primitiva n_p é dada pela soma

$$n_p = L(q, s) = L(Q + 1, S) + L(Q, S + \frac{1}{2}) + L(Q - 1, S) + L(Q, S - \frac{1}{2}). \quad (3.61)$$

Dizemos que a base $|Q, S, p\rangle$ e a dimensão n_p são *primitivas* por referirem-se aos estados

existentes antes do corte ultravioleta. Após a diagonalização, somente os n_r autovetores (e estados) associados aos autovalores $\lambda_i < E_{UV}$ são mantidos, de modo que $L(q, s) = n_r$.

Figura 3.8 – Construção da base primitiva de um setor (Q, S) na iteração N a partir dos estados da iteração $N - 1$. Setores pais e filhos são ilustrados em vermelho e verde, respectivamente. **a)** Seja $\{|Q, S, S_z, l\rangle\}$ a base de estados do setor (Q, S) da iteração $N - 1$. A atuação dos operadores O_g ($g = S, W, E, N$) nessa base dá origem aos estados filhos nos respectivos setores $(q - 1, s)$, $(q, s + 1/2)$, $(q + 1, s)$ e $(q, s - 1/2)$ na iteração N . Os gêneros atribuídos aos operadores O_g correspondem à localização geográfica dos setores filhos de Q, S : norte (N), leste (E), sul (S) e oeste (W). **b)** A base primitiva de um setor filho (q, s) na iteração N é implementada através da herança de estados dos setores pais oriundos da iteração $N - 1$. O setor q, s recebe estados dos setores $(Q - 1, S)$ via O_S , $(Q, S + 1/2)$ via O_W , $(Q + 1, S)$ via O_N e $(Q, S - 1/2)$ via O_W . Fonte: elaborada pela autora.

Na figura 3.9 ilustramos a herança de estados entre os setores das iterações $N = -1$ e $N = 0$. Partindo dos setores $(Q = 1, S = 0)$, $(Q = 0, S = 1/2)$ e $(Q = -1, S = 0)$ contendo um estado cada, obtemos um total de 36 estados os operadores O_g ($g = S, W, E, N$). Esses 36 estados filhos estão distribuídos entre os setores $(q = 2, s = 0)$, $(q = 1, s = \frac{1}{2})$, $(q = 0, s = 0)$, $(q = -1, s = \frac{1}{2})$ e $(q = -2, s = 0)$.

Em resumo, operamos com O_g ($g = S, W, E, N$) em todos os estados calculados na iteração $N - 1$ para construir a base de estados da iteração N , na qual o Hamiltoniano (3.34) será projetado.

Para implementar a projeção no código NRG, basta notar que O_S e O_N (O_W e O_E) comutam (anticomutam) com $f_{N-1\mu}$. Desse modo, apenas o elemento $\sqrt{\Lambda}H_{N-1}$ da transformação (3.35) contribui para os elementos diagonais da matriz Hamiltoniano H_N , enquanto que os demais termos estão relacionados aos elementos não-diagonais.

sobre spins μ na eq. (3.63), obtemos uma expressão relacionando os elementos não-diagonais $\langle q, s, s_z, p' | H_N | q, s, s_z, p \rangle$ aos invariantes da iteração $N - 1$. Tal expressão, que depende somente dos gêneros de $|q, s, s_z, p'\rangle$ e $|q, s, s_z, p\rangle$, é apresentada na tabela 3.1.

Assim como os elementos diagonais, os elementos não-diagonais são independentes de S_z devido à invariância rotacional do Hamiltoniano. Na prática, a diagonalização do Hamiltoniano é feita sem referência a S_z .

Tabela 3.1 – Elementos não-diagonais da matriz Hamiltoniano H_N entre os estados $|q, s, s_z, p'\rangle_N^{g'}$ e $|q, s, s_z, p\rangle_N^g$. Os fatores que aparecem na frente dos invariantes são os coeficientes de Clebsch-Gordan. As combinações não listadas de gêneros g e g' são nulas.

g	g'	${}^{g'}\langle q, s, s_z, p' H_N q, s, s_z, p \rangle_N^g$
$\mathcal{E}$	$\mathcal{N}$	$\sqrt{\frac{2s}{2s+1}} \langle q, s - \frac{1}{2}, l' f_{N-1}^\dagger q - 1, s, l \rangle_{N-1}$
$\mathcal{W}$	$\mathcal{N}$	$-\sqrt{\frac{2s+2}{2s+1}} \langle q, s - \frac{1}{2}, l' f_{N-1}^\dagger q - 1, s, l \rangle_{N-1}$
$\mathcal{N}$	$\mathcal{E}$	$\sqrt{\frac{2s}{2s+1}} \langle q - 1, s, l' f_{N-1}^\dagger q, s - \frac{1}{2}, l \rangle_{N-1}$
$\mathcal{S}$	$\mathcal{E}$	$\langle q + 1, s, l' f_{N-1}^\dagger q, s - \frac{1}{2}, l \rangle_{N-1}$
$\mathcal{E}$	$\mathcal{S}$	$\langle q, s - \frac{1}{2}, l' f_{N-1}^\dagger q + 1, s, l \rangle_{N-1}$
$\mathcal{W}$	$\mathcal{S}$	$\langle q, s + \frac{1}{2}, l' f_{N-1}^\dagger q + 1, s, l \rangle_{N-1}$
$\mathcal{N}$	$\mathcal{W}$	$-\sqrt{\frac{2s+2}{2s+1}} \langle q - 1, s, l' f_{N-1}^\dagger q, s + \frac{1}{2}, l \rangle_{N-1}$
$\mathcal{S}$	$\mathcal{W}$	$\langle q + 1, s, l' f_{N-1}^\dagger q, s + \frac{1}{2}, l \rangle_{N-1}$

Fonte: elaborada pela autora.

Recapitulando as etapas do ciclo apresentadas até a presente seção: para cada setor (Q, S) os elementos de matriz diagonais de H_N são obtidos a partir dos autovalores de H_{N-1} , como mostra a eq. (3.62). Os termos não-diagonais são calculados a partir dos elementos de matriz do operador $f_{N-1}^\dagger$ computados na iteração precedente. Uma vez construída, a matriz representando o Hamiltoniano H_N em um dado setor Q, S é diagonalizada, e seus autovalores e autovetores são armazenados. Os autovalores são mantidos até a iteração $N + 1$. Os

autovetores são temporariamente necessários, pois são utilizados para o cálculo dos elementos de matriz reduzidos do operador $f_N^\dagger$ na iteração N atual. Detalharemos na próxima seção o cálculo desses elementos $\langle q, s, l || f_N^\dagger || q, s, l \rangle_N$.

3.6.3 Cálculo dos invariantes

A relação de Wigner-Eckart (3.48) mostra que os invariantes $\langle q + 1, s', r' || f_N^\dagger || q, s, r \rangle_N$ são facilmente calculáveis a partir dos elementos de matriz $\langle q', s', s'_z, r' | f_{N\mu}^\dagger | q, s, s_z, r \rangle_N$ ($\mu = \pm 1/2$). Os últimos estão relacionados com os elementos de matriz de $f_{N\mu}^\dagger$ na base dos estados filhos $|q, s, s_z, p\rangle_N^g$ pela igualdade

$$\begin{aligned} \langle q + 1, s', s'_z, r' | f_{N\mu} | q, s, s_z, r \rangle_N &= \sum_{p, p'} U_{r'p'}^\dagger(q + 1, s') U_{rp}(q, s) \\ &\times^{g'} \langle q + 1, s', s'_z, p' | f_{N\mu}^\dagger | q, s, s_z, p \rangle_N^g, \end{aligned} \quad (3.64)$$

onde $U_{rp}(q, s)$ denota a transformação unitária que diagonaliza H_N na base dos estados filhos $|q, s, s_z, p\rangle_N^g$. A transformação $U_{rp}(q, s)$ é a matriz composta pelos autovetores resultantes da diagonalização de H_N , onde cada coluna é um autovetor.

Figura 3.10 – Esquema de cálculo dos invariantes NE e NW de um setor (Q, S) com os setores $(Q + 1, S + \frac{1}{2})$ e $(Q + 1, S - \frac{1}{2})$, respectivamente. Os setores circulados em vermelho correspondem aos pais de (Q, S) existentes na iteração anterior. **a)** Os invariantes nordeste $\langle q + 1, s + 1/2, r' || f_N || q, s, r \rangle$ recebem a contribuição de estados com origem nos setores pais $(Q + 1, S)$ e $(Q, S + \frac{1}{2})$. **b)** Os invariantes noroeste $\langle q + 1, s - 1/2, r' || f_N || q, s, r \rangle$ recebem a contribuição de estados com origem nos setores pais $(Q + 1, S)$ e $(Q, S - \frac{1}{2})$. Fonte: elaborada pela autora.

Lembrando que os operadores $f_{N\mu}$ aniquilam os autoestados $|Q, S, S_z, r\rangle_{N-1}$, é relativamente simples computar cada um dos elementos de matriz da equação (3.64) a partir das relações (3.53)-(3.56). Os elementos de matriz são nulos a menos que os estados $|q+1, s', s_z + \mu, p'\rangle_N^{g'}$ e $|q, s, s_z, p\rangle_N^g$ tenham um pai comum, ou seja, a menos que verifiquem-se as relações

$$|q, s, s_z, p\rangle_N^g = O_g |Q, S, S_z, r\rangle_{N-1} \quad (3.65)$$

e

$$|q', s', s_z + \mu, p'\rangle_N^{g'} = O_{g'} |Q, S, S_z, r\rangle_{N-1}, \quad (3.66)$$

com gêneros g e g' tais que $q' = q + 1$ e $s' = s \pm 1/2$.

Com as equações (3.65) e (3.66), concluímos que os elementos de matriz não se anulam para as combinações de gêneros $\mathcal{NW}$, $\mathcal{ES}$, $\mathcal{NE}$ e $\mathcal{WS}$. Apresentados na tabela 3.2 os resultados de $g' \langle q+1, s', s_z + \mu, p' | f_{N\mu}^\dagger | q, s, s_z, p \rangle_N^g$ para esses pares de gêneros.

Tabela 3.2 – Elementos de matriz $g' \langle q+1, s', s_z + \mu, p' | f_{N\mu}^\dagger | q, s, s_z, p \rangle_N^g$ não nulos a partir dos quais os invariantes são computados. A última coluna apresenta os coeficientes de Clebsch-Gordan para as combinações de gêneros que produzem elementos diferentes de zero.

s'	g	g'	$g' \langle q+1, s', s_z + \mu, p' f_{N\mu}^\dagger q, s, s_z, p \rangle_N^g$
$s + \frac{1}{2}$	$\mathcal{N}$	$\mathcal{W}$	$2\mu \left(\begin{array}{c cc} s & \frac{1}{2} & s + \frac{1}{2} \\ s_z & -\mu & s_z + \mu \end{array} \right)$
$s + \frac{1}{2}$	$\mathcal{E}$	$\mathcal{S}$	$\left(\begin{array}{c cc} s + \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & s \\ s_z + \mu & \mu & s_z \end{array} \right)$
$s - \frac{1}{2}$	$\mathcal{N}$	$\mathcal{E}$	$2\mu \left(\begin{array}{c cc} s & \frac{1}{2} & s - \frac{1}{2} \\ s_z & -\mu & s_z + \mu \end{array} \right)$
$s - \frac{1}{2}$	$\mathcal{W}$	$\mathcal{S}$	$\left(\begin{array}{c cc} s - \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & s \\ s_z + \mu & \mu & s_z \end{array} \right)$

Fonte: elaborada pela autora.

É possível derivar outra simplificação no cálculo dos invariantes, observando que os coeficientes de Clebsch-Gordan na primeira e segunda linhas da última coluna da tabela 3.2 são

relacionados pela expressão

$$\left(\begin{array}{c|cc} s & \frac{1}{2} & s + \frac{1}{2} \\ s_z & -\mu & s_z + \frac{1}{2} \end{array} \right) = 2\mu \sqrt{\frac{2s+1}{2s+1}} \left(\begin{array}{c|cc} s + \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & s \\ s_z + \mu & \mu & s_z \end{array} \right), \quad (3.67)$$

enquanto os coeficientes da terceira e da quarta linha estão relacionados por

$$\left(\begin{array}{c|cc} s & \frac{1}{2} & s - \frac{1}{2} \\ s_z & -\mu & s_z + \frac{1}{2} \end{array} \right) = 2\mu \sqrt{\frac{2s+1}{2s}} \left(\begin{array}{c|cc} s - \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & s \\ s_z + \mu & \mu & s_z \end{array} \right). \quad (3.68)$$

Desse modo, é conveniente definir uma matriz $\mathcal{M}_{g,g'}$ ($g, g' = \mathcal{N}, \mathcal{E}, \mathcal{S}, \mathcal{W}$) de dimensão 4×4 , cujos elementos não nulos são:

$$\mathcal{M}_{\mathcal{N},\mathcal{W}} = \sqrt{\frac{2s+1}{2s+2}} \quad (3.69)$$

$$\mathcal{M}_{\mathcal{E},\mathcal{S}} = 1 \quad (3.70)$$

$$\mathcal{M}_{\mathcal{N},\mathcal{W}} = -\sqrt{\frac{2s+1}{2s}} \quad (3.71)$$

$$\mathcal{M}_{\mathcal{W},\mathcal{S}} = 1. \quad (3.72)$$

Com as definições (3.69)-(3.72), a tabela 3.2 pode ser sumarizada na equação

$${}^{g'}\langle q+1, s \pm \frac{1}{2}, s_z + \mu, r' | f_{N\mu}^\dagger | q, s, s_z, r \rangle_N^g = \left(\begin{array}{c|cc} s \pm \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & s \\ s_z + \mu & \mu & s_z \end{array} \right) \mathcal{M}_{g,g'}. \quad (3.73)$$

Substituindo a eq. (3.73) em (3.64), obtemos uma expressão simples para os elementos de matriz de $f_{N\mu}^\dagger$ na base de autoestados de H_N

$$\begin{aligned} \langle q+1, s \pm \frac{1}{2}, s_z + \mu, r' | f_{N\mu}^\dagger | q, s, s_z, r \rangle_N &= \left(\begin{array}{c|cc} s \pm \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & s \\ s_z + \mu & \mu & s_z \end{array} \right) \\ &\times \sum_{p,p'} U_{r'p'}^\dagger(q+1, s') \mathcal{M}_{g,g'} U_{rp}(q, s), \end{aligned} \quad (3.74)$$

onde g e g' são os gêneros do p -ésimo e p' -ésimo estados filhos dos setores q, s e $q+1, s \pm \frac{1}{2}$, respectivamente.

Comparando a última equação com relação de Wigner-Eckart em (3.48), podemos então calcular os invariantes através da expressão

$$\langle q+1, s \pm \frac{1}{2}, r' || f_N^\dagger || q, s, r \rangle_N = \sum_{p,p'} U_{r'p'}^\dagger(q+1, s') \mathcal{M}_{g,g'} U_{rp}(q, s). \quad (3.75)$$

Figura 3.11 – Cálculo dos invariantes entre os estados da iteração $N = -1$. **a)** Os estados $|Q = 0, S = 1/2, 1\rangle$ e $|Q = 1, S = 0, 1\rangle$ juntos compõe o elemento de matriz $\langle Q = 1, S = 0, r' = 1 || f_{-1}^\dagger || Q = 0, S = 1/2, r = 1 \rangle$ na direção NW do setor $(Q = 0, S = 1/2)$. **b)** Por sua vez, o invariante NE do setor $(Q = -1, S = 0)$ é construído a partir dos estados $|Q = -1, S = 0, r = 1\rangle$ e $|Q = 0, S = 1/2, r' = 1\rangle$. Fonte: elaborada pela autora.

A última passagem nos diz que a soma em p e p' é restrita a estados que obedecem às relações (3.65) e (3.66). Na prática, se $L(Q, S)$ é a dimensão do setor Q, S a partir dos quais foram gerados os estados filhos $|q, s, s_z, p\rangle_N$ e $|q+1, s \pm 1/2, s_z + \mu, p'\rangle_N$, então a soma que aparece à direita na eq. (3.75) engloba L termos, e não L^2 como a soma dupla poderia sugerir. Portanto, o custo para computar L^2 invariantes à esquerda da eq. (3.75) é proporcional a L^3 .

Seguindo o procedimento detalhado na presente seção, computamos e armazenamos os invariantes $\langle q', s', r' || f_N^\dagger || q, s, r \rangle$ em cada iteração N . Em seguida, prosseguimos calculando propriedades físicas, tais como a condutância, a densidade espectral ou mesmo a taxa de

relaxação magnética. Tais propriedades dependem essencialmente de elementos de matriz na forma $\langle q', s', r' | c_{d\mu}^\dagger | q, s, r \rangle$ e $\langle q', s', r' | f_{n\mu}^\dagger | q, s, r \rangle$ ($n = 0, \dots, N$).

Para economizar memória, mantemos armazenados somente os invariantes, uma vez a partir deles podemos obter os elementos não-diagonais do Hamiltoniano nas iterações subsequentes e ainda calcular os demais elementos de matriz úteis às propriedades de interesse. Na próxima seção, detalharemos a última etapa do ciclo iterativo, que compreende o cálculo recursivo dos elementos de matriz reduzidos $\langle q', s', r' | f_{n\mu}^\dagger | q, s, r \rangle$ ($n = -1, 0, \dots, N$)[‡] para a obtenção de propriedades físicas.

3.6.4 Cálculo recursivo dos elementos de matriz

A cada iteração N , estaremos interessados no comportamento de propriedades de excitação ou transporte, que podem variar com a energia ou com a temperatura do sistema. Em geral, um observável $\mathcal{X}$ associado à grandeza física χ é escrito como

$$\chi \propto \sum_{\varphi, \psi} |\langle \varphi | f_n | \psi \rangle|^2 f(T, \varepsilon), \quad (3.76)$$

com $n = -1, 0, \dots, N$, $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ sendo autoestados do Hamiltoniano correspondente e $f(T, \varepsilon)$ é uma função que pode depender da temperatura T ou das energias ε .

Como mencionamos na seção 3.6.3, é conveniente manter em memória apenas os invariantes $\langle q', s', r' | f_N^\dagger | q, s, r \rangle$ e a partir deles resgatar os demais elementos $\langle q', s', r' | f_n^\dagger | q, s, r \rangle$ da cadeia $\{f_n\}$. Para tanto, precisamos encontrar uma relação envolvendo os f_n com os f_N - o que mostramos a seguir.

Iniciamos calculando o comutador de H_N com o operador $f_n^\dagger$

$$\begin{aligned} [H_N, f_n^\dagger] &= \frac{1}{\mathcal{D}_N} \sum_p t_p \left([f_p^\dagger f_{p+1}, f_n^\dagger] + [f_{p+1}^\dagger f_p, f_n^\dagger] \right) \\ &= \frac{1}{\mathcal{D}_N} \sum_p t_p f_p^\dagger \delta_{p+1, n} + \frac{1}{\mathcal{D}_N} \sum_p t_p f_{p+1}^\dagger \delta_{n, p} \\ &= \frac{t_{n-1}}{\mathcal{D}_N} f_{n-1}^\dagger + \frac{t_n}{\mathcal{D}_N} f_{n+1}^\dagger. \end{aligned} \quad (3.77)$$

[‡]O índice $n = -1$ é utilizado como notação para indicar o elemento de matriz do operador c_d , ou seja, $\langle q', s', r' | f_{-1\mu}^\dagger | q, s, r \rangle = \langle q', s', r' | c_{d\mu}^\dagger | q, s, r \rangle$.

Em particular, para $n = N$

$$[H_N, f_N^\dagger] = \frac{t_{N-1}}{\mathcal{D}_N} f_{N-1}^\dagger, \quad (3.78)$$

de modo que o elemento de matriz do comutador é dado por

$$\begin{aligned} \frac{t_{N-1}}{\mathcal{D}_N} \langle q+1, s \pm \frac{1}{2}, r' | f_{N-1}^\dagger | q, s, r \rangle_N &= \langle q+1, s \pm \frac{1}{2}, r' | H_N f_N^\dagger | q, s, r \rangle_N \\ &- \langle q+1, s \pm \frac{1}{2}, r' | f_N^\dagger H_N | q, s, r \rangle_N. \end{aligned} \quad (3.79)$$

Uma vez que os estados $|q, s, r\rangle_N$ e $|q+1, s \pm \frac{1}{2}, r'\rangle_N$ são autoestados de H_N com autovalores $E_N(q, s, r)$ e $E_N(q+1, s \pm \frac{1}{2}, r')$, respectivamente, a equação (3.79) pode ser reescrita como

$$\frac{t_{N-1}}{\mathcal{D}_N} \langle q+1, s \pm \frac{1}{2}, r' | f_{N-1}^\dagger | q, s, r \rangle_N = \Delta E_N \langle q+1, s \pm \frac{1}{2}, r' | f_N^\dagger | q, s, r \rangle_N, \quad (3.80)$$

onde

$$\Delta E_N = E_N(q+1, s \pm \frac{1}{2}, r') - E_N(q, s, r), \quad (3.81)$$

é a diferença energética entre os estados r' e r .

A relação (3.80) determina os elementos de matriz de $f_{N-1}^\dagger$ entre quaisquer pares de estados $|q, s, r\rangle$ e $|q+1, s \pm \frac{1}{2}, r'\rangle$.

Em seguida, gostaríamos de calcular os elementos de matriz de $f_n^\dagger$ com $n = N-2, N-1, \dots, 0$ de maneira análoga. Assim, computamos o comutador $[H_N, f_{n+1}^\dagger]$

$$[H_N, f_{n+1}^\dagger] = \frac{1}{\mathcal{D}_N} (t_n f_n^\dagger + t_{n+1} f_{n+2}^\dagger), \quad (3.82)$$

seguindo que

$$\begin{aligned} \langle q+1, s \pm \frac{1}{2}, r' | f_n^\dagger | q, s, r \rangle_N &= -\frac{t_{n+1}}{t_n} \langle q+1, s \pm \frac{1}{2}, r' | f_{n+2}^\dagger | q, s, r \rangle_N \\ &+ \frac{\mathcal{D}_N}{t_n} \Delta E_N \langle q+1, s \pm \frac{1}{2}, r' | f_{n+1}^\dagger | q, s, r \rangle_N. \end{aligned} \quad (3.83)$$

Finalmente, para calcular o elemento de matriz do operador c_d , devemos calcular o comutador $[H_N, f_0^\dagger]$

$$[H_N, f_0^\dagger] = \frac{1}{\mathcal{D}_N} (\sqrt{2}V c_d^\dagger t_0 f_1^\dagger), \quad (3.84)$$

a partir da qual obtemos a seguinte expressão

$$\begin{aligned} \langle q+1, s \pm \frac{1}{2}, r' | c_d^\dagger | q, s, r \rangle_N &= -\frac{t_0}{\sqrt{2}V} \langle q+1, s \pm \frac{1}{2}, r' | f_1^\dagger | q, s, r \rangle_N \\ &+ \frac{\mathcal{D}_N}{\sqrt{2}V} \Delta E_N \langle q+1, s \pm \frac{1}{2}, r' | f_0^\dagger | q, s, r \rangle_N. \end{aligned} \quad (3.85)$$

A equação (3.83) define a recursão entre os elementos $\langle q+1, s \pm \frac{1}{2}, r' | f_n^\dagger | q, s, r \rangle_N$ para $n = 0, \dots, N$. Calculados os elementos de matriz entre os operadores $f_0^\dagger$ e $f_1^\dagger$, é possível obter os invariantes de $c_d^\dagger$ conforme a equação (3.85). O custo computacional de calcular o conjunto de todos os elementos de matriz dos operadores $c_d^\dagger$ e $f_n^\dagger$ para cada um dos autoestados dos setores (q, s) de dimensão $L(q, s)$ é da ordem de $O(NL^2)$, o que para matrizes $L > N$ é inferior do que a complexidade $O(L^3)$ da diagonalização de H_N projetado no subespaço (q, s) .

Até o presente desenvolvimento, nosso problema foi tratado analiticamente com ferramentas conhecidas na literatura. Todos os conceitos introduzidos nos capítulos 2 e 3 foram essenciais para fundamentar o problema quanticamente. Fomos capazes de obter uma expressão para o Hamiltoniano H_A não-perturbado na base do NRG, enquanto o operador H_{probe} representando a ponta de prova foi projetado na base contínua $\{c_\varepsilon, \bar{c}_\varepsilon\}$. No próximo capítulo, de número 4, mostraremos como resolver H_{probe} na base $\{f_n, \bar{c}_\varepsilon\}$, de modo que a taxa de relaxação $1/T_1$ seja calculada numericamente.

CAPÍTULO 4

A taxa de relaxação magnética longitudinal

Nothing in life is to be feared, it is only
to be understood. Now is the time to
understand more, so that we may fear
less.

Marie Curie

Nossa proposta de estudar a nuvem Kondo e determinar seu raio R_k é baseada no cálculo perturbativo da taxa de relaxação longitudinal $1/T_1$ (5, 27) de uma ponta de prova magnética inserida no metal hospedeiro a uma distância R da impureza.

A motivação para esta proposta é decorrente do interesse recente em técnicas experimentais para explorar propriedades magnéticas em sistemas Kondo, tal como espectroscopia de ressonância paramagnética eletrônica (ESR, *electron spin resonance*) na medida da susceptibilidade (28, 49). Essa técnica é capaz de medir a largura de ressonância de absorção de sistemas com momento magnético bem definido. No caso especial de uma liga metálica típica para um sistema Kondo, as rápidas flutuações tornam o sinal ilegível, requerindo a introdução de uma ponta de prova adicional, usualmente Gd^{3+} . Assim, consegue-se detectar indiretamente o efeito da susceptibilidade do íon de Kondo por meio da interação de troca $RKKY$ transmitida através dos elétrons de condução. A largura de linha da prova com momento magnético estável é dada pela taxa de relaxação de spin ($1/T_2$), que em metais é igual a taxa longitudinal ($1/T_1$).

Vamos mostrar que o Hamiltoniano H_{probe} na equação (2.26) possui três termos contribuindo para a taxa de relaxação $1/T_1$, os quais denominaremos contribuições escalar, vetorial e matricial. O primeiro é uma constante associada aos operadores $\bar{c}_\epsilon$. Os outros dois termos são dependentes da temperatura, sendo um deles associado aos operadores f_n , enquanto o outro corresponde à interferência entre os $\bar{c}_\epsilon$ e f_n .

4.1 Calculando a relaxação de um sistema Kondo

Objetivando estudar a relaxação magnética do sistema perturbado pela ponta de prova, devemos ser capazes de medir a taxa de transição do sistema entre estados quânticos eletrônicos devida à perturbação H_{probe} . Para tanto, podemos utilizar a *Regra de Ouro de Fermi* (28, 49) que permite calcular a taxa de relaxação magnética da ponta de prova através da expressão

$$\frac{1}{T_1} = \frac{4\pi}{\hbar} \sum_{I,F} P_I |\langle I | H_{probe} | F \rangle|^2 \delta(E_I - E_F), \quad (4.1)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, e $|I\rangle$ e $|F\rangle$ são os estados inicial e final do Hamiltoniano (2.1) com energias E_I e E_F , respectivamente e

$$P_I = \frac{e^{-\beta E_I}}{\sum_{|I\rangle} e^{-\beta E_I}} \quad (4.2)$$

onde são os pesos de Boltzmann dependentes da temperatura T .

A taxa $1/T_1$ na equação (4.1) mede a probabilidade de transição entre os estados $|I\rangle$ e $|F\rangle$ do Hamiltoniano H_A não-perturbado com pesos probabilísticos dados em (4.2). Em experimentos de ressonância magnética, as taxas de relaxação são medidas através da resposta do sistema a um campo pulsado com frequência ω (o que, no nosso caso, equivale a ter H_{probe} dependente do tempo). Mais adiante,* vamos discutir como física envolvida na transição mediada por H_{probe} pode incorporada na solução analítica da soma em (4.1).

O cálculo de $1/T_1$ em (4.1) requer essencialmente a projeção do Hamiltoniano H_{probe} na base de autoestados do sistema não perturbado. No capítulo 2 obtivemos a expressão (2.26) para H_{probe} em termos dos operadores $\Phi_{0\mu}(R)$ e $\phi_\mu(R)$ definidos em (2.24) e (2.25), respectivamente. Mostramos que a projeção de H_A na base contínua $\{c_\epsilon, \bar{c}_\epsilon\}$ resulta no Hamiltoniano $\tilde{H}$ contendo o termo $\bar{H}_c$ de contribuição perturbativa. Assim, concluímos que os $\Phi_{0\mu}(R)$ são dependentes exclusivamente dos operadores $\bar{c}_\epsilon$ da base contínua e, uma vez que os autoestados do Hamiltoniano perturbado $\tilde{H}$ são desacoplados, podemos tratar cada termo $\phi_\mu(R)$ e $\Phi_{0\mu}(R)$ independentemente.

Tendo definido as transformações (3.9) e (3.10), que relacionam os operadores fermiônicos c_ϵ e $\bar{c}_\epsilon$ à base do NRG $\{f_n\}$, vamos aproveitar o desacoplamento dos $\bar{c}_\epsilon$ do sistema não-perturbado, descrito por H_A , para reescrever $\phi_\mu(R)$ em uma forma numérica.

*Veja a seção 4.2.2.

4.2 Hamiltoniano da ponta de prova na base de Lanczos

Considerando as contribuições independentes de (2.24) e (2.25), vamos expressar H_{probe} em termos da base $\{f_n, \bar{c}_\varepsilon\}$. Para isso, vamos propor que o operador $\phi_\mu(R)$ pode ser escrito como

$$\phi_\mu(R) = \sum_n \gamma_n f_{n\mu}, \quad (4.3)$$

onde os coeficientes γ_n são determinados pelo comutador $\{f_{n\nu}^\dagger, \phi_\mu(R)\}$

$$\gamma_n = \{f_{n\nu}^\dagger, \phi_\mu(R)\} = \sum_m u_{nm} (\zeta_m^+ + (-1)^n \zeta_m^-), \quad (4.4)$$

com

$$\zeta_m^+ = \{a_{m\nu}^\dagger, \phi_\mu(R)\} = \delta_{\mu,\nu} \frac{\Lambda^{m/2}}{\sqrt{D(1-\Lambda^{-1})}} \int_{\mathcal{I}_{m+}} d\varepsilon W(\varepsilon, R), \quad (4.5)$$

e

$$\zeta_m^- = \{b_{m\nu}^\dagger, \phi_\mu(R)\} = \delta_{\mu,\nu} \frac{\Lambda^{m/2}}{\sqrt{D(1-\Lambda^{-1})}} \int_{\mathcal{I}_{m-}} d\varepsilon W(\varepsilon, R), \quad (4.6)$$

onde $W(\varepsilon, R)$ foi definido em (2.17).

A equação (4.3) relaciona os operadores $\phi_\mu(R)$ com os f_n através dos coeficientes γ_n calculados por (4.4). Tais coeficientes podem ser obtidos resolvendo as integrais (4.5) e (4.6) para uma distância R fixa. Assim, usando a definição (2.17), devemos calcular

$$\mathcal{S}_{m+}(R) = \mathcal{E}_m \int_{\mathcal{I}_{m+}} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} W(\varepsilon, R) = \int_{D\Lambda^{-m-1}}^{D\Lambda^{-m}} d\varepsilon \frac{\sin(k_F R(1 + \frac{\varepsilon}{D}))}{k_F R(1 + \frac{\varepsilon}{D})}, \quad (4.7)$$

e

$$\mathcal{S}_{m-}(R) = \mathcal{E}_m \int_{\mathcal{I}_{m-}} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} W(\varepsilon, R) = \int_{-D\Lambda^{-m}}^{-D\Lambda^{-m-1}} d\varepsilon \frac{\sin(k_F R(1 + \frac{\varepsilon}{D}))}{k_F R(1 + \frac{\varepsilon}{D})}. \quad (4.8)$$

Considerando conhecidos os valores das integrais $\mathcal{S}_{m\pm}$ (calculados por integração numérica ou pelas aproximações dos casos assintóticos) e todos os u_{nm} , podemos determinar os coeficientes γ_n da transformação (4.3) através da relação

$$\gamma_n(R) = \sum_m (\mathcal{S}_{m+}(R) + (-1)^n \mathcal{S}_{m-}(R)) \frac{u_{nm}}{u_{0m}}, \quad (4.9)$$

onde substituímos os v_{nm} por (3.20).

Emoras as integrais $\mathcal{S}_{m\pm}$ nas equações (4.7) e (4.8) possam ser efetuadas, a solução não é atraente. Como explicamos no capítulo 2, não podemos aproximar o valor efetivo de k por

k_F , de modo que é mais prático efetuar as integrações numericamente.

Finalmente, tendo determinado todos os γ_n através da expressão (4.9), somos capazes de reescrever o Hamiltoniano H_{probe} na base $\{f_n, \bar{c}_\varepsilon\}$

$$\begin{aligned}
 H_{probe} = & -A \left[\int_{-D}^D d\varepsilon d\varepsilon' \sqrt{1-W(\varepsilon, R)} \sqrt{1-W(\varepsilon', R)} \bar{c}_{\varepsilon\mu}^\dagger \bar{c}_{\varepsilon'\nu} \right. \\
 & + \sum_n \gamma_n \left(\int_{-D}^D d\varepsilon \sqrt{1-W(\varepsilon, R)} \bar{c}_{\varepsilon\mu}^\dagger f_{n\nu} + \int_{-D}^D d\varepsilon \sqrt{1-W(\varepsilon, R)} f_{n\mu}^\dagger \bar{c}_{\varepsilon\nu} \right) \\
 & \left. + \sum_{n,m} \gamma_n \gamma_{n'} f_{n\mu}^\dagger f_{m\nu} \right] \mathbf{I} + H.c., \tag{4.10}
 \end{aligned}$$

com $\mu = \uparrow$ e $\nu = \downarrow$.

A expressão (4.10) para H_{probe} na base $\{\bar{c}_\varepsilon, f_n\}$ revela que a ponta de prova pode ser decomposta em três contribuições: o termo $\bar{c}_{\varepsilon\uparrow}^\dagger \bar{c}_{\varepsilon\downarrow}$ (ou $\Phi_{0\uparrow}^\dagger \Phi_{0\downarrow}$) é associado somente aos estados de onda s da ponta de prova ortogonais aos estados da impureza; a contribuição $f_{n\uparrow}^\dagger f_{m\downarrow}$ (ou $\phi_{\uparrow}^\dagger \phi_{\downarrow}$) abrange somente estados do sistema metálico com a impureza na base de Lanczos $\{f_n\}$; finalmente, elementos da forma $f_n^\dagger \bar{c}_\varepsilon$ e $\bar{c}_\varepsilon^\dagger f_n$ (ou $\phi_{\uparrow}^\dagger \Phi_{0\downarrow}$ e $\Phi_{0\uparrow}^\dagger \phi_{\downarrow}$) são combinações simultâneas dos estados da ponta de prova e da impureza, sendo responsável pela interferência entre ambos.

Na prática, para computar a taxa de relaxação $1/T_1$ em (4.1) precisamos obter os elementos de matriz de H_{probe} entre os autoestados de $\tilde{H}$, isto é,

$$\begin{aligned}
 \langle \tilde{\varphi} | H_{probe} | \tilde{\psi} \rangle \propto & \langle \tilde{\varphi} | \Phi_{0\uparrow}^\dagger \Phi_{0\downarrow} | \tilde{\psi} \rangle + \sum_n \gamma_n \langle \tilde{\varphi} | (\Phi_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} + f_{n\uparrow}^\dagger \Phi_{0\downarrow}) | \tilde{\psi} \rangle \\
 & + \sum_{n,m} \gamma_n \gamma_m \langle \tilde{\varphi} | f_{n\uparrow}^\dagger f_{m\downarrow} | \tilde{\psi} \rangle, \tag{4.11}
 \end{aligned}$$

onde $|\tilde{\varphi}\rangle$ e $|\tilde{\psi}\rangle$ têm energias $\tilde{E}_\varphi$ e $\tilde{E}_\psi$, respectivamente.

A partir da relação (4.11) inferimos que a taxa de relaxação depende somente do cálculo de elementos de matriz da forma $\langle \tilde{\varphi} | \Phi_{0\uparrow}^\dagger \Phi_{0\downarrow} | \tilde{\psi} \rangle$, $\langle \tilde{\varphi} | \Phi_{0\mu}^\dagger \phi_\nu | \tilde{\psi} \rangle$, $\langle \tilde{\varphi} | \phi_\mu^\dagger \phi_\nu | \tilde{\psi} \rangle$ e seus Hermitianos conjugados. Em particular, a contribuição $\Phi_{0\uparrow}^\dagger \Phi_{0\downarrow}$, que chamamos de *contribuição escalar*, corresponde a uma constante e, portanto, não será considerada no cálculo de $1/T_1$.

Assim, vamos trabalhar somente com as componentes $\Phi_{0\mu}^\dagger \phi_\nu$ e $\phi_\mu^\dagger \phi_\nu$, cujas respectivas contribuições serão denotadas *vetorial* e *matricial*. A justificativa para a adoção desta terminologia se encontra no tipo de dependência que cada contribuição tem com os estados acoplados

à impureza: a componente $\Phi_{0\mu}^\dagger f_{n\nu}$ depende de N elementos de matriz da forma $\langle \varphi | f_{n\nu} | \psi \rangle$ e a componente $\phi_\mu^\dagger \phi_\nu$ depende de N^2 elementos. Os detalhes no cálculo das contribuições vetorial e matricial será apresentado a seguir nas subseções 4.2.1 e 4.2.2.

4.2.1 Contribuição vetorial

Voltando à expressão (2.29) derivada no capítulo 2, recordamos que os $\bar{c}_\varepsilon$ desacoplados dos f_n , de modo que as contribuições dos termos contendo $\Phi_{0\mu}$ podem ser tratadas analiticamente.

Substituindo as definições de $\Phi_{0\mu}(R)$ e $\phi_\mu(R)$, respectivamente em (2.25) e (4.3), podemos reescrever o terceiro termo à direita da equação (4.11) como

$$\langle \tilde{\varphi} | \phi_\mu^\dagger(R) \Phi_{0\nu}(R) | \tilde{\psi} \rangle = \sum_n \gamma_n \langle \tilde{\varphi} | f_{n\mu}^\dagger \int_{-D}^D d\varepsilon \sqrt{1 - W(\varepsilon)^2} \bar{c}_{\varepsilon\nu} | \tilde{\psi} \rangle, \quad (4.12)$$

onde $|\tilde{\varphi}\rangle = |\bar{\varphi}\rangle|\varphi\rangle$ and $|\tilde{\psi}\rangle = |\bar{\psi}\rangle|\psi\rangle$, $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ são autoestados de H_A não-perturbado com energias E_φ and E_ψ , respectivamente, e γ_n é definido em (4.9). Segue que

$$\langle \tilde{\varphi} | \phi_\mu^\dagger(R) \Phi_{0\nu}(R) | \tilde{\psi} \rangle = \langle \varphi' | \langle \bar{\varphi} | \phi_\mu^\dagger(R) \int_{-D}^D d\varepsilon \sqrt{1 - W(\varepsilon)^2} \bar{c}_{\varepsilon\nu} | \bar{\psi} \rangle | \psi' \rangle. \quad (4.13)$$

Podemos decompor os elementos de matriz na equação (4.13), separando os $\langle \varphi | f_n^\dagger | \psi \rangle$ dos $\langle \bar{\varphi} | \bar{c}_{\varepsilon\nu} | \bar{\psi} \rangle$, ou seja,

$$\langle \tilde{\varphi} | \phi_\mu^\dagger(R) \Phi_{0\nu}(R) | \tilde{\psi} \rangle = \langle \varphi | \phi_\mu^\dagger(R) | \psi \rangle \langle \bar{\varphi} | \int_{-D}^D d\varepsilon \sqrt{1 - W(\varepsilon)^2} \bar{c}_{\varepsilon\nu} | \bar{\psi} \rangle. \quad (4.14)$$

O segundo termo à direita de (4.14) conecta os estados $|\bar{\varphi}\rangle$ e $|\bar{\psi}\rangle$ pela relação

$$|\bar{\varphi}\rangle = \bar{c}_{\varepsilon\nu} |\bar{\psi}\rangle, \quad (4.15)$$

tal que o elemento de matriz existe somente se o estado $|\bar{\psi}\rangle$ não é vazio.

Assim, o elemento de matriz de $\bar{c}_\varepsilon$ entre os estados de $\bar{H}$ exige que as energias da transição de $|\bar{\varphi}\rangle$ e $|\bar{\psi}\rangle$ satisfaçam

$$\langle \bar{\varphi} | \bar{c}_{\varepsilon\nu} | \bar{\psi} \rangle = \delta(E_{\bar{\varphi}} - E_{\bar{\psi}} - \varepsilon), \quad (4.16)$$

seguindo que

$$\langle \bar{\varphi} | \phi_\mu^\dagger(R) \Phi_{0\nu}(R) | \bar{\psi} \rangle = \langle \varphi | \phi_\mu^\dagger(R) | \psi \rangle \sqrt{1 - W(E_\varphi - E_\psi)^2}. \quad (4.17)$$

Denotando $(1/T_1)_{vet}$ a taxa de relaxação magnética devida ao termo $\langle \bar{\varphi} | \phi_\mu^\dagger(R) \Phi_{0\nu}(R) | \bar{\psi} \rangle$, obtemos

$$\left(\frac{1}{T_1} \right)_{vet} = \frac{4\pi}{\hbar Z} \sum_{|\varphi\rangle, |\psi\rangle} |\langle \varphi | \phi_\mu^\dagger(R) | \psi \rangle|^2 (1 - W(E_\varphi - E_\psi)^2) e^{-\beta(E_\varphi)} f_{FD}(E_\varphi - E_\psi), \quad (4.18)$$

onde Z é a função de partição do sistema H_A não-perturbado incluindo todos os estados $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ e $f_{FD}(\varepsilon)$ é a distribuição de Fermi-Dirac definida como

$$f_{FD}(\varepsilon) = \frac{1}{1 + e^{-\beta\varepsilon}}. \quad (4.19)$$

Manipulando a equação (4.18) obtemos a seguinte expressão analítica para $(1/T_1)_{vet}$

$$\left(\frac{1}{T_1} \right)_{vet} = \frac{4\pi}{\hbar Z} \sum_{|\varphi\rangle, |\psi\rangle} (1 - W(E_\varphi - E_\psi)^2) \frac{|\langle \varphi | \phi_\mu^\dagger(R) | \psi \rangle|^2}{e^{\beta E_\varphi} + e^{\beta E_\psi}}. \quad (4.20)$$

Podemos repetir os passos (4.12)-(4.20) para obter o termo $\langle \varphi | \Phi_{0\mu}^\dagger(R) \phi_\nu(R) | \psi \rangle$. O resultado é equivalente a $(1/T_1)_{vet}$ obtido em (4.20) trocando $|\varphi\rangle$ por $|\psi\rangle$, de modo que a taxa total com ambos os termos cruzados é obtida multiplicando esta expressão por dois.

De acordo com última expressão (4.20), o cálculo de $(1/T_1)_{vet}$, dependente de termos do tipo $\langle \varphi | \phi_\nu^\dagger(R) \Phi_{0\mu}(R) | \psi \rangle$, pode ser efetuado através da computação dos elementos de matriz $\langle \varphi | f_{n\mu}^\dagger | \psi \rangle$ entre os estados do Hamiltoniano H_A não perturbado. Esse procedimento é relativamente simples, uma vez que os $\langle \varphi | f_{n\mu}^\dagger | \psi \rangle$ estão associados aos elementos de matriz reduzidos $\langle \varphi | f_n^\dagger | \psi \rangle$ pelo teorema de Wigner-Eckart. Vimos na seção 3.6.4 que todos os N invariantes de uma dada iteração podem ser obtidos recursivamente a partir dos elementos $\langle \varphi | f_N^\dagger | \psi \rangle$, os quais são um subproduto do procedimento iterativo.

A próxima seção é dedicada ao cálculo da contribuição do termo $\langle \tilde{\varphi} | f_{n\mu}^\dagger f_{m\nu} | \tilde{\psi} \rangle$ à taxa $1/T_1$. Apresentaremos diferentes formas de realizar este cálculo, mostrando suas vantagens e desvantagens no contexto do Grupo de Renormalização Numérico.

4.2.2 Contribuição matricial

Para calcular a contribuição matricial dos operadores $\phi_\uparrow^\dagger(R) \phi_\downarrow(R)$ devemos encontrar os elementos de matriz dos autoestados de $\tilde{H}$. Vimos no capítulo 2 e na seção 4.2.1 que os estados $\tilde{H}_c$ e H_A são desacoplados, de forma que a soma de estados que contribuem para a

taxa $(1/T_1)_{mat}$ associada ao termo matricial é dada por

$$\left(\frac{1}{T_1}\right)_{mat} = \frac{4\pi}{\hbar Z} \sum_{|\varphi\rangle, |\psi\rangle} e^{-\beta E_\varphi} \left| \langle \varphi | \phi_\uparrow^\dagger(R) \phi_\downarrow(R) | \psi \rangle \right|^2 \delta(E_\varphi - E_\psi), \quad (4.21)$$

onde $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ são os autoestados do Hamiltoniano de Anderson H_A .

Rigorosamente, a expressão (4.1) é escrita como

$$\left(\frac{1}{T_1}\right)_{mat} = \frac{4\pi}{\hbar Z} \sum_{|\varphi\rangle, |\psi\rangle} e^{-\beta E_\varphi} \left| \langle \varphi | \phi_\uparrow^\dagger(R) \phi_\downarrow(R) | \psi \rangle \right|^2 \delta(E_\varphi - E_\psi - \hbar\omega), \quad (4.22)$$

de modo que a transição acontece entre os estados $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ que diferem energeticamente pela quantidade $\hbar\omega$.

Na prática, como $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ são estados da banda de condução com energias inicialmente diferentes $E_\varphi > E_\psi$, $H_{probe}(\omega)$ inverte seus spins e desloca a energia E_φ infinitesimalmente. Analiticamente, a diferença energética final entre esses estados pode ser computada como

$$\left(\frac{1}{T_1}\right)_{mat} = \frac{4\pi}{\hbar Z} \sum_{|\varphi\rangle, |\psi\rangle} e^{-\beta E_\varphi} \frac{\left| \langle \varphi | \phi_\uparrow^\dagger \phi_\downarrow | \psi \rangle \right|^2}{\left| \frac{d(E_\varphi(z)) - E_\psi(z)}{dz} \right|_{\hbar\omega = E_\psi - E_\varphi}}, \quad (4.23)$$

onde as energias $E_\varphi(z)$ e $E_\psi(z)$ são os autovalores de H_A no formalismo do Grupo de Renormalização Numérico generalizado (46).

A derivada no denominador da soma à direita da equação (4.23) é exatamente a densidade de estados ρ . Desse modo, o cálculo de $1/(T_1)_{mat}$ depende essencialmente dos elementos de matriz $\langle \varphi | f_{n\mu}^\dagger f_{m\nu} | \psi \rangle$ entre os estados do Hamiltoniano H_A não-perturbado. Nossa tarefa consiste, pois, em calcular

$$\langle \tilde{\varphi} | \phi_\mu^\dagger(R) \phi_\nu(R) | \tilde{\psi} \rangle = \langle \tilde{\varphi} | \tilde{\psi} \rangle \sum_{n,m} \gamma_n \gamma_m \langle \varphi | f_{n\mu}^\dagger f_{m\nu} | \psi \rangle, \quad (4.24)$$

com $\nu = -\mu = (\uparrow, \downarrow)$ e $(n, m = 0, \dots, N)$.

Elementos deste tipo podem ser obtidos de duas formas. A primeira diz respeito à completza dos estados $f_{n\mu}|\varphi\rangle$ e $f_{m\nu}|\psi\rangle$, enquanto a outra consiste em determinar relações recorrência envolvendo os elementos $\langle \varphi | f_n^\dagger f_m | \psi \rangle$ para $n, m = 0, \dots, N$.

Em nosso trabalho, não iremos utilizar a completza para o cálculo dos elementos matriciais: embora a completza seja uma identidade, há erros numéricos envolvendo o truncamento dos estados cujo efeito é mais dramático nas últimas iterações. No apêndice A apresentamos uma tentativa de implementar a completza para o cálculo dos $\langle \varphi | f_{n\mu}^\dagger f_{m\nu} | \psi \rangle$, discutindo os

problemas práticos envolvendo seu uso.

A segunda alternativa que propomos é mais promissora do ponto de vista prático, porque nos leva a uma expressão análoga à relação recursiva (3.83) obtida no capítulo 3 para determinar recursivamente o conjunto de invariantes $\langle \varphi | f_n^\dagger | \psi \rangle$ (com $n = 0, \dots, N$). Uma vez que a implementação da recorrência (3.83) apresenta resultados numéricos satisfatórios (veja o apêndice C), acreditamos que esta maneira de computar os $\langle \varphi | f_{n\mu}^\dagger f_{m\nu} | \psi \rangle$ poderia ser eficiente e mais precisa.

Para obter as relações de recorrência entre os $\langle \varphi | f_{n\mu}^\dagger f_{m\nu} | \psi \rangle$ para todos os inteiros $n, m = 0, \dots, N$, começamos calculando os elementos de matriz dos estados $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ com o comutador

$$[H, f_{n\uparrow}^\dagger f_{m\downarrow}] = [H, f_{n\uparrow}^\dagger] f_{m\downarrow} + f_{n\uparrow}^\dagger [H, f_{m\downarrow}], \quad (4.25)$$

Usando a relação (3.77), calculamos ambos os comutadores à direita da equação (4.25)

$$[H, f_{n\uparrow}^\dagger] f_{m\downarrow} = t_{n-1} f_{n-1\uparrow}^\dagger f_{m\downarrow} + t_n f_{n+1\uparrow}^\dagger f_{m\downarrow}, \quad (4.26)$$

e

$$f_{n\uparrow}^\dagger [H, f_{m\downarrow}] = t_{m-1} f_{n\uparrow}^\dagger f_{m-1\downarrow} + t_m f_{n\uparrow}^\dagger f_{m+1\downarrow}, \quad (4.27)$$

bem como seus respectivos elementos de matriz reduzidos

$$\begin{aligned} t_{n-1} \langle \varphi | f_{n-1}^\dagger f_m | \psi \rangle + t_n \langle \varphi | f_{n+1}^\dagger f_m | \psi \rangle &= \langle \varphi | [H, f_n^\dagger] f_m | \psi \rangle \\ &= E_\varphi \langle \varphi | f_n^\dagger f_m | \psi \rangle - \langle \varphi | f_n^\dagger H f_m | \psi \rangle, \end{aligned} \quad (4.28)$$

e

$$\begin{aligned} t_{m-1} \langle \varphi | f_n^\dagger f_{m-1} | \psi \rangle + t_m \langle \varphi | f_n^\dagger f_{m+1} | \psi \rangle &= \langle \varphi | f_n^\dagger [H, f_m] | \psi \rangle \\ &= \langle \varphi | f_n^\dagger H f_m | \psi \rangle - E_\psi \langle \varphi | f_n^\dagger f_m | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Substituindo as relações (4.28) e (4.29) em (4.25), obtemos

$$\begin{aligned} (E_\varphi - E_\psi) \langle \varphi | f_n^\dagger f_m | \psi \rangle &= t_{n-1} \langle \varphi | f_{n-1}^\dagger f_m | \psi \rangle + t_n \langle \varphi | f_{n+1}^\dagger f_m | \psi \rangle \\ &\quad - t_{m-1} \langle \varphi | f_n^\dagger f_{m-1} | \psi \rangle - t_m \langle \varphi | f_n^\dagger f_{m+1} | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (4.30)$$

A equação (4.30) é semelhante à relação de recorrência (3.83) para os $f_n^\dagger$, exigindo um pouco mais de cuidado por envolver dois índices. Em princípio, seria conveniente representar a recorrência (4.30) através de uma matriz de elementos reduzidos $\langle \varphi | f_n^\dagger f_m | \psi \rangle$ com $N+1$ linhas e $N+1$ colunas, tal como ilustramos na figura 4.1. Assim, para cada par de estados $|\varphi\rangle =$

$|q', s', r'\rangle$ e $|\psi\rangle = |q, s, r\rangle$ temos de computar uma matriz de invariantes $\langle q', s', r' | f_n^\dagger f_m | q, s, r \rangle$ ($n, m = 0, \dots, N$) cujos elementos são utilizados no cálculo da taxa $1/(T_1)^{mat}$.

Obviamente, como os operadores f_n ($f_n^\dagger$) aniquilam (criam) elétrons em um dado estado e, por conseguinte, modificam sua carga e seu spin, precisamos identificar quais estados $|q, s, r\rangle$ e $|q', s', r'\rangle$ contribuem efetivamente para a relaxação, ou seja, devemos determinar as regras de seleção para a carga e o spin desses estados quando conectados pelo operador $f_n^\dagger f_m$ ($n, m = 0, \dots, N$). Para um ket $|q, s, r\rangle$ fixo, computamos apenas as matrizes de invariantes $\langle q', s', r' | f_n^\dagger f_m | q, s, r \rangle$ diagonais, tais que $|q', s', r'\rangle$ e $|q, s, r\rangle$ têm $q' = q$ e $s' = s$, com componentes s_z que podem diferir entre si.

Figura 4.1 – Disposição dos elementos invariantes $\langle \varphi | f_n^\dagger f_m | \psi \rangle$ em uma matriz de n linhas e m colunas, com $m, n = 0, \dots, N$. Cada elemento $\langle \varphi | f_n^\dagger f_m | \psi \rangle$ pode ser determinado pelos vizinhos $\langle \varphi | f_{n\pm 1}^\dagger f_{m\pm 1} | \psi \rangle$. Fonte: elaborada pela autora.

Tendo definido os estados $|q, s, r\rangle$ e $|q', s', r'\rangle$ que contribuem para a taxa $1/(T_1)^{mat}$, podemos prosseguir com o cálculo dos conjuntos de N^2 invariantes representados pela matriz

da figura 4.1. Por ora, sabemos que um dado elemento $\langle \varphi || f_n^\dagger f_m || \psi \rangle$ pode ser determinado através da relação de recorrência (4.30), o que exige conhecimento prévio dos seus vizinhos $\langle \varphi || f_{n-1}^\dagger f_m || \psi \rangle$, $\langle \varphi || f_n^\dagger f_{m+1} || \psi \rangle$, $\langle \varphi || f_{n+1}^\dagger f_m || \psi \rangle$ e $\langle \varphi || f_n^\dagger f_{m-1} || \psi \rangle$. Observando que nas bordas da matriz a relação (4.30) é mais simples, devemos ser capazes de encontrar uma forma eficiente de determinar todo o conjunto de N^2 invariantes entre estados $|\psi\rangle$ e $|\varphi\rangle$.

Reescrevendo a relação (4.30) para um elemento da N -ésima linha, segue que

$$(E_\varphi - E_\psi) \langle \varphi || f_N^\dagger f_m || \psi \rangle = t_{N-1} \langle \varphi || f_{N-1}^\dagger f_m || \psi \rangle - t_{m-1} \langle \varphi || f_N^\dagger f_{m-1} || \psi \rangle - t_m \langle \varphi || f_N^\dagger f_{m+1} || \psi \rangle, \quad (4.31)$$

ou, invertendo a relação para destacar o elemento $\langle \varphi || f_{N-1}^\dagger f_m || \psi \rangle$,

$$\begin{aligned} \langle \varphi || f_{N-1}^\dagger f_m || \psi \rangle &= \frac{t_{m-1}}{t_{N-1}} \langle \varphi || f_N^\dagger f_{m-1} || \psi \rangle + \frac{t_m}{t_{N-1}} \langle \varphi || f_N^\dagger f_{m+1} || \psi \rangle \\ &+ \frac{(E_\varphi - E_\psi)}{t_{N-1}} \langle \varphi || f_N^\dagger f_m || \psi \rangle. \end{aligned} \quad (4.32)$$

A equação (4.32) nos revela que conhecendo o conjunto de elementos de matriz reduzidos da linha N , é possível determinar os invariantes da linha $N - 1$. Na prática, podemos reescrever a relação (4.31) para quaisquer elemento da borda da matriz de invariantes da figura 4.1, ou seja, para elementos do tipo $\langle \varphi || f_n^\dagger f_N || \psi \rangle$, $\langle \varphi || f_n^\dagger f_0 || \psi \rangle$, $\langle \varphi || f_0^\dagger f_n || \psi \rangle$ ou $\langle \varphi || f_N^\dagger f_n || \psi \rangle$ ($n = 0, \dots, N$). A relação obtida será análoga a (4.32) e permitirá determinar os elementos das linhas e colunas adjacentes indexadas pelos índices $N - 1$ e 1 . Como a matriz dos invariantes $\langle \varphi || f_n^\dagger f_m || \psi \rangle$ é simétrica, determinar a linha $\langle \varphi || f_n^\dagger f_N || \psi \rangle$ é equivalente a determinar a coluna $\langle \varphi || f_N^\dagger f_n || \psi \rangle$, valendo o mesmo para $\langle \varphi || f_n^\dagger f_0 || \psi \rangle$ e $\langle \varphi || f_0^\dagger f_n || \psi \rangle$. Conhecendo agora o conjunto de elementos da linha $N - 1$, podemos reescrever a relação de recorrência (4.30) para todos os $\langle \varphi || f_{N-1}^\dagger f_m || \psi \rangle$, o que nos possibilita determinar toda a linha $N - 2$. Prosseguindo até $N = 0$ a matriz de invariantes pode ser facilmente computada.

Em particular, para o caso em que os estados $|q, s, r\rangle$ e $|q', s', r'\rangle$ coincidem, a diferença de energias é nula. As relações para os invariantes das linhas $N - 1$ e $N - 2$ tornam-se

$$\begin{aligned} \langle q, ds, r' || f_m^\dagger f_{N-1} || q, ds, r \rangle &= \frac{t_m}{t_{N-1}} \langle q, ds, r' || f_{m+1}^\dagger f_N || q, ds, r \rangle \\ &+ \frac{t_{m-1}}{t_{N-1}} \langle q, ds, r' || f_{m-1}^\dagger f_N || q, ds, r \rangle \end{aligned} \quad (4.33)$$

$$\begin{aligned}
\langle q, ds, r' | f_m^\dagger f_{n-1} | q, ds, r \rangle &= \frac{t_m}{t_{n-1}} \langle q, ds, r' | f_{m+1}^\dagger f_n | q, ds, r \rangle \\
&+ \frac{t_{m-1}}{t_{n-1}} \langle q, ds, r' | f_m - 1^\dagger f_n | q, ds, r \rangle \\
&- \frac{t_n}{t_{n-1}} \langle q, ds, r' | f_m^\dagger f_{n+1} | q, ds, r \rangle,
\end{aligned} \tag{4.34}$$

respectivamente, o que é ilustrado na figura 4.2.

As equações (4.33) determinam, respectivamente, os elementos ao longo das linhas $N - 1$ e $N - 2$ quando um estado $|q, s, r\rangle$ faz transições via f_n e retorna ao mesmo estado.

A implementação do cálculo recursivo dos elementos dados na equação (4.30) é relativamente simples e eficiente, desde que tenhamos conhecimento prévio de todos os elementos da linha $n = N$ e da coluna $m = 0$. Por outro lado, a computação desses últimos requer um método robusto, já que a completeza não pode ser usada no contexto numérico. A proposta que apresentamos no apêndice B mostra como calcular os elementos $\langle \varphi | f_N^\dagger f_m | \psi \rangle$ ($m = 0, \dots, N$) e $\langle \varphi | f_n^\dagger f_0 | \psi \rangle$ ($n = 0, \dots, N - 1$) através de rotações. Esse procedimento é análogo ao desenvolvido na seção 3.6.3 onde mostramos o cálculo dos invariantes, mas exige que outros elementos de matriz sejam calculados além dos diagonais.

A ideia básica da rotação consiste em reescrever os elementos de matriz da iteração N na base de estados da iteração $N - 1$ e através do teorema de Wigner-Eckart identificar os invariantes requeridos pela rotação. Para tanto, começamos reescrevendo os autoestados $|q, s, s_z, r\rangle$ e $|q', s', s'_z, r'\rangle$ na base primitiva

$$\begin{aligned}
\langle q', s', s'_z, r' | f_{m\uparrow}^\dagger f_{m\downarrow} | q, s, s_z, r \rangle &= \sum_{p, p'} U(p', r') U(p, r) \\
&\times \langle Q', S', S'_z, p' | \mathcal{O}_{g_{p'}} f_{m\uparrow}^\dagger f_{m\downarrow} \mathcal{O}_{g_p} | Q, S, S_z, p \rangle,
\end{aligned} \tag{4.35}$$

onde U é a matriz da transformação unitária que diagonaliza H_N ; $\mathcal{O}_g$ é um dos operadores definidos pelas equações (3.57)-(3.60); $|Q, S, S_z, p\rangle$ e $|Q', S', S'_z, p'\rangle$ são os estados da iteração $N - 1$ que deram origem aos estados $|q, s, s_z, r\rangle$ e $|q', s', s'_z, r'\rangle$ na iteração N .

Em seguida, usamos o teorema de Wigner-Eckart para relacionar os elementos de matriz $\langle q', s', s'_z, r' | f_{m\uparrow}^\dagger f_{m\downarrow} | q, s, s_z, r \rangle$ aos invariantes para obtermos a expressão

$$\begin{aligned}
\langle q', s', s'_z, r' | f_{m\uparrow}^\dagger f_{m\downarrow} | q, s, s_z, r \rangle &= \begin{pmatrix} s' & \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & s + \frac{1}{2} \end{array} \right. \\ s'_z & \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & s_z - \frac{1}{2} \end{array} \right. \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s & \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & s \pm \frac{1}{2} \end{array} \right. \\ s_z & \left| \begin{array}{cc} -\frac{1}{2} & s_z + \frac{1}{2} \end{array} \right. \end{pmatrix} \\
&\times \langle q', s', r' | f_n^\dagger f_m | q, s, r \rangle.
\end{aligned} \tag{4.36}$$

onde a matriz $\mathcal{G}$ abrange coeficientes dependentes dos gêneros $g_{p'}$ e g_p . Os demais casos são discutidos no apêndice B.

Em síntese, este capítulo abordou o tratamento analítico do Hamiltoniano da ponta de prova H_{probe} na base de Lanczos e o cálculo da taxa de relaxação magnética longitudinal $1/T_1$. Conseguimos mostrar que o operador $\phi_\mu(R)$ pode ser definido como combinação linear dos $f_{n\mu}$ com coeficientes γ_n relacionados à distância R entre a impureza e ponta de prova e à energia. Com isto, pudemos obter a expressão (4.10) para H_{probe} na base $\{\bar{c}_\varepsilon, f_n\}$, cuja projeção nos estados $\langle\varphi|$ e $|\psi\rangle$ do Hamiltoniano nos levou a identificar três contribuições para relaxação.

A taxa associada à contribuição escalar, dependente somente dos estados desacoplados da impureza, foi atribuída a uma constante de fundo que não afeta a relaxação total do sistema. Por outro lado, o termo dependente dos estados da impureza e da ponta de prova, denominado contribuição vetorial, foi calculado analiticamente na expressão (4.20). Mostramos que a taxa $(1/T_1)_{vet}$ associada a esta contribuição depende basicamente dos invariantes $\langle\varphi||f_n^\dagger||\psi\rangle$ modulados por uma função de R e das energias E_φ e E_ψ . A contribuição matricial foi associada somente aos estados da impureza. Com a relação (4.21) demonstramos que a taxa $1/(T_1)_{mat}$ requer o cálculo de elementos de matriz da forma $\langle\varphi|f_{n\uparrow}^\dagger f_{m\downarrow}|\psi\rangle$. Mostramos que a computação destes poderia ser feita implementando a recorrência (4.30), desde que conhecido o conjunto de elementos $\langle\varphi|f_{n\uparrow}^\dagger f_{0\downarrow}|\psi\rangle$ ($n = 0, \dots, N$) e $\langle\varphi|f_{N\uparrow}^\dagger f_{m\downarrow}|\psi\rangle$ ($m = 0, \dots, N$).

Finalmente, podemos prosseguir para a abordagem numérica deste trabalho. No próximo capítulo dedicaremos especial atenção aos resultados numéricos da contribuição vetorial $(1/T_1)_{vet}$, discutindo seu comportamento com função T e $k_F R$ e dando uma interpretação física da fenomenologia envolvida nesta taxa.

CAPÍTULO 5

Resultados

There are two possible outcomes: if the result confirms the hypothesis, then you've made a measurement. If the result is contrary to the hypothesis, then you've made a discovery.

Enrico Fermi

A seguir, apresentaremos os resultados numéricos da taxa de relaxação associada à contribuição vetorial. Antes, porém, de iniciarmos esta discussão, vamos fazer uma breve análise do comportamento dos coeficientes γ_n definidos para a transformação do operador $\phi_\mu(R)$. Em particular, faremos um estudo do comportamento assintótico das integrais $\mathcal{S}_{m\pm}$ discutindo a validade das expansões e seu efeito sobre a taxa de relaxação.

5.1 Coeficientes da transformação de Grupo de Renormalização

No capítulo 4 vimos que é possível escrever o Hamiltoniano H_{probe} na base $\{f_n\}$ do NRG definindo a transformação (4.3) para o operador $\phi_\mu(R)$. Com isto, a atuação do operador $\phi_\mu(R)$ sobre os autoestados de H_A torna-se uma tarefa simples, pois depende de elementos de matriz (análogos aos invariantes) multiplicados por amplitudes proporcionais às integrais $\mathcal{S}_{m\pm}$ multiplicadas pelos coeficientes da transformação unitária u_{nm} e v_{nm} da definição (3.13).

Os coeficientes u_{nm} podem ser computados pela relação de recorrência (3.29) ou ainda através da função geradora

$$U_n(z) = \sum_{m=0}^{\infty} u_{nm} z^m. \quad (5.1)$$

Figura 5.1 – Coeficientes $u_{10,m}$ e $u_{9,m}$ para $\Lambda = 3.0$. O valor absoluto é máximo quando $m = n/2$. Para $m > n/2$, os coeficientes decaem à taxa $\Lambda^{(n/2-m)/2}$. O valor máximo de n é definido pelos parâmetros do modelo, E_{min} e Λ , enquanto m é arbitrariamente grande. O mesmo gráfico para $n > 4$ revela que os u_{nm} dependem somente da diferença $n/2 - m$. Fonte: elaborada pela autora.

Podemos observar o comportamento assintótico da função geradora $U_n(z)$. Para n par, u_{nm} decai à taxa $\Lambda^{-m/2}$. Para n ímpar, o decaimento é proporcional a $\Lambda^{-3m/2}$. Essa análise pode ser feita explicitamente, decompondo a função geradora $U_n(z)$ em funções polinomiais

pares e ímpares, o que é feito através da relação (10)

$$U_n(z) = \left(\frac{1 - \Lambda^{-(2n+1)}}{2\Lambda^{n(n-1)/2}} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{1 - z\Lambda^{-(n+1/2)}} \right) \times \begin{cases} \prod_{r=0}^{(n-2)/2} \frac{1 - z\Lambda^{2r+1/2}}{1 - z\Lambda^{-(2r+1/2)}}, & n \text{ par} \\ \prod_{r=0}^{(n-3)/2} \frac{1 - z\Lambda^{2r+3/2}}{1 - z\Lambda^{-(2r+3/2)}}, & n \text{ ímpar.} \end{cases} \quad (5.2)$$

Em particular, para $n = 0$ temos

$$U_0(z) = \sqrt{\frac{1 - \Lambda^{-1}}{2}} \left(\frac{1}{1 - z\Lambda^{-(n+1/2)}} \right), \quad (5.3)$$

seguindo que

$$u_{0m} = \frac{\alpha_m}{\sqrt{2}}. \quad (5.4)$$

Ainda no capítulo 4 mostramos que os coeficientes γ_n envolvidos nesta transformação são escritos na forma geral através da equação (4.9). Com isto, o conjunto de γ_n ($n = 0, \dots, N$) requer o cálculo dos coeficientes u_{nm} , abordados anteriormente, e das integrais $\mathcal{S}_{m\pm}$, que devem ser computadas numericamente dado que estas não têm solução analítica.

A partir dos valores de γ_n obtidos a partir da integração numérica das somas $\mathcal{S}_{m\pm}$, é interessante observar o que acontece com ε atinge os limites de altas e baixas energias. Admitimos, em princípio, que ε pode assumir valores

$$\mathcal{E}_m = D \frac{1 - \Lambda^{-1}}{\log \Lambda} \Lambda^{-m}. \quad (5.5)$$

Como estamos interessados em distâncias R superiores à escala atômica, usualmente $kR \gg 1$. Para m pequeno, tal que $k_F R \mathcal{E}_m / D \gg 1$, as integrais à direita das equações (4.7) e (4.8) são muito pequenas, pois o integrando oscila rápido dentro dos intervalos $\mathcal{I}_{m\pm}$. Neste caso, procedemos com o cálculo numérico das integrais $\mathcal{S}_{m\pm}$ para $m < m_0$, onde m_0 é o menor inteiro satisfazendo a condição

$$k_F R \mathcal{E}_{m_0} \gtrsim D. \quad (5.6)$$

Assim, encontrando m_0 a partir de (5.6), para todos os demais números $m \geq m_0$, é conveniente substituir kR por $k_F R$ no denominador de $W(\varepsilon, R)$. Essa simplificação facilita o cálculo das integrais $\mathcal{S}_{m\pm}(R)$, que podem ser escritas como

$$\mathcal{S}_{m\pm} = \frac{1}{k_F R} \int_{\mathcal{I}_{m\pm}} \sin(kR) d\varepsilon. \quad (5.7)$$

A integral (5.7) é solúvel analiticamente, resultando em

$$\mathcal{S}_{m\pm}(R) = \frac{2D}{(k_F R)^2} \sin \left[k_F R \left(1 \pm \frac{1 - \Lambda^{-1}}{2} \Lambda^{-m} \right) \right] \sin \left[k_F R \left(\frac{1 - \Lambda^{-1}}{2} \Lambda^{-m} \right) \right], \quad (5.8)$$

ou ainda

$$\mathcal{S}_{m\pm}(R) = \frac{2D}{(k_F R)^2} \sin [k_F R (1 \pm \mathcal{E}_m)] \sin [k_F R \alpha_m^2 / 2], \quad (5.9)$$

onde usamos as relações (3.22) e (5.6) para os coeficientes α_m e $\mathcal{E}_m$.

Para $m \gg m_0$, podemos distinguir os coeficientes γ_n pela paridade de n . Substituindo as somas $\mathcal{S}_{m\pm}$ expandidas em (5.9) na equação (4.9), obtemos

$$\gamma_n(R) = \sum_{m=m_0}^{\infty} \frac{2D}{(k_F R)^2} (\sin [k_F R (1 + \mathcal{E}_m)] + (-1)^n \sin [k_F R (1 - \mathcal{E}_m)]) \frac{u_{nm}}{u_{0m}}, \quad (5.10)$$

onde, considerando a soma em m uma constante, destacamos a amplitude $\gamma_n(R) \propto \frac{\sin(k_F R + \theta)}{(k_F R)^2}$ com θ sendo uma fase.

A fase θ , além de influenciar a amplitude de oscilação, nos permite associar à forma geral dos coeficientes γ_n soluções pares e ímpares. No caso em que $\theta = n\pi$ com $n \in \mathbb{Z}$, os coeficientes γ_n comportam-se como $\sin(k_F R)$ e, portanto, temos uma solução ímpar. Por outro lado, para $\theta = (n + 1/2)\pi$ com $n \in \mathbb{Z}$, temos uma solução par $\gamma_n \propto \cos(k_F R)$.

Distinguir as soluções γ_n pares e ímpares é equivalente a fixar o valor de $k_F R$ múltiplo de π ou múltiplo de $\frac{\pi}{2}$. Para $k_F R = n\pi$, com $n \in \mathbb{Z}$ a equação (5.10) é exatamente

$$\gamma_n(R) = \frac{4D \cos(k_F R)}{(k_F R)^2} \sum_{m=m_0}^{\infty} \sin \left(\frac{k_F R \alpha_m^2}{2} \right) \sin(k_F R \mathcal{E}_m) \frac{u_{nm}}{u_{0m}}, \quad (5.11)$$

enquanto para $k_F R = (n + \frac{1}{2})\pi$, com n inteiro, vale

$$\gamma_n(R) = \frac{4D \sin(k_F R)}{(k_F R)^2} \sum_{m=m_0}^{\infty} \sin \left(\frac{k_F R \alpha_m^2}{2} \right) \cos(k_F R \mathcal{E}_m) \frac{u_{nm}}{u_{0m}}. \quad (5.12)$$

Em particular, para m suficientemente grande, os valores de $\mathcal{E}_m$ e α_m são cada vez menores. Nesta situação, como $k_F R \mathcal{E}_m \ll 1$, podemos expandir as expressões (5.11) e (5.12) em

$$\gamma_n(R) \approx (\pm 1) 4D \sum_m^{\infty} \mathcal{E}_m u_{0m} u_{nm} \approx (\pm 1) 4D \sum_m^{\infty} u_{1m} u_{nm}. \quad (5.13)$$

e

$$\gamma_n(R) = \frac{\pm 4D}{k_F R} \sum_m^{\infty} u_{0m} u_{nm}. \quad (5.14)$$

Figura 5.2 – Coeficientes $\gamma_n(R)$ para $k_F R = n\pi$ com $n \in [1000, 100, 10, 1]$. O número n de iteração característico $\mathcal{N}_{k_F R}$ no qual γ_n é máximo aparece destacado para cada um dos casos mostrados na figura. Fonte: elaborada pela autora.

Nas figuras 5.2 e 5.3 mostramos os coeficientes $\gamma_n(R)$ como função de n para $k_F R = n\pi$ e $k_F R = (n + 1/2)\pi$ com $r \in [1000, 100, 10, 1]$. Estes resultados foram obtidos calculando numericamente as integrais $\mathcal{S}_{m\pm}$ através da regra de Simpson. O parâmetro de discretização escolhido foi $\Lambda = 3.0$

Em geral, observamos que há um valor n característico no qual o coeficiente γ_n é máximo e, portanto, maior será sua contribuição associada aos $\phi_\mu(R)$. Esses coeficientes podem ser calculados com a relação

$$\mathcal{N}_{k_F R} = \begin{cases} \left\lceil \frac{\log(k_F R)}{\log(\sqrt{\Lambda})} \right\rceil, & \text{se } k_F R = n\pi \\ \left\lceil \frac{\log(k_F R)}{\log(\sqrt{\Lambda})} \right\rceil + 1, & \text{se } k_F R = (n + \frac{1}{2})\pi, \end{cases} \quad (5.15)$$

onde $\lceil x \rceil$ denota a parte inteira de x arredondada para cima, ou o *teto* de x .

Figura 5.3 – Coeficientes $\gamma_n(R)$ para $k_F R = (n + \frac{1}{2})\pi$ com $n \in [1000, 100, 10, 1]$. Para cada valor de $k_F R$ destacamos a iteração característica $\mathcal{N}_{k_F R}$, calculada através da equação (5.15). Conforme $k_F R$ fica menor, a contribuição dos coeficientes γ_0 vai se tornando cada vez maior, superando o pico típico em $n = \mathcal{N}_{k_F R}$. Comparando estes resultados com a figura 5.2, notamos que esse efeito é mais proeminente para valores $k_F R$ múltiplos de $\frac{\pi}{2}$, conforme esperado pela expansão dos γ_n na equação (5.10). Fonte: elaborada pela autora.

Em primeira aproximação, poderíamos calcular $\mathcal{N}_{k_F R}$ conforme a equação (5.15) e considerar somente o coeficiente γ_n associado a $\mathcal{N}_{k_F R}$, desprezando os demais termos. Contudo, para o caso em que $k_F R$ é um múltiplo inteiro de $\frac{\pi}{2}$ essa aproximação não seria boa: o coeficiente γ_0 vai aumentando a medida que diminuimos $k_F R$ e supera os demais γ_n ($n = 1, \dots, N$), como podemos observar na figura 5.3.

Em suma, as expansões (5.11) e (5.12), bem como a identificação dos valores de $\mathcal{N}_{k_F R}$ nos quais γ_n é máximo, são ilustrativas para a análise de propriedades que possam ser mapeadas no operador $\phi_\mu(R)$. Isto será exemplificado na seção subsequente com a taxa de relaxação $(1/T_1)_{vet}$.

5.2 A taxa de relaxação associada à contribuição vetorial

No capítulo 4, mostramos que a contribuição dos termos cruzados $f_n^\dagger \bar{c}_\varepsilon (\bar{c}_\varepsilon^\dagger f_n)$ depende somente dos elementos de matriz $\langle \varphi | f_n^\dagger | \psi \rangle$ multiplicados por uma amplitude dependente das energias e da distância R . A taxa de relaxação devida a esta contribuição, que denominamos vetorial, tem a forma

$$\left(\frac{1}{T_1} \right)_{vet} \propto \frac{4\pi}{\hbar Z} \sum_{|\varphi\rangle, |\psi\rangle} (1 - W^2(k_{\Delta E} R)) \frac{|\sum \gamma_n(R) \langle \varphi | f_n^\dagger | \psi \rangle|^2}{e^{\beta E_\varphi} + e^{\beta E_\psi}}, \quad (5.16)$$

onde $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ são autoestados do Hamiltoniano H_N , $k_{\Delta E} = k_F (1 + \Delta E/D)$ e $\Delta E = E_\varphi - E_\psi$.

Ao longo das iterações, as energias ε dos autovalores $E_{\varphi'}$ e $E_{\psi'}$ vão ficando cada vez menores, já que estão essencialmente associadas à temperatura do sistema. Quando $T < T_k$ estamos no regime de baixas energias, que é exatamente a zona de interesse relacionada à manifestação do efeito Kondo.

Para um R fixo e ε pequeno recaímos na aproximação (5.7) para as integrais $\mathcal{S}_{m\pm}$. Nesta situação, podemos estudar o comportamento da função seno no limites de baixas energias. Fazendo a expansão para ε pequeno, segue que

$$\sin(kR) \approx \begin{cases} \sin(k_F R) \left(1 - \frac{(k_F R)^2}{2} \frac{\varepsilon^2}{D^2}\right) & \text{se } k_F R = (n + \frac{1}{2})\pi \\ (k_F R \frac{\varepsilon}{D}) \cos(k_F R) & \text{se } k_F R = n\pi. \end{cases} \quad (5.17)$$

onde $n \in \mathbb{Z}$.

Assim como os coeficientes γ_n , a separação das soluções pares e ímpares na expansão (5.17) nos permite diferenciar diferentes comportamentos conforme o valor de $k_F R$ é múltiplo de π ou de $\pi/2$. Uma vez que a taxa $(1/T_1)_{vet}$ está associada à interferência entre os estados acoplados com a ponta de prova e com a impureza, devemos ser capazes de identificar os pontos π e $\pi/2$ com os casos de interferência construtiva ou destrutiva. Para tanto, vamos inicialmente analisar as oscilações de Friedel da taxa $(1/T_1)_{vet}$ em função da distância $k_F R$. Em seguida, mostraremos qual a dependência da taxa de relaxação com a temperatura para os casos de interferência construtiva, destrutiva e para um caso onde não há oscilação de Friedel. Nessa dissertação, mostraremos os resultados para o modelo de Anderson simétrico. Generalizações para o caso assimétrico serão contempladas em trabalhos futuros.

Os parâmetros de entrada do programa são apresentados na tabela 5.1, onde D , ε_d e U denotam as energias do Hamiltoniano de Anderson; Λ é o parâmetro de discretização; E_{min} corresponde à temperatura limitando do número N de iterações; E_{UV} é a energia de corte para o truncamento de estados; β_0 denota a temperatura inicial a partir da qual o sistema é resfriado.

Tabela 5.1 – Parâmetros de entrada do código adotados no cálculo da taxa de relaxação $(1/T_1)_{vet}$.

D	ε_d	U	Λ	E_{min}	E_{UV}	β_0
1.0	-15.0	30.0	2.4	10^{-11}	27.0	0.4

Fonte: elaborada pela autora.

Uma vez escolhidos os parâmetros para o modelo de Anderson e para o NRG, computamos o cálculo da taxa $(1/T_1)_{vet}$ e estudamos seu comportamento como função da temperatura T e da distância R , considerando a última no conjunto $k_F R = [n\pi, (n+1/2)\pi, (n+1/4)\pi]$, com $n \in \mathbf{Z}$. Nessas condições, a temperatura de Kondo foi calculada* como $k_b T_K = 1.2512 \times 10^{-5}$, de modo que o raio de Kondo associado seria $R_K \approx 729 \times 10^4$.

Inicialmente, analisamos a componente vetorial como função da distância. Na figura 5.4 mostramos as oscilações de Friedel de $(1/T_1)_{vet}$ no ponto fixo de baixa temperatura.

Figura 5.4 – Oscilações de Friedel no ponto fixo de temperatura $T \ll T_K$. Pontos destacados com setas correspondem aos máximos e aos nós das oscilações. O ponto $(n+1/4)\pi$ combina os comportamentos destrutivo e construtivo. Fonte: elaborada pela autora.

*Usamos a definição da condutância para calcular T_K

A curva apresentada na figura 5.4 representa as oscilações da taxa de relaxação quando $T \ll T_K$. O período das oscilações é 2π com os máximos ocorrendo em $(2n+1)\pi$ (múltiplos inteiros de π) e os mínimos próximos a $\pi/4$. Os nós das oscilações equivalem a pontos associados a distâncias na forma $2n\pi$ e $(n+1/2)\pi$. O ponto $(n+1/4)\pi$ é ilustrativo para analisar distâncias que combinam ambos os comportamentos destrutivo e construtivo da relaxação $(1/T_1)_{vet}$. Assim, em seguida, vamos analisar as dependências térmicas dos nós da oscilação $2n\pi$ e $(n+1/2)\pi$ e de pontos da forma $(n+1/4)\pi$.

Figura 5.5 – Contribuição vetorial para a taxa de relaxação $1/T_1$ com $k_F R = (n + \frac{1}{2})\pi$. A correspondente parcela da taxa é proporcional a $(k_F R)^2$ e decai para baixas temperaturas. A pequenas distâncias, no limite de altas temperaturas, a curva pode ser mapeada na condutância $\mathcal{G}_{side}$ de um dispositivo formato T. Fonte: elaborada pela autora.

Com relação à dependência térmica de $(1/T_1)_{vet}$ para distâncias fixas, podemos isolar os casos $k_F R = (n + 1/2)\pi$ e $k_F R = n\pi$ e mostrar o que acontece quando resfriamos o sistema. A figura 5.5 ilustra a transição entre o ponto de interferência de construtiva para destrutiva como função da temperatura para distâncias $k_F R = (n + 1/2)\pi$ com $n \in [10, 10^2, 10^3, 10^4, 10^5, 10^6, 10^7]$. No regime de altas temperaturas, observamos que as curvas associadas às menores distâncias tendem à mesma curva uninversal descrevendo a condutância

$\mathcal{G}_{side}$ para o dispositivo em formato $T^\dagger$. No limite $T \rightarrow 0$, assim como a condutância, a taxa de relaxação decai rapidamente, mas atinge um patamar não-nulo.

Por outro lado, para a transição entre a interferência destrutiva para construtiva (distâncias $k_F R = n\pi$, com $n \in \mathbb{Z}$), a taxa de relaxação começa baixa e vai aumentando até atingir um patamar constante, como mostramos na figura 5.6. Analogamente ao caso anterior, podemos identificar um comportamento semelhante ao da curva universal que descreve a condutância $\mathcal{G}_{SET}$ do transistor de um elétron.

Figura 5.6 – Contribuição para a taxa de relaxação $1/T_1$. com $k_F R = n\pi$. A contribuição começa muito pequena para altas temperaturas e aumenta até atingir um patamar constante em $T < T_K$. O comportamento global é análogo ao da condutância $\mathcal{G}_{SET}$ de um transistor de um elétron. Fonte: elaborada pela autora.

Nos nós das oscilações (figuras 5.5 e 5.6, respectivamente), observamos uma mudança no comportamento térmico de $(1/T_1)_{vet}$ quando ultrapassamos a temperatura de Kondo e, consequentemente, o raio de Kondo R_K . Esse efeito é mais proeminente no caso em que o nó da oscilação marca uma transição de interferência construtiva para destrutiva, especificamente quando as curvas $R > R_K$ passam a se destacar do comportamento universal análogo à condutância $\mathcal{G}_{side}$. Um efeito interessante diz respeito aos picos que ocorrem a diferentes temperaturas para cada uma das distâncias consideradas e a partir dos quais começamos a

[†]Os detalhes envolvendo o cálculo da condutância $\mathcal{G}_{side}$ *side-coupled* e seu resultado numérico são apresentados no apêndice C.

observar os efeitos da relaxação. Esses máximos estão associados ao comprimento térmico de de Broglie $\lambda_B = 2\pi\hbar v_F/k_B T$, de modo que para distâncias $R > \lambda_B$ estamos em uma região cega aos efeitos quânticos e, assim, não há sinal de relaxação magnética. Uma vez imersos na região $R < \lambda_B$, o sinal associado à $(1/T_1)_{vet}$ torna-se visível e conseguimos capturar a interferência entre os estados acoplados à impureza e à ponta de prova.

Figura 5.7 – Taxa de relaxação $(1/T_1)_{vet}$ em função da temperatura na ausência de oscilação. A altas temperaturas, a componente vetorial de $1/T_1$ mescla os comportamentos das condutâncias $\mathcal{G}_{side}$ e $\mathcal{G}_{SET}$. A mudança de comportamento ocorre nas vizinhanças do raio da nuvem Kondo $R_K = \hbar v_F/k_B T_K$, confirmando a hipótese de que o raio seria encontrado em uma escala de distância mesoscópica. Fonte: elaborada pela autora.

Voltando à figura 5.4, nos resta analisar a dependência térmica da taxa de relaxação para pontos onde temos uma mistura dos comportamentos destrutivo e construtivo, ou seja, para distâncias $k_F R = (n + \pi/4)$, com $n \in \mathbb{Z}$. Na figura 5.7 apresentamos a taxa $(1/T_1)_{vet}$ como função da temperatura para pequenas e grandes distâncias. Podemos observar a transição entre os comportamentos das figuras 5.5 e 5.6 para $R > R_K$ e $R < R_K$, respectivamente. Em outras palavras, dentro na nuvem, após passarmos pela temperatura associada ao pico de de Broglie, a taxa de relaxação decai até atingir o patamar constante. Fora da nuvem, por outro lado, a taxa começa próxima de zero e atinge o patamar constante após passar pelo pico de de Broglie. Inferimos que na ausência de oscilação, a mudança de comportamento da taxa $(1/T_1)_{vet}$ permite capturar o efeito da nuvem Kondo na ponta de prova, pois a taxa

de relaxação pressupostamente assume formas diferentes quando estamos dentro ou fora da nuvem, de modo que a transição entre os dois comportamentos se dá na vizinhança de R_K . Esse resultado ratifica a validade da relação $R_K = \hbar v_F / k_B T_K$ e, conseqüentemente, confirma a hipótese de que o raio da nuvem Kondo seria encontrado na escala mesoscópica.

Finalmente, podemos sumarizar nossos resultados na figura 5.8, na qual identificamos as distâncias correspondentes ao interior e ao exterior da nuvem, bem como as redondezas de R_K . Dentro da nuvem, ou seja, para $R \ll R_K$ a dependência de $(1/T_1)_{vet}$ pode ser mapeada na curva universal que descreve a condutância universal $\mathcal{G}_{side}$. Por outro lado, para distâncias suficientemente grandes, tais que $R \gg R_K$, a relaxação vetorial em função da temperatura é análoga à curva da condutância $\mathcal{G}_{SET}$. Uma observação importante é que a mudança entre esses comportamentos não é súbita: entre $10^3 < k_F R / \pi < 10^6$ o comportamento térmico análogo às condutâncias fica mascarado pelo pico de de Broglie.

Figura 5.8 – Taxa de relaxação em função da temperatura e os limites da nuvem Kondo. Para $R \gg R_K$ a dependência térmica é análoga a da curva $\mathcal{G}_{SET}$, enquanto para $R \ll R_K$ ela pode ser mapeada na condutância $\mathcal{G}_{side}$. Fonte: elaborada pela autora.

Matematicamente e fisicamente, nossos resultados têm um paralelo físico com as condutâncias observadas em nanoestruturas de geometria T e no transistor de um único elétron (19, 20). Nesses dispositivos um potencial controla o número quântico de ocupação no ponto, favorecendo ou bloqueando a passagem de corrente. Quando o potencial favorece o transporte através do fio, a condutância cresce rapidamente de zero, a temperaturas baixas, até um patamar, a altas temperaturas. Por outro lado, quando o potencial favorece o ponto - que neste

caso funciona como uma impureza Kondo - a condutância decai para baixas temperaturas devido ao bloqueio à passagem de carga através do fio.

O efeito capturado pela taxa de relaxação $(1/T_1)_{vet}$ é a interferência entre estados acoplados à impureza - descritos pelos operadores f_n - e os estados ortogonais aos últimos - descritos pelos operadores $\bar{c}_\varepsilon$. Podemos interpretar fisicamente a taxa de relaxação da contribuição vetorial como um efeito de espalhamento cruzado, isto é, um elétron do canal da banda de condução associado ao orbital ϕ_n é espalhado pela impureza e alcança o canal dos orbitais $\bar{c}_\varepsilon$ da ponta de prova invertendo seu spin. A volta também é válida: um elétron do canal da ponta de prova troca um estado de momento magnético com o canal da banda de condução. Esse efeito é análogo ao que observamos com a condutância em pontos quânticos para ambas as geometrias. Nesses sistemas há também dois canais - um canal par acoplado ao ponto quântico e outro canal ímpar desacoplado - que dependem da simetria de inversão em torno do ponto quântico. A condutância exige a transferência de elétrons entre os canais. Assim, não é surpreendente que a curva da taxa de relaxação siga um comportamento universal semelhante.

Uma vez que nesta dissertação focamos nossa atenção em distâncias grandes, nas quais a contribuição do termo matricial é pequena, não vamos apresentar os resultados numéricos da taxa $(1/T_1)_{mat}$. No entanto, deixamos aqui o procedimento analítico e o algoritmo para o cálculo da mesma[‡] - os quais serão úteis quando as distâncias de interesse forem muito pequenas ou ainda para geometrias mais complexas, nas quais efeitos de superfície tornam-se importantes.

O efeito de todos os N^2 elementos de matriz na taxa total $(1/T_1)_{mat}$ é, portanto, uma questão que deverá ser analisada em trabalhos futuros dedicados à relaxação para distâncias R pequenas (nas quais a ponta de prova está muito próxima da impureza). Com essa nova abordagem, verificaremos se a taxa de relaxação ESR é, de fato, uma técnica capaz de fornecer algum indício do raio R_K da nuvem Kondo.

[‡]Apêndice B e seção 4.2.2.

CAPÍTULO 6

Conclusão

Na presente dissertação estudamos a taxa de relaxação longitudinal $1/T_1$ de uma ponta de prova magnética em uma liga metálica de geometria especial. Considerando um metal semi-infinito na direção z com uma impureza localizada a uma distância d do plano $z = 0$, propusemos analisar a taxa $1/T_1$ como função da temperatura T e da distância R entre a ponta de prova e a impureza. A motivação para este procedimento remete ao alcance da polarização de elétrons ao redor da impureza, cuja dinâmica poderia afetar a relaxação do sistema e, assim, nos forneceria indícios sobre a formação a chamada nuvem Kondo.

No capítulo 1 contextualizamos historicamente o problema Kondo e recapitulamos os principais resultados que contribuíram para o estudo de impurezas magnéticas em metais desde as primeiras formulações até a atualidade. Discorremos sobre avanços teóricos (NRG) e experimentais (STM) que permitiram o estudo do efeito Kondo e abriram caminho para a investigação de problemas correlatos e questões indefinidas, destacando a medida da nuvem Kondo.

No segundo capítulo introduzimos o sistema quântico de nosso interesse, apresentando os Hamiltonianos envolvidos. Usamos o modelo de Anderson para descrever o sistema metálico (equação (2.1)) e o Hamiltoniano H_{probe} para a interação do sistema com a ponta de prova (equação (2.10)). Definimos a base contínua $\{c_\epsilon, \bar{c}_\epsilon\}$ (equações (2.11) e (2.16)) e reescrevemos os Hamiltonianos H e H_{probe} . Mostramos que nesta base, os autoestados do Hamiltoniano perturbado $\tilde{H}$ (relação (2.28)) são desacoplados, o que simplifica o tratamento analítico dos estados ortogonais à impureza (autoestados do operador $\bar{c}_\epsilon$).

No capítulo 3 apresentamos o método do Grupo de Renormalização Numérico (NRG), versando sobre seu sucesso no problema Kondo. Detalhamos as etapas envolvidas na implementação do NRG, com especial atenção à diagonalização iterativa do Hamiltoniano de Anderson. Ilustramos como a base primitiva $\{|q, s, s_z, r\rangle\}$ de estados é construída na iteração N (conjunto de definições (3.53) a (3.56)), além de abordar o cálculo de elementos de matriz $\langle q', s', s'_z, r | f_n^\dagger | q, s, s_z, r \rangle$ necessários para o cálculo de propriedades físicas. Pudemos aplicar o método NRG para a diagonalização do nosso modelo obtendo dados numéricos para computar a taxa de relaxação magnética.

Nosso quarto capítulo foi dedicado à taxa de relaxação magnética longitudinal $1/(T_1)$. Começamos definindo a expressão para a taxa $1/(T_1)$ com base na transição de estados quânticos (definição (4.1)) mediada por H_{probe} . Tendo definido o operador $\phi_\mu(R)$ (apresentado em (2.24)) como combinação dos estados de Lanczos (equação (4.3)), fomos capazes de obter uma expressão analítica para a taxa de relaxação magnética na base do NRG.

Ainda no capítulo 4, mostramos que a taxa de relaxação poderia ser decomposta em três contribuições, as quais foram denominadas escalar, vetorial e matricial. O termo escalar foi associado aos estados de $\Phi_{0\mu}(R)$ (ou $\bar{c}_\varepsilon$) e, assim, completamente desacoplado do sistema não-perturbado. Independente da temperatura e da polarização de spin envolvida na formação da nuvem Kondo, este termo não foi considerado na análise da taxa de relaxação, pois funciona como um termo residual que soma à taxa total uma constante.

A contribuição dos termos cruzados $\bar{c}_\varepsilon^\dagger f_n$ e $f_n^\dagger \bar{c}_\varepsilon$ foi denominada vetorial. A justificativa para a escolha dessa terminologia deveu-se ao tipo de dependência que a taxa associada ao termo cruzado apresenta. Neste caso, ela requer o cálculo do vetor de elementos de matriz $\langle \varphi | f_{n\mu}^\dagger | \psi \rangle$ ($n = 0, \dots, N$) (expressão final apresentada em (4.20)). Relacionamos o cálculo desta contribuição à computação dos elementos de matriz apresentada na seção 3.6.4.

A taxa de relaxação devida apenas a estados da banda de condução e da impureza (que são autoestados dos operadores f_n) foi atribuída ao termo que denotamos matricial. Analogamente ao termo vetorial, a contribuição matricial recebe este nome por envolver uma matriz de elementos $\langle \varphi | f_{n\uparrow}^\dagger f_{m\downarrow} | \psi \rangle$ ($n, m = 0, \dots, N$) (equação (4.21)). Tendo identificado os estados $|\varphi\rangle$ $|\psi\rangle$ contribuindo para a relaxação como àqueles pertencendo ao mesmo setor (q, s), prosseguimos buscando um método eficiente e acurado para determinar os elementos de matriz da forma $\langle \varphi | f_{n\uparrow}^\dagger f_{m\downarrow} | \psi \rangle$ ($n, m = 0, \dots, N$) —tarefa que constituiu uma das principais contribuições técnicas desta dissertação. A contribuição do termo matricial diminui rapidamente com a distância e, por isso, não apresentamos resultados numéricos para $(1/T_1)_{mat}$. No entanto, deixamos aqui registrado o procedimento que permite calculá-lo, o qual servirá para descrever medidas de STM nas vizinhanças de impurezas magnéticas.

Na seção 4.2.2 discutimos duas formas para implementar o cálculo dos elementos matriciais. A primeira delas, a completeza, foi testada numericamente para diversos parâmetros do modelo, falhando justamente no regime de interesse ($T < T_K$). Apresentamos no apêndice A os detalhes do cálculo dos elementos $\langle \varphi | f_{n\uparrow}^\dagger f_{m\downarrow} | \psi \rangle$ ($n, m = 0, \dots, N$) através da completeza, enfatizando suas imprecisões numéricas e mostrando porque ele é inadequado. O principal problema com a completeza é o truncamento de estados, que afeta dramaticamente as últimas iterações.

A segunda alternativa, também mostrada no capítulo 4 consistiu na determinação de relações de recorrência e culminou em uma expressão relacionando os elementos $\langle \varphi | f_{n\uparrow}^\dagger f_{m\downarrow} | \psi \rangle$ aos vizinhos $\langle \varphi | f_{n\pm 1\uparrow}^\dagger f_{m\pm 1\downarrow} | \psi \rangle$ (relação (4.30)). Fomos capazes de demonstrar que determinando a linha $n = N$ e a coluna $m = 0$, poderíamos aplicar a relação de recorrência para determinar todo o restante dos elementos matriciais (figuras 4.2 e 4.1). No apêndice B apresentamos como calcular estes elementos por rotações - o que exige muito mais cuidado do que o cálculo de elementos vetoriais, dada a necessidade de armazenar elementos das iterações precedentes e computar alguns invariantes não-diagonais.

No capítulo 5 analisamos o comportamento dos coeficientes u_{mn} e γ_n envolvidos nas transformações dos operadores $\phi_\mu(R)$ na base de Lanczos. Analisamos o comportamento assintótico dos u_{nm} com auxílio da função geradora $U_n(z)$ (equação (5.2)). Expandindo os coeficientes γ_n e usando uma aproximação para as somas $\mathcal{S}_{m\pm}$ no limite de m grande, pudemos mostrar que eles podem ser decompostos em termos de soluções pares e ímpares conforme o valor de $k_F R$. Exploramos esta propriedade graficando γ_n como função de n para $k_F R = p\pi$ e $k_F R = (p + \frac{1}{2})\pi$, com $p \in \mathbb{Z}$ (figuras 5.2 e 5.3). Encontramos um número n característico no qual γ_n é máximo e observamos que o coeficiente γ_0 é dominante.

A segunda parte do quinto capítulo foi dedicada à análise de resultados numéricos obtidos para a taxa de relaxação da contribuição vetorial como função da temperatura e da distância. Mostramos que esse termo corresponde à interferência entre os estados acoplados à impureza e à ponta de prova. Acompanhamos as oscilações de Friedel no ponto fixo de baixa temperatura $T \ll T_K$. Identificamos os pontos de interferência construtiva com valores $k_F R = (2n + 1)\pi$ e os de interferência destrutiva próximos a valores de $k_F R$ múltiplos de $\pi/4$.

Na sequência, analisamos o comportamento da taxa de relaxação vetorial como função da temperatura nos nós das oscilações que marcam a transição entre as situações de interferência construtiva e destrutiva (figuras 5.5, 5.6 e 5.7, respectivamente). Um aspecto interessante da dependência térmica diz respeito aos picos de de Broglie captados pela taxa de relaxação. Esses picos estão associados à manifestação da interferência quântica entre os estados acoplados à impureza e à ponta de prova.

Observamos uma mudança na dependência térmica de $(1/T_1)_{vet}$ quando passamos por T_K , de modo que usando a relação $R_K \propto T_K^{-1}$, esse resultado nos mostra que a taxa de relaxação é diferente conforme estamos dentro, fora ou na vizinhança do raio da nuvem Kondo. Em particular, no interior da nuvem e para altas temperaturas, a dependência térmica de $(1/T_1)_{vet}$ pode ser mapeada nas curvas universais que descrevem a condutância em pontos quânticos: para a transição de interferência construtiva-destrutiva, o mapeamento é feito com

a condutância $\mathcal{G}_{side}$ de um *side-coupled quantum dot* e, no caso destrutiva-constructiva, a taxa de relaxação é semelhante à condutância $\mathcal{G}_{SET}$ de um transistor de um único elétron. Na região supostamente externa à nuvem, passados os picos de de Broglie, a taxa de relaxação tende a um patamar constante - o que fisicamente, indica que, fora da nuvem, há troca de momento magnético da ponta de prova com um único estado metálico, o sítio f_1 . A distâncias próximas a R_K , o comportamento térmico de $(1/T_1)_{vet}$ é caracterizado por uma mistura das curvas observadas a distâncias $R < R_K$ e $R > R_K$. O efeito da transição do perfil $\mathcal{G}_{side}$ para $\mathcal{G}_{SET}$ é mais proeminente quando consideramos o caso de mistura entre os comportamentos destrutivo e construtivo ($k_F R = (n + 1/4)\pi$, com $n \in \mathbb{Z}$).

Finalmente, resumizamos nossa análise da dependência térmica da taxa de relaxação identificando o interior, o exterior e as vizinhanças da nuvem Kondo (figura 5.8). Verificamos que a mudança é sutil na faixa $< 10^3 k_F R < 10^6$, de modo que nessa região a dependência espacial da taxa de relaxação varia muito pouco e sugere que os efeitos de espalhamento não estão restritos à superfície da nuvem com raio R_K , mas podem afetar uma faixa de distâncias na vizinhança da nuvem.

Em síntese, conseguimos mostrar que a curva de relaxação do termo vetorial está associada à interferência entre os estados acoplados à ponta de prova e à impureza e, a partir da análise das dependências espacial e térmica desta componente, inferimos que a relação $R_K = \hbar v_F / k_B T_K$ é verificada para a estimativa do raio da nuvem Kondo. Considerando as oscilações de Friedel da taxa de relaxação nos casos de interferência construtiva e destrutiva, verificamos ainda que há uma região em torno de R_K onde os efeitos de espalhamento ainda são importantes.

Esperamos que incluindo a taxa de relaxação total $1/T_1$, incluindo o termo matricial relevante para R pequeno, seja possível incluir os efeitos de superfície aos quais a ponta de ESR seria sensível e, assim, também daria informação sobre a dinâmica da nuvem Kondo. Nesse sentido, trabalhos futuros incluem o cálculo numérico da taxa $(1/T_1)_{mat}$ e a análise conjunta dos termos vetorial e matricial em grandes e pequenas distâncias.

Outra investigação interessante diz respeito à geometria. Poderíamos considerar um sistema finito e ver o que acontece com a taxa de relaxação quando a nuvem se forma muito próxima a superfície (situação análoga à ilustrada pela figura 2.3). Uma vez que o procedimento proposto neste trabalho pode ser generalizado, poderíamos investigar também simetrias mais complexas e sistemas com mais impurezas.

REFERÊNCIAS

- 1 KOUWENHOVEN, L. P.; GLAZMAN, L. Revival of the Kondo effect. *Physics World*, Bristol, v. 14, n. 1, p. 33–38, Jan. 2001.
- 2 KONDO, J. Resistance minimum in dilute magnetic alloys. *Progress of Theoretical Physics*, Kyoto, v. 32, n. 1, p. 37–49, 1964. doi: 10.1143/PTP.32.37.
- 3 GOLDHABER-GORDON, D.; GÖRES, J.; SHTRIKMAN, H.; MAHALU, D.; MEIRAV, U.; KASTNER, M. The Kondo effect in a single-electron transistor. *Materials Science and Engineering B*, v. 84, n. 1–2, p. 17 – 21, 2001. doi: 10.1016/S0921-5107(01)00550-5.
- 4 OHIO UNIVERSITY. Double quantum dots control Kondo effect in nanoscience study, 2006. Disponível em: <http://www.sciencedaily.com/releases/2006/09/060914181605.htm>. Acesso em: 10 dez. 2013.
- 5 BOYCE, J. B.; SLICHTER, C. P. Conduction-electron spin density around Fe impurities in Cu above and below T_k . *Physical Review Letters*, v. 32, n. 2, p. 61–64, Jan. 1974. doi: 10.1103/PhysRevLett.32.61.
- 6 DE HAAS, W.; DE BOER, J.; DEN BERG, G. The electrical resistance of gold, copper and lead at low temperatures. *Physica*, v. 1, n. 7–12, p. 1115 – 1124, 1934. doi: 10.1016/S0031-8914(34)80310-2.
- 7 DE HAAS, W.; VAN DEN BERG, G. Further experiments on the minimum in the resistance-temperature curve of gold. *Physica*, v. 4, n. 8, p. 683–694, Aug. 1937. doi: 10.1016/S0031-8914(37)80167-6.
- 8 VAN DER BERG, G. J. Anomalies in dilute metallic solutions of transition metals. In: DAUNT, J.; EDWARDS, D.; MILFORD, F.; YAQUB, M. (Eds.) *Low Temperature Physics LT9*. Columbus, Ohio: Springer US, 1965. p. 955–984. doi: 10.1007/978-1-4899-6443-4_64.
- 9 ANDERSON, P. W. A poor man's derivation of scaling laws for the Kondo problem. *Journal of Physics C: solid state physics*, v. 3, n. 12, p. 2436, 1970.
- 10 WILSON, K. G. The renormalization group: critical phenomena and the Kondo problem. *Reviews of Modern Physics*, New York, v. 47, n. 4, p. 773–840, Oct. 1975. doi: 10.1103/RevModPhys.47.773.

- 11 KRISHNA-MURTHY, H. R.; WILKINS, J. W.; WILSON, K. G. Renormalization-group approach to the Anderson model of dilute magnetic alloys. I. static properties for the symmetric case. *Physical Review B*, v. 21, n. 3, p. 1003–1043, Feb. 1980. doi: 10.1103/PhysRevB.21.1003.
- 12 ANDERSON, P. W. Localized magnetic states in metals. *Physical Review*, v. 124, n. 1, p. 41–53, Oct. 1961. doi: 10.1103/PhysRev.124.41.
- 13 LI, J.; SCHNEIDER, W.-D.; BERNDT, R.; DELLEY, B. Kondo scattering observed at a single magnetic impurity. *Physical Review Letters*, v. 80, n. 13, p. 2893–2896, Mar. 1998. doi: 10.1103/PhysRevLett.80.2893.
- 14 MADHAVAN, V.; CHEN, W.; JAMNEALA, T.; CROMMIE, M. F.; WINGREEN, N. S. Tunneling into a single magnetic atom: spectroscopic evidence of the Kondo resonance. *Science*, v. 280, n. 5363, p. 567, Apr. 1998. doi: 10.1126/science.280.5363.567.
- 15 KOUWENHOVEN, L.; MARCUS, C. Quantum dots. *Physics World*, v. 11, n. 6, p. 35–39, 1998.
- 16 GLAZMAN, L. I.; RAÏKH, M. É. Resonant Kondo transparency of a barrier with quasilocal impurity states. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, v. 47, n. 8, p. 452–455, Apr. 1988.
- 17 NG, T. K.; LEE, P. A. On-site Coulomb repulsion and resonant tunneling. *Physical Review Letters*, v. 61, n. 15, p. 1768–1771, Oct. 1988. doi: 10.1103/PhysRevLett.61.1768.
- 18 GOLDHABER-GORDON, D.; SHTRIKMAN, H.; MAHALU, D.; ABUSCH-MAGDER, D.; MEIRAV, U.; KASTNER, M. A. Kondo effect in a single-electron transistor. *Nature*, v. 391, n. 6663, p. 156–159, 1998. doi: 10.1038/34373.
- 19 SERIDONIO, A. C.; YOSHIDA, M.; OLIVEIRA, L. N. Universal zero-bias conductance through a quantum wire side-coupled to a quantum dot. *Physical Review B*, v. 80, n. 23, p. 235318, Dec. 2009. doi: 10.1103/PhysRevB.80.235318.
- 20 YOSHIDA, M.; SERIDONIO, A. C.; OLIVEIRA, L. N. Universal zero-bias conductance for the single-electron transistor. *Physical Review B*, v. 80, n. 23, p. 235317, Dec. 2009. doi: 10.1103/PhysRevB.80.235317.
- 21 SERIDONIO, A. C.; YOSHIDA, M.; OLIVEIRA, L. N. Thermal dependence of the zero-bias conductance through a nanostructure. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 86, n. 6, p. 67006, 2009.
- 22 BORDA, L. Kondo screening cloud in a one-dimensional wire: numerical renormalization group study. *Physical Review B*, v. 75, n. 4, p. 041307, Jan. 2007. doi: 10.1103/PhysRevB.75.041307.

- 23 AFFLECK, I.; SIMON, P. Detecting the Kondo screening cloud around a quantum dot. *Physical Review Letters*, v. 86, n. 13, p. 2854–2857, Mar. 2001. doi: 10.1103/PhysRevLett.86.2854.
- 24 SØRENSEN, E. S.; AFFLECK, I. Scaling theory of the Kondo screening cloud. *Physical Review B*, v. 53, n. 14, p. 9153–9167, Apr. 1996. doi: 10.1103/PhysRevB.53.9153.
- 25 BARZYKIN, V.; AFFLECK, I. The Kondo screening cloud: what can we learn from perturbation theory? *Physical Review Letters*, v. 76, n. 26, p. 4959–4962, June 1996. doi: 10.1103/PhysRevLett.76.4959.
- 26 PEREIRA, R. G.; LAFLORENCIE, N.; AFFLECK, I.; HALPERIN, B. I. Kondo screening cloud and charge staircase in one-dimensional mesoscopic devices. *Physical Review B*, v. 77, n. 12, p. 125327, Mar. 2008. doi: 10.1103/PhysRevB.77.125327.
- 27 BOYCE, J. B.; SLICHTER, C. P. Conduction-electron spin density around Fe impurities in Cu above and below the Kondo temperature. *Physical Review B*, v. 13, n. 1, p. 379–396, Jan. 1976. doi: 10.1103/PhysRevB.13.379.
- 28 PINTO, J. W. M.; FROTA, H. O. ESR of a magnetic probe in the neighborhood of an Anderson impurity. *International Journal of Modern Physics B*, v. 24, n. 31, p. 6185–6202, 2010. doi: 10.1142/S0217979210057638.
- 29 SCHRIEFFER, J. R.; WOLFF, P. A. Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians. *Physical Review*, v. 149, n. 2, p. 491–492, Sept. 1966. doi: 10.1103/PhysRev.149.491.
- 30 BULLA, R.; COSTI, T. A.; PRUSCHKE, T. Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. *Reviews of Modern Physics*, Woodbury, v. 80, n. 2, p. 395–450, Apr. 2008. doi: 10.1103/RevModPhys.80.395.
- 31 BETHE, H. A. The electromagnetic shift of energy levels. *Physical Review*, v. 72, n. 4, p. 339–341, Aug. 1947. doi: 10.1103/PhysRev.72.339.
- 32 TOMONAGA, S. On a relativistically invariant formulation of the quantum theory of wave fields. *Progress of Theoretical Physics*, Kyoto, v. 1, n. 2, p. 27–42, 1946. doi: 10.1143/PTP.1.27.
- 33 SCHWINGER, J. On quantum-electrodynamics and the magnetic moment of the electron. *Physical Review*, v. 73, n. 4, p. 416–417, Feb. 1948. doi: 10.1103/PhysRev.73.416.
- 34 FEYNMAN, R. Space-time approach to quantum electrodynamics. *Physical Review*, v. 76, n. 6, p. 769–789, Sept. 1949. doi: 10.1103/PhysRev.76.769.
- 35 FEYNMAN, R. The theory of positrons. *Physical Review*, v. 76, n. 6, p. 749–759, Sept. 1949. doi: 10.1103/PhysRev.76.749.

- 36 FEYNMAN, R. P. Mathematical formulation of the quantum theory of electromagnetic interaction. *Physical Review*, v. 80, n. 3, p. 440–457, Nov. 1950. doi: 10.1103/PhysRev.80.440.
- 37 DYSON, F. The radiation theories of Tomonaga, Schwinger, and Feynman. *Physical Review*, v. 75, n. 3, p. 486–502, Feb. 1949. doi: 10.1103/PhysRev.75.486.
- 38 SCHWINGER, J. *Selected papers on quantum electrodynamics*. Mineola, New York: Dover Publications, 1958.
- 39 SCHWEBER, S. *QED and the men who made it: Dyson, Feynman, Schwinger, and Tomonaga*. Princeton, New Jersey: Princeton University Press, 1994.
- 40 WILSON, K. G. Renormalization group methods. *Advances in Mathematics*, v. 16, n. 2, p. 170 – 186, 1975. doi: 10.1016/0001-8708(75)90149-8.
- 41 ANDERSON, P.; YUVAL, G.; HAMANN, D. Scaling theory for the Kondo and one-dimensional ising models. *Solid State Communications*, Oxford, v. 8, n. 13, p. 1033 – 1037, 1970. doi: 10.1016/0038-1098(70)90253-X.
- 42 YUVAL, G.; ANDERSON, P. W. Exact results for the Kondo problem: one-body theory and extension to finite temperature. *Physical Review B*, v. 1, p. 1522–1528, Feb. 1970. doi: 10.1103/PhysRevB.1.1522.
- 43 ABRIKOSOV, A. A.; MIGDAL, A. A. On the theory of the Kondo effect. *Journal of Low Temperature Physics*, v. 3, n. 5, p. 519–536, 1970. doi: 10.1007/BF00628220.
- 44 FOWLER, M.; ZAWADOWSKI, A. Scaling and the renormalization group in the Kondo effect. *Solid State Communications*, Oxford, v. 9, n. 8, p. 471 – 476, 1971. doi: 10.1016/0038-1098(71)90324-3.
- 45 KOMZSIK, L. *The lanczos method: evolution and application*. Philadelphia, Pennsylvania: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003.
- 46 CAMPO, V. L.; OLIVEIRA, L. N. Alternative discretization in the numerical renormalization-group method. *Physical Review B*, v. 72, n. 10, p. 104432, Sept. 2005. doi: 10.1103/PhysRevB.72.104432.
- 47 CAMPO, V. L.; OLIVEIRA, L. N. Renormalization-group approach to the problem of conduction through a nanostructure. *Physical Review B*, v. 68, n. 3, p. 035337, July 2003. doi: 10.1103/PhysRevB.68.035337.
- 48 ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I. *Handbook of mathematical functions*. 5th. ed. New York: Dover, 1964.

-
- 49 WINTER, J. *Magnetic resonance in metals*. Oxford: Clarendon Press, 1971.
- 50 HEWSON, A. *The Kondo problem to heavy fermions*. Cambridge University Press, 1997.
- 51 KRISHNA-MURTHY, H. R.; WILSON, K. G.; WILKINS, J. W. Temperature-dependent susceptibility of the symmetric Anderson model: connection to the Kondo model. *Physical Review Letters*, v. 35, n. 16, p. 1101–1104, Oct. 1975. doi: 10.1103/PhysRevLett.35.1101.
- 52 KRISHNA-MURTHY, H. R.; WILKINS, J. W.; WILSON, K. G. Renormalization-group approach to the Anderson model of dilute magnetic alloys. I. static properties for the symmetric case. *Physical Review B*, v. 21, n. 3, p. 1003–1043, Feb. 1980. doi: 10.1103/PhysRevB.21.1003.
- 53 OLIVEIRA, W. C.; OLIVEIRA, L. N. Generalized numerical renormalization-group method to calculate the thermodynamical properties of impurities in metals. *Physical Review B*, v. 49, n. 17, p. 11986–11994, May 1994. doi: 10.1103/PhysRevB.49.11986.
- 54 SAKURAI, J. J. *Modern quantum mechanics*. 2nd. ed. Reading, Massachussets: Addison-Wesley Publishing Company, 1994.

APÊNDICE A

Relação de completeza

Vimos na seção 4.2.2 que a taxa de relaxação associada à contribuição matricial pode ser calculada determinando o conjunto de elementos $\langle \varphi | f_n^\dagger f_m | \psi \rangle$ ($n, m = 0, \dots, N$), com $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ sendo estados de um mesmo setor (q, s). Uma forma de identificar as condições para estes estados consiste em inserir a relação de completeza entre os operadores $f_n^\dagger f_m$ e aplicar as regras de seleção (3.38) e (3.39).

A completeza poderia ser útil não apenas para encontrar os $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ contribuindo para a parcela matricial da taxa $(1/T_1)_{mat}$, mas também para calcular os elementos de matriz envolvidos. Este procedimento parece vantajoso do vista analítico, dado que a completeza facilita calcular os elementos de matriz, bastando para isso encontrar estados e setores de uma mesma iteração N . Infelizmente, essa alternativa falha justamente no regime de interesse, de modo que a taxa de relaxação calculada no regime Kondo apresenta anomalias numéricas e imprecisões.

Este apêndice apresenta os detalhes envolvendo a implementação da completeza e uma breve discussão da razão pela qual precisamos abandoná-la na tentativa de calcular a taxa $(1/T_1)_{mat}$.

A.1 Calculando os elementos de matriz de $f_{n\mu}^\dagger f_{m\nu}$ por completeza

Para calcular os elementos de matriz $\langle \varphi | f_{n\mu}^\dagger f_{m\nu} | \psi \rangle$ pela relação de completeza

$$\langle \varphi | f_{n\mu}^\dagger f_{m\nu} | \psi \rangle = \sum_{\xi} \langle \varphi | f_{n\mu}^\dagger | \xi \rangle \langle \xi | f_{m\nu} | \psi \rangle, \quad (\text{A.1})$$

precisamos encontrar os estados $|\xi\rangle$ para os quais os elementos $\langle \varphi | f_{n\mu}^\dagger | \xi \rangle$ e $\langle \xi | f_{m\nu} | \psi \rangle$ não se anulam.

Na prática, como os estados $|\psi\rangle$, $|\xi\rangle$ e $|\varphi\rangle$ estão conectados por relações entre carga e

spin, podemos reescrever a expressão (A.1) como sendo

$$\begin{aligned}
 \langle q', s', s'_z, r' | f_{n\mu}^\dagger f_{n'\nu} | q, s, s_z, r \rangle &= \sum_{q'', s'', s''_z, r''} \langle q', s', s'_z, r' | f_{n\mu}^\dagger | q'', s'', s''_z, r'' \rangle \\
 &\quad \times \langle q'', s'', s''_z, r'' | f_{n'\nu} | q, s, s_z, r \rangle \\
 &= \sum_{q'', s'', s''_z, r''} \langle q', s', s'_z, r' | f_{n\mu}^\dagger | q'', s'', s''_z, r'' \rangle \\
 &\quad \times \langle q, s, s_z, r | f_{n'\nu} | q'', s'', s''_z, r'' \rangle, \tag{A.2}
 \end{aligned}$$

identificando $|q, s, s_z, r\rangle$ com $|\varphi\rangle$, $|q', s', s'_z, r'\rangle$ com $|\psi\rangle$ e $|q'', s'', s''_z, r''\rangle$ com $|\xi\rangle$.

Dadas as regras de seleção (3.38) e (3.39), para um estado $|q, s, s_z, r\rangle$ fixo, podemos determinar a carga e o spin dos estados $|q', s', s'_z, r'\rangle$ e $|q'', s'', s''_z, r''\rangle$ pelas seguintes relações:

$$q = q' \tag{A.3}$$

$$s = s' \tag{A.4}$$

$$q'' = q - 1 \tag{A.5}$$

$$s'' = s \mp \frac{1}{2}, \tag{A.6}$$

e ainda $s'_z = s''_z + \mu$ e $s''_z = s_z$.

Figura A.1 – Implementação da completeza (A.1) para o cálculo dos elementos de matriz $\langle \varphi | f_{n\mu}^\dagger f_{m\nu} | \psi \rangle$. Os estados $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ pertencem ao mesmo setor (q, s) , enquanto os estados $|\xi\rangle$ podem estar a sudeste *SE* ou sudoeste *SW*. Fonte: elaborada pela autora.

A relações (A.3) e (A.4) revelam que os elementos de matriz $\langle \varphi | f_{n\mu}^\dagger f_{m\nu} | \psi \rangle$ são não-nulos quando os estados $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ pertencem ao mesmo setor (q, s) , ao passo que (A.5) e (A.6) determinam que os estados $|\xi\rangle$ da completeza estão localizados a sudeste SE e a sudoeste SW do setor (q, s) . Veja a figura A.1.

Uma vez identificados estados que participam do cálculo dos elementos de matriz através da relação de completeza, é uma tarefa simples executar a soma (A.1). Esta última pode ser simplificada pelo Teorema de Wigner-Eckart (3.48), de modo que

$$\begin{aligned} \langle q', s', s'_z, r' | f_{n\mu}^\dagger f_{m\nu} | q, s, s_z, r \rangle &= \sum_{r''_{SW}} \langle r' | f_n^\dagger | r''_{SW} \rangle \langle r | f_m^\dagger | r''_{SW} \rangle \\ &\times \left(s \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & s - \frac{1}{2} \\ \mu & s'_z - \mu \end{array} \right. \right) \left(s_z \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & s - \frac{1}{2} \\ \nu & s_z - \nu \end{array} \right. \right) \\ &+ \sum_{r''_{SE}} \langle r' | f_n^\dagger | r''_{SE} \rangle \langle r | f_m^\dagger | r''_{SE} \rangle \\ &\times \left(s \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & s + \frac{1}{2} \\ \mu & s'_z - \mu \end{array} \right. \right) \left(s_z \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & s + \frac{1}{2} \\ \nu & s_z - \nu \end{array} \right. \right), \end{aligned} \quad (A.7)$$

onde simplificamos a notação dos estados $|r\rangle = |q, s, r\rangle$, $|r'\rangle = |q, s, r'\rangle$, $|r''_{SW}\rangle = |q-1, s-1/2, r''\rangle$ e $|r''_{SE}\rangle = |q-1, s+1/2, r''\rangle$.

Sabemos que o Hamiltoniano da ponta de prova H_{probe} condiciona a inversão de spin $\nu = -\mu$, de modo que os coeficientes de Clebsch-Gordan da equação (A.1) podem ser expressos na forma

$$CG_{SW}(\mu, s, s_z) = \left(s \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & s - \frac{1}{2} \\ \mu & s_z + \mu \end{array} \right. \right) \left(s_z \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & s - \frac{1}{2} \\ -\mu & s_z + \mu \end{array} \right. \right), \quad (A.8)$$

e

$$CG_{SE}(\mu, s, s_z) = \left(s \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & s + \frac{1}{2} \\ \mu & s_z - \mu \end{array} \right. \right) \left(s_z \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & s + \frac{1}{2} \\ -\mu & s_z + \mu \end{array} \right. \right). \quad (A.9)$$

Considerando os possíveis valores de spin $\mu = \pm \frac{1}{2}$, podemos calcular os valores assumidos pelos coeficientes CG_{SW} e CG_{SE} . Os resultados são mostrados nas tabelas A.1 e A.2.

Voltando à taxa de relaxação $(1/T_1)^{f_n}$ em (4.21), devemos ser capazes de calcular o quadrado do elemento de matriz $\langle q, s, s'_z, r' | f_{n\mu}^\dagger f_{m\nu} | q, s, s_z, r \rangle$ levando em conta os possíveis valores de s_z .

Tabela A.1 – Coeficientes de Clebsch-Gordan referentes aos elementos de matriz SW .

μ	$\left(\begin{array}{c cc} s & \frac{1}{2} & s - \frac{1}{2} \\ s_z + 2\mu & \mu & s_z + \mu \end{array} \right)$	$\left(\begin{array}{c cc} s & \frac{1}{2} & s - \frac{1}{2} \\ s_z & -\mu & s_z + \mu \end{array} \right)$
$+\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{s + s_z + 1}{2s}}$	$\sqrt{\frac{s - s_z}{2s}}$
$-\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{s - s_z + 1}{2s}}$	$\sqrt{\frac{s + s_z}{2s}}$

Fonte: elaborada pela autora.

Tabela A.2 – Coeficientes de Clebsch-Gordan referentes aos elementos de matriz SE .

μ	$\left(\begin{array}{c cc} s & \frac{1}{2} & s + \frac{1}{2} \\ s_z + 2\mu & \mu & s_z + \mu \end{array} \right)$	$\left(\begin{array}{c cc} s & \frac{1}{2} & s + \frac{1}{2} \\ s_z & -\mu & s_z + \mu \end{array} \right)$
$+\frac{1}{2}$	$-\sqrt{\frac{s - s_z}{2s + 2}}$	$\sqrt{\frac{s + s_z + 1}{2s + 2}}$
$-\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{s + s_z}{2s + 2}}$	$-\sqrt{\frac{s - s_z + 1}{2s + 2}}$

Fonte: elaborada pela autora.

Reunindo os resultados das tabelas A.1 e A.2 com a equação (A.2), obtemos

$$\begin{aligned}
 |\langle r' | f_{n\mu}^\dagger f_{m\nu} | r \rangle|^2 &= \sum_{s_z=-s}^s \left[\sqrt{\left(s + \frac{1}{2}\right)^2 - \left(s_z + \frac{1}{2}\right)^2} + \sqrt{\left(s + \frac{1}{2}\right)^2 - \left(s_z - \frac{1}{2}\right)^2} \right]^2 \\
 &\times \left| \left(\frac{1}{2s} \langle r' | f_n^\dagger f_m | r \rangle_{SW} - \frac{1}{2s + 2} \langle r' | f_n^\dagger f_m | r \rangle_{SE} \right) \right|^2,
 \end{aligned}
 \tag{A.10}$$

com

$$\langle r' || f_n^\dagger f_m || r \rangle_{SW} = \sum_{r''} \langle q, s, r' || f_n^\dagger || q-1, s - \frac{1}{2}, r'' \rangle \langle q-1, s - \frac{1}{2}, r'' || f_m || q, s, r \rangle \quad (\text{A.11})$$

e

$$\langle r' || f_n^\dagger f_m || r \rangle_{SE} = \sum_{r''} \langle q, s, r' || f_n^\dagger || q-1, s + \frac{1}{2}, r'' \rangle \langle q-1, s + \frac{1}{2}, r'' || f_m || q, s, r \rangle. \quad (\text{A.12})$$

Finalmente, quadrando o termo associados aos Clebsch-Gordan e efetuando a soma sobre s_z , conseguimos escrever o quadrado do elemento de matriz de interesse como

$$|\langle r' || f_{n\mu}^\dagger f_{m\nu} || r \rangle|^2 = \frac{4}{3} \frac{2s+1}{2s(2s+2)} \left| (2s+2) \langle r' || f_n^\dagger f_m || r \rangle_{SW} - (2s) \langle r' || f_n^\dagger f_m || r \rangle_{SE} \right|^2. \quad (\text{A.13})$$

Embora o cálculo da taxa $(1/T_1)_{mat}$ através da completeza seja relativamente simples de deduzir, sua implementação exige cuidado e, portanto, devemos analisar sua eficácia e precisão. A complexidade do algoritmo que computa o termo à direita da equação (A.13) é $\mathcal{O}(N^2 L^4)$ — o que torna essa alternativa bastante custosa em tempo de computação e memória exigida para o armazenamento de todos os elementos de matriz envolvidos no cálculo. Outra característica deste método que poderia afetar dramaticamente nossos resultados diz respeito ao erro no cálculo dos invariantes das equações (A.11) e (A.12).

Uma vez que truncamos estados com energia $\lambda_i > E_{UV}$, existem imprecisões associadas à computação das taxas de relaxação, pois estas são afetadas pelo conjunto de autovalores e autoestados do Hamiltoniano H_N . Nas primeiras iterações temos poucos estados e, assim, o truncamento atinge um número pequeno de autovetores. Nas últimas iterações, quando estamos passando para o regime Kondo, o truncamento sucessivo de estados aumenta drasticamente o erro da completeza. Esse efeito torna-se notável devido ao desbalanço energético entre os estados singlete e tripleto, que predominam nos pontos fixos. Uma consequência disso é que o número de estados a sudoeste (SW) e sudeste (SE) não consegue compensar a assimetria. Mesmo impondo que o número de estados no final do truncamento UV seja igual em ambos os setores, as diferenças energéticas envolvendo os autovalores não são suficientes para resolver o problema.

Considerar valores altos para o parâmetro E_{UV} seria uma alternativa computacional para melhorar os resultados da completeza. Embora essa tentativa possa fornecer dados razoáveis, sua consequência imediata seria um enorme aumento no tempo de computação de todo o ciclo iterativo. Assim, devemos buscar outras maneiras para calcular a contribuição matricial.

APÊNDICE B

Calculando a contribuição matricial por rotação

Na seção 4.1 mostramos como o cálculo de todo o conjunto de elementos de matriz $\langle \varphi | f_n^\dagger f_m | \psi \rangle$ ($n, m = 0, \dots, N$) pode ser baseado em uma representação matricial cujas linhas representam os operadores $f_n^\dagger$ e as colunas os operadores f_m , o que é ilustrado na figura 4.1. Obtivemos a expressão (4.30) relacionando os invariantes $\langle \varphi | f_n^\dagger f_m | \psi \rangle$ ($n, m = 0, \dots, N$) aos quatro invariantes $\langle \varphi | f_{n\pm 1}^\dagger f_{m\pm 1} | \psi \rangle$ e definindo uma relação recursiva bi-dimensional. Mostramos que a relação de recorrência pode ser implementada com sucesso se conhecermos os elementos das bordas da matriz 4.1. Assim, calculando os elementos da forma $\langle \varphi | f_0^\dagger f_m | \psi \rangle$ ($m = 0, \dots, N-1$) e $\langle \varphi | f_n^\dagger f_N | \psi \rangle$ ($n = 0, \dots, N$), somos capazes de determinar todos os $\langle \varphi | f_n^\dagger f_m | \psi \rangle$ ($n, m = 0, \dots, N$) que entram no cálculo da taxa de relaxação $(1/T_1)_{mat}$ apresentada em (4.21).

Tendo em vista as dificuldades numéricas envolvendo o cálculo dos elementos $\langle \varphi | f_n^\dagger f_m | \psi \rangle$ através da relação de completeza, propomos que esta computação seja feita por meio de rotações análogas às da relação (3.83). Nesse procedimento, distinguimos três métodos para calcular os seguintes tipos de elementos: $\langle \varphi | f_N^\dagger f_N | \psi \rangle$, $\langle \varphi | f_N^\dagger f_m | \psi \rangle$ ($m = 0, \dots, N$) e $\langle \varphi | f_n^\dagger f_0 | \psi \rangle$ ($n = 0, \dots, N-1$). Estes são mostrados nas seções B.1, B.1 e B.3.

B.1 Cálculo dos elementos de matriz de $f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow}$

Começamos considerando o cálculo dos invariantes da forma $\langle q, s, r' | f_N^\dagger f_N | q, s, r \rangle$, uma vez que estes são facilmente computáveis a partir dos elementos de matriz de $f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow}$ na base primitiva de estados da iteração N . Vimos no capítulo 3 que as bases das iterações N e $N-1$ estão relacionadas por

$$|Q, S, S_z, p\rangle = \mathcal{O}_{g_p} |q', s', s'_z, r'\rangle_{N-1} \quad (g_p = \mathcal{N}, \mathcal{E}, \mathcal{W}, \mathcal{S}), \quad (\text{B.1})$$

onde $|q', s', r'\rangle_{N-1}$ denota um autoestado de H_{N-1} .

O elemento de interesse pode então ser reescrito na forma

$$\begin{aligned} \langle q, s, s_z + 1, r' | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | q, s, s_z, r \rangle &= \sum_{pp'} U(p', r') U(p, r) \langle \mathcal{O}_{g_{p'}} | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | \mathcal{O}_{g_p} \rangle \\ &\times \langle \bar{q}, \bar{s}, \bar{s}_z + 1, \bar{r} | \tilde{q}, \tilde{s}, \tilde{s}_z, \tilde{r} \rangle_{N-1}, \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

com $U(p, r)$ sendo o elemento de matriz da transformação unitária que diagonaliza H_N .

O último fator à direita da equação (B.2) se anula exceto quando $\tilde{q} = \bar{q}$, $\tilde{r} = \bar{r}$, e $\tilde{s}_z = \bar{s}_z + 1$. A igualdade, então, é reduzida à forma

$$\langle q, s, r' | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | q, s, r \rangle = \sum_{pp'} U(p', r') U(p, r) \langle \mathcal{O}_{g_{p'}} | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | \mathcal{O}_{g_p} \rangle. \quad (\text{B.3})$$

O invariante na soma também pode se anular de acordo com o gênero dos operadores $\mathcal{O}_{g_{p'}}$ e $\mathcal{O}_{g_p}$, sendo não-nulo a menos que $p' = p$ (os estados estão associados ao mesmo estado herdado e possuem mesmo gênero). Assim, devemos considerar os seguintes elementos de matriz

$$\langle \mathcal{O}_N | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | \mathcal{O}_N \rangle = \langle \mathcal{O}_S | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | \mathcal{O}_S \rangle = 0, \quad (\text{B.4})$$

$$\langle \mathcal{O}_\mathcal{E} | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | \mathcal{O}_\mathcal{E} \rangle = \begin{pmatrix} s & \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & s - \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & s_z + \frac{1}{2} \end{array} \right. \\ s_z + 1 & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s & \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & s - \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & s_z + \frac{1}{2} \end{array} \right. \\ s_z & \end{pmatrix} \quad (\text{B.5})$$

e

$$\langle \mathcal{O}_\mathcal{W} | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | \mathcal{O}_\mathcal{W} \rangle = \begin{pmatrix} s & \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & s + \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & s_z + \frac{1}{2} \end{array} \right. \\ s_z + 1 & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s & \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & s + \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & s_z + \frac{1}{2} \end{array} \right. \\ s_z & \end{pmatrix} \quad (\text{B.6})$$

Podemos agora calcular explicitamente os coeficientes de Clebsch-Gordan que aparecem em parênteses nas equações (B.5) e (B.6), obtendo

$$\langle \mathcal{O}_\mathcal{E} | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | \mathcal{O}_\mathcal{E} \rangle = \frac{\sqrt{(s + s_z + 1)(s - s_z)}}{2s} \quad (\text{B.7})$$

e

$$\langle \mathcal{O}_\mathcal{W} | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | \mathcal{O}_\mathcal{W} \rangle = -\frac{\sqrt{(s + s_z)(s - s_z + 1)}}{2s + 2}, \quad (\text{B.8})$$

respectivamente.

Tais expressões podem ser simplificadas ainda mais através do teorema de Wigner-Eckart. Observando que $f_{N+}^\dagger f_{N-}$ é proporcional a um tensor esférico $T_q^{(k)}$ de rank $k = 1$ como definido

em (54), podemos introduzir o conjunto

$$T_1^1 = -\frac{1}{\sqrt{2}} f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} \quad (\text{B.9a})$$

$$T_1^0 = -\frac{1}{2} (f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\uparrow} - f_{N\downarrow}^\dagger f_{N\downarrow}) \quad (\text{B.9b})$$

$$T_1^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} f_{N\downarrow}^\dagger f_{N\uparrow}, \quad (\text{B.9c})$$

satisfazendo as relações de comutação

$$[J_z, T_q^{(k)}] = q T_q^{(k)} \quad (\text{B.10})$$

e

$$[J_\pm, T_q^{(k)}] = \sqrt{k(k+1) - q(q \pm 1)} T_{q \pm 1}^{(k)}. \quad (\text{B.11})$$

Usando o Teorema de Wigner-Eckart, segue que

$$\langle q, s', s_z + 1 | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | q, s, s_z \rangle = -\sqrt{2} \begin{pmatrix} s' & 1 & s \\ s_z + 1 & 1 & s_z \end{pmatrix} \langle q, s' | f_N^\dagger f_N | q, s \rangle, \quad (\text{B.12})$$

de modo que substituindo os coeficientes de Clebsch-Gordan em parênteses obtemos

$$\langle q, s, s_z + 1 | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | q, s, s_z \rangle = \sqrt{\frac{(s - s_z)(s + s_z + 1)}{s(s + 1)}} \langle q, s' | f_N^\dagger f_N | q, s \rangle. \quad (\text{B.13})$$

Podemos escrever as equações (B.7) e (B.8) de maneira compacta como

$$\langle \mathcal{O}_\mathcal{E} | f_N^\dagger f_N | \mathcal{O}_\mathcal{E} \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{s+1}{s}} \quad (\text{B.14})$$

e

$$\langle \mathcal{O}_\mathcal{W} | f_N^\dagger f_N | \mathcal{O}_\mathcal{W} \rangle = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{s}{s+1}} \quad (\text{B.15})$$

Finalmente, substituindo as equações (B.7) e (B.8) à direita de (B.3) podemos sintetizar o cálculo dos elementos de matriz desejados na soma de estados primitivos a seguir:

$$\begin{aligned} \langle q, s, r' | f_N^\dagger f_N | q, s, r \rangle &= \frac{1}{2\sqrt{s(s+1)}} \left((s+1) \sum_{p \in \mathcal{E}} U(p, r') U(p, r) - s \sum_{p \in \mathcal{W}} U(p, r') U(p, r) \right) \\ &= \sum_p U(p, r') U(p, r) \mathcal{G}_{g_p, g_p}, \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

com a matriz (diagonal) $\mathcal{G}$ definida na tabela B.1.

Tabela B.1 – Elementos da matriz de coeficientes $\mathcal{G}$ para as possíveis combinações de gêneros. Embora a matriz seja diagonal, de modo que elementos entre estados com mesmo gênero são pressupostamente diferentes de zero, os elementos que efetivamente são não-nulos têm gêneros $\mathcal{E}$ e $\mathcal{W}$.

$g_{p'} \backslash g_p$	$\mathcal{N}$	$\mathcal{E}$	$\mathcal{W}$	$\mathcal{S}$
$\mathcal{N}$	0	0	0	0
$\mathcal{E}$	0	$\sqrt{\frac{s+1}{4s}}$	0	0
$\mathcal{W}$	0	0	$-\sqrt{\frac{s}{4(s+1)}}$	0
$\mathcal{S}$	0	0	0	0

Fonte: elaborada pela autora.

Prosseguimos considerando elementos de matriz com estados de spins distintos s e $s' = s \pm 1$ — o que é permitido pelas regras de seleção para o operador $f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow}$. Embora somente os elementos de matriz diagonais, ou seja, elementos de matriz entre autoestados com $s = s'$ e $r = r'$ contribuam diretamente para as taxas de relaxação, os invariantes de $f_0^\dagger f_n$ ($n = 0, \dots, N-1$) são requeridos no cálculo dos invariantes de $f_0^\dagger f_n$ ($n = 0, \dots, N$) na iteração $N+1$. Na iteração $N=0$, contudo, precisamos calcular todos os invariantes de $f_N^\dagger f_N$.

Analogamente aos elementos $\langle q, s, s_z, r' | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | q, s, s_z, r \rangle$, partimos da expressão

$$\begin{aligned} \langle q, s \pm 1, s_z, r' | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | q, s, s_z, r \rangle &= \sum_{pp'} U(p', r') U(p, r) \langle \mathcal{O}_{g_{p'}} | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | \mathcal{O}_{g_p} \rangle \\ &\times \langle \bar{q}, \bar{s}, d\bar{s}_z + 1, \bar{r} | \tilde{q}, \tilde{s}, \tilde{s}_z, \tilde{r} \rangle_{N-1}, \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

mostrando que os estados primitivos devem ter o mesmo pai $|\bar{q}, \bar{s}, \bar{s}_z + 1, \bar{r}\rangle = |\tilde{q}, \tilde{s}, \tilde{s}_z, \tilde{r}\rangle$.

Simplificando a equação (B.17), obtemos

$$\langle q, s \pm 1, s_z, r' | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | q, s, s_z, r \rangle = \sum'_{pp'} U(p', r') U(p, r) \langle \mathcal{O}_{g_{p'}} | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | \mathcal{O}_{g_p} \rangle, \quad (\text{B.18})$$

onde o primeiro termo é útil para nos lembrar que p e p' devem compartilhar o pai, mesmo pertencendo a diferentes setores (q, s) e $(q, s+1)$, como ilustrado na figura B.1.

Agora, mostraremos que equação (B.18) pode ser simplificada mais uma vez. Para tanto, é conveniente distinguirmos os casos $s' = s+1$ e $s' = s-1$, considerando cada um separadamente.

B.1.0.1 $s' = s + 1$

Nossa tarefa é calcular o elemento de matriz

$$\langle q, s+1, s_z+1, p' | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | q, s, s_z, p \rangle = \langle q, s+\frac{1}{2}, s_z+\frac{3}{2} \pm \frac{1}{2}, r | \mathcal{O}_\varepsilon f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} \mathcal{O}_\mathcal{W} | q, s+\frac{1}{2}, s_z+\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}, r \rangle \quad (\text{B.19})$$

com r sendo o índice do estado pai.

Figura B.1 – Setores contendo estados que contribuem direta ou indiretamente para o invariante $\langle q, s+1, r' | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | q, s, r \rangle$. Uma vez que os dois estados primitivos (coloridos em laranja) devem ter o mesmo pai, o estado que lhes deu origem deve pertencer ao setor $(q, s+1/2)$ (indicado pelo rótulo inclinado $s+1/2$). As abas representam os gêneros dos estados primitivos. Fonte: elaborada pela autora.

A equação (B.19) pode ser reescrita como

$$\langle q, s+1, s_z+1, p' | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | q, s, s_z, p \rangle = \begin{pmatrix} s+1 & \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & s+\frac{1}{2} \\ s_z+1 & \frac{1}{2} \end{array} \right. \\ s_z+1 & \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & s+\frac{1}{2} \\ s_z+1 & \frac{1}{2} \end{array} \right. \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s & \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & s+\frac{1}{2} \\ s_z & -\frac{1}{2} \end{array} \right. \\ s_z & \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & s+\frac{1}{2} \\ s_z & -\frac{1}{2} \end{array} \right. \end{pmatrix}, \quad (\text{B.20})$$

ou ainda com a forma explícita dos coeficientes de Clebsch-Gordan, como

$$\langle q, s+1, s_z+1, p' | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | q, s, s_z, p \rangle = \frac{\sqrt{(s+s_z+1)(s+s_z+2)}}{2s+1}. \quad (\text{B.21})$$

Do Teorema de Wigner-Eckart, temos a relação

$$\langle q, s+1, s_z+1, p' | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | q, s, s_z, p \rangle = -\langle q, s+1, p' | f_N^\dagger f_N | q, s, p \rangle \sqrt{\frac{2(s+s_z+1)(s+s_z+2)}{(2s+1)(2s+2)}}. \quad (\text{B.22})$$

Comparando com a equação (B.21), somos capazes de obter

$$\langle q, s+1, p' | f_N^\dagger f_N | q, s, p \rangle = -\sqrt{\frac{2s+2}{2(2s+1)}}. \quad (\text{B.23})$$

B.1.0.2 $s' = s - 1$

Para um estado $|q', s', s'_z, p'\rangle$ tem $s' = s - 1$, devemos calcular o elemento de matriz

$$\langle q, s-1, s_z+1, p' | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | q, s, s_z, p \rangle = \langle q, s-\frac{1}{2}, s_z+\frac{3}{2} \pm \frac{1}{2}, r | \mathcal{O}_{\mathcal{W}} f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} \mathcal{O}_{\mathcal{E}} | q, s-\frac{1}{2}, s_z+\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}, r \rangle. \quad (\text{B.24})$$

Resgatando as definições de $\mathcal{O}_{\mathcal{E}}$ and $\mathcal{O}_{\mathcal{W}}$ para os operadores à direita da equação (B.24), esta fica reescrita como

$$\langle q, s-1, s_z+1, p' | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | q, s, s_z, p \rangle = \begin{pmatrix} s-1 & \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & s-\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & s_z+\frac{1}{2} \end{array} \right. \\ s_z+1 & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s & \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & s-\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & s_z+\frac{1}{2} \end{array} \right. \\ s_z & \end{pmatrix}, \quad (\text{B.25})$$

e fornece

$$\langle q, s-1, s_z+1, p' | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | q, s, s_z, p \rangle = -\frac{\sqrt{(s-s_z-1)(s-s_z)}}{2s}. \quad (\text{B.26})$$

Figura B.2 – Setores envolvidos no cálculo dos elementos de matriz $\langle q, s-1, r' | f_N^\dagger f_N | q, s, r \rangle$. Quando o invariante deve ser tomado entre um ket e um bra de gêneros $\mathcal{E}$ e $\mathcal{W}$, respectivamente, estes foram herdados de estado da iteração $N-1$ que pertencia ao setor $(q, s+1/2)$. Fonte: elaborada pela autora.

Utilizando a expressão de Wigner-Eckart

$$\langle q, s-1, s_z+1, p' | f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | q, s, s_z, p \rangle = -\langle q, s-1, p' | f_N^\dagger f_N | q, s, p \rangle \sqrt{\frac{2(s-s_z-1)(s-s_z)}{2s(2s+1)}}, \quad (\text{B.27})$$

deduzimos os invariantes

$$\langle q, s-1, p' | f_N^\dagger f_N | q, s, p \rangle = \sqrt{\frac{2s+1}{4s}}. \quad (\text{B.28})$$

B.2 Cálculo dos elementos de matriz de $f_{m\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow}$

Consideremos agora o cálculo dos elementos de matriz ao longo da linha superior da tabela de elementos de matriz que têm a forma $\langle q, s, s_z + 1, r' | f_{N\uparrow}^\dagger f_{m\downarrow} | q, s, s_z, r \rangle$ ($0 \leq m < N$). Devemos ser capazes de projetar este elemento de matriz na base primitiva da iteração N , ou seja,

$$\langle q, s, s_z + 1, r' | f_{m\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | q, s, s_z, r \rangle = \sum_{p, p'} U(p', r') U(p, r) \langle q, s, s_z + 1, p' | f_{m\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | q, s, s_z, p \rangle. \quad (\text{B.29})$$

Dados os gêneros p e p' , o elemento de matriz que aparece na soma à direita na equação (B.29) é semelhante aos elementos de matriz $\langle \bar{q}, d\bar{s}, d\bar{s}_z + 1, p' | f_{N-1\uparrow}^\dagger f_{N\uparrow} | \bar{q}, d\bar{s}, d\bar{s}_z, p \rangle$ que são computados a partir dos invariantes $\langle \bar{q} + 1, d\bar{s}, r | f_{N-1}^\dagger | \bar{q}, d\bar{s}, r \rangle$ para construir a projeção do Hamiltoniano na base primitiva no início da iteração. Uma vez que os invariantes $\langle \bar{q} + 1, \bar{s}, r | f_m^\dagger | \bar{q}, \bar{s}, r \rangle$ ($0 \leq m < N - 1$) podem ser calculados recursivamente, o mesmo procedimento dá acesso a todos os $\langle q, s, s_z + 1, p' | f_{m\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | q, s, s_z, p \rangle$ ($0 \leq m < N$). Especificamente, temos a seguinte expressão para os elementos da equação (B.29):

$$\begin{aligned} \langle q, s, s_z + 1, p' | f_{m\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow} | q, s, s_z, p \rangle &= \sqrt{\frac{(s - s_z)(s + s_z + 1)}{s(s + 1)}} \frac{1}{2} \alpha_{g_{p'}, g_p}(s) \\ &\times \langle Q + 1, S', R' | f_m^\dagger | Q, S, R \rangle_{N-1}, \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

onde os coeficientes $\alpha_{g_{p'}, g_p}$ dependentes do gênero dos elementos estão listados na tabela B.2.

Tabela B.2 – Coeficientes α_{gp} relacionando os elementos de matriz na (B.30). Das possíveis combinações dos gêneros $g = \mathcal{N}, \mathcal{E}, \mathcal{S}, \mathcal{W}$, os elementos não-nulos têm $p' \neq p$.

$g_{p'} \backslash g_p$	$\mathcal{N}$	$\mathcal{E}$	$\mathcal{W}$	$\mathcal{S}$
$\mathcal{N}$	0	0	0	0
$\mathcal{E}$	$-\sqrt{\frac{2s+2}{2s+1}}$	0	0	0
$\mathcal{W}$	$-\sqrt{\frac{2s}{2s+1}}$	0	0	0
$\mathcal{S}$	0	$\sqrt{\frac{s+1}{s}}$	$-\sqrt{\frac{s}{s+1}}$	0

Fonte: elaborada pela autora.

Em analogia com a relação (B.13), podemos usar o Teorema de Wigner-Eckart para sim-

plificar a expressão para os invariantes da primeira linha da matriz de elementos. Segue que

$$\langle q, s, r' | f_m^\dagger f_N | q, s, r \rangle = \frac{1}{2} \sum_{p, p'} U(p', r') U(p, r) \alpha_{g_{p'} g_p}(s) \langle Q+1, S', R' | f_m^\dagger | Q, S, R \rangle_{N-1}. \quad (\text{B.31})$$

O cálculo do termo à direita da igualdade (B.29) para todos os pares (r', r) tem complexidade $\mathcal{O}(NL^4)$. Felizmente, precisamos calcular somente elementos de matriz à esquerda tais que $r = r'$, o que reduz a ordem da operação para $\mathcal{O}(NL^3)$.

B.3 Cálculo dos elementos de matriz de $f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow}$

Finalmente, vamos dedicar nossa atenção ao cálculo dos elementos de matriz reduzidos $\langle q', s', r' | f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} | q, s, r \rangle$ ao longo da primeira coluna da tabela 4.1. Estes exigem um pouco mais de cuidado, pois dependem de invariantes da mesma forma calculados nas iterações anteriores. Além disso, as regras de seleção impõe condições não-triviais sobre os spins dos estados $|q', s', s'_z, r'\rangle$ e $|q, s, s_z, r\rangle$, de modo que devemos calcular os seguintes elementos: $\langle q, s, s_z + 1, r' | f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} | q, s, s_z, r \rangle$ e $\langle q, s \pm 1, s_z + 1, r' | f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} | q, s, s_z, r \rangle$.

B.3.1 Elementos de $f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow}$ entre estados com $s = s'$ e $s'_z \neq s_z$

Como nos dois casos das seções precedentes para o cálculo dos $f_{N\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow}$ e $f_{m\uparrow}^\dagger f_{N\downarrow}$, começamos projetando os elementos de matriz de interesse na base primitiva de estados na N -ésima iteração, de modo que obtemos

$$\langle q, s, s_z + 1, r' | f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} | q, s, s_z, r \rangle = \sum_{p, p'} U(r, p) U(r', p') \langle Q, S, S_z + 1, p' | \mathcal{O}_{g_{p'}} f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} \mathcal{O}_{g_p} | Q, S, S_z, p \rangle. \quad (\text{B.32})$$

Os elementos de matriz são relacionados aos invariantes pelo teorema de Wigner-Eckart, que no presente caso fornece a relação:

$$\langle q, s, s_z + 1, r' | f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} | q, s, s_z, r \rangle = \sqrt{\frac{(s - s_z)(s + s_z + 1)}{s(s + 1)}} \langle q, s, r' | f_0^\dagger f_n | q, s, r \rangle, \quad (\text{B.33})$$

A equação (B.32) também pode ser relacionada aos elementos de matriz reduzidos. Note que calculando o último fator na soma da equação (B.32) para cada gênero dos estados

primitivos e relacionando o elemento resultante ao invariante pertinente, conseguimos escrever

$$\langle q, s, r' || f_0^\dagger f_n || q, s, r \rangle = \sum_{p, p' \in \mathcal{N}, \mathcal{S}} U(r, p) U(r', p') \mathcal{A}_{g_{p'}, g_p}, \langle Q, S, p' || f_0^\dagger f_n || Q, S, p \rangle, \quad (\text{B.34})$$

onde a matriz de coeficientes $\mathcal{A}$ é dependente dos gêneros $g_{p'}$ e g_p .

Em particular, os coeficientes $\mathcal{A}_{g_{p'}, g_p}$ para os pares de gêneros $g_{p'} = g_p = \mathcal{N}, \mathcal{S}$ são triviais e iguais a um. A tabela B.3 apresenta os coeficientes para todos os pares de gêneros.

Tabela B.3 – Matriz $\mathcal{A}_{g_{p'}, g_p}$ na soma à direita da equação (B.34). Além dos termos diagonais, destacamos as combinações $(g_{p'}, g_p) = (\mathcal{E}, \mathcal{W})$ e $(\mathcal{W}, \mathcal{E})$.

$g_{p'} \backslash g_p$	$\mathcal{N}$	$\mathcal{E}$	$\mathcal{W}$	$\mathcal{S}$
$\mathcal{N}$	1	0	0	0
$\mathcal{E}$	0	$\sqrt{\frac{(2s-1)(2s+2)}{2s(2s+1)}}$	$\sqrt{\frac{2}{(2s+1)(2s+2)}}$	0
$\mathcal{W}$	0	$-\sqrt{\frac{2}{2s(2s+1)}}$	$\sqrt{\frac{2s(2s+3)}{(2s+1)(2s+2)}}$	0
$\mathcal{S}$	0	0	0	1

Fonte: elaborada pela autora.

Mostramos na sequência um exemplo detalhado de cálculo dos elementos não-triviais de $\mathcal{A}$ para o caso em que os gêneros $g_{p'} = g_p = \mathcal{E}$.

B.3.1.1 East-East

Vamos ilustrar o cálculo dos coeficientes não triviais de $\mathcal{A}$ para a situação na qual os estados $|q, s, r\rangle$ e $|q, s, r'\rangle$ são herdados do setor (Q, S) com gêneros iguais $g_{p'} = g_p = \mathcal{E}$. Na figura B.3 apresentamos os setores envolvidos no cálculo dos elementos de matriz à esquerda e à direita da equação (B.34).

Figura B.3 – Setores envolvidos no cálculo dos elementos de matriz da equação (B.34) para estados com gêneros $g_{p'} = g_p = \mathcal{E}$. O invariante $\langle q, s, p' || f_0^\dagger f_n || q, s, p \rangle$ é tomado entre estados do mesmo setor (q, s) herdados de $(q, s - 1/2)$ no início do ciclo iterativo. Fonte: elaborada pela autora.

Utilizando as identidades (3.59) para o operador $\mathcal{O}_\varepsilon$, podemos escrever

$$\begin{aligned}
 \langle s - \frac{1}{2}, s_z + 1 \pm \frac{1}{2} | \mathcal{O}_\varepsilon f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} \mathcal{O}_\varepsilon | s - \frac{1}{2}, s_z \pm \frac{1}{2} \rangle &= \langle s - \frac{1}{2}, s_z + \frac{1}{2} | f_{N\uparrow} f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} f_{N\uparrow}^\dagger | s - \frac{1}{2}, s_z - \frac{1}{2} \rangle \\
 &\times \begin{pmatrix} s & \frac{1}{2} \\ s_z + 1 & s_z + \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s & \frac{1}{2} \\ s_z & s_z - \frac{1}{2} \end{pmatrix} \\
 &+ \langle s - \frac{1}{2}, s_z + \frac{3}{2} | f_{N\downarrow} f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} f_{N\downarrow}^\dagger | s - \frac{1}{2}, s_z + \frac{1}{2} \rangle \\
 &\begin{pmatrix} s & \frac{1}{2} \\ s_z + 1 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s & \frac{1}{2} \\ s_z & s_z + \frac{1}{2} \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{B.35}$$

Calculando explicitamente os coeficientes de Clebsch-Gordan em parênteses, obtemos

$$\begin{aligned}
 \langle s - \frac{1}{2}, s_z + 1 \pm \frac{1}{2} | \mathcal{O}_\varepsilon f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} \mathcal{O}_\varepsilon | s - \frac{1}{2}, s_z \pm \frac{1}{2} \rangle &= \langle s - \frac{1}{2}, s_z + \frac{1}{2} | f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} | s - \frac{1}{2}, s_z - \frac{1}{2} \rangle \\
 &\times \sqrt{\frac{s + s_z + 1}{2s}} \sqrt{\frac{s + s_z}{2s}} \\
 &+ \langle s - \frac{1}{2}, s_z + \frac{3}{2} | f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} | s - \frac{1}{2}, s_z + \frac{1}{2} \rangle \\
 &\times \sqrt{\frac{s - s_z - 1}{2s}} \sqrt{\frac{s - s_z}{2s}}.
 \end{aligned} \tag{B.36}$$

Usando o teorema de Wigner-Eckart, conseguimos relacionar os elementos de matriz da equação (B.36) aos invariantes através da seguinte igualdade:

$$\begin{aligned}
 \langle s - \frac{1}{2}, s_z + 1 \pm \frac{1}{2} | \mathcal{O}_\varepsilon f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} \mathcal{O}_\varepsilon | s - \frac{1}{2}, s_z \pm \frac{1}{2} \rangle &= \langle s - \frac{1}{2} || f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} || s - \frac{1}{2} \rangle \\
 &\times \left(\sqrt{\frac{(s - s_z)(s + s_z)}{(s - \frac{1}{2})(s + \frac{1}{2})}} \sqrt{\frac{s + s_z + 1}{2s}} \sqrt{\frac{s + s_z}{2s}} \right. \\
 &\left. + \sqrt{\frac{(s - s_z - 1)(s + s_z + 1)}{(s - \frac{1}{2})(s + \frac{1}{2})}} \sqrt{\frac{s - s_z - 1}{2s}} \sqrt{\frac{s - s_z}{2s}} \right),
 \end{aligned} \tag{B.37}$$

cujas simplificação resulta em

$$\begin{aligned}
 \langle s - \frac{1}{2}, s_z + 1 \pm \frac{1}{2} | \mathcal{O}_\varepsilon f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} \mathcal{O}_\varepsilon | s - \frac{1}{2}, s_z \pm \frac{1}{2} \rangle &= \langle s - \frac{1}{2} || f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} || s - \frac{1}{2} \rangle \sqrt{\frac{(s - s_z)(s + s_z + 1)}{s(s + 1)}} \\
 &\times \sqrt{\frac{(2s - 1)(2s + 2)}{2s(2s + 1)}}.
 \end{aligned} \tag{B.38}$$

Voltando à relação (B.33), somos capazes de identificar a raiz no último termo da equação

(B.34) como o coeficiente $\mathcal{A}_{g_{\mathcal{E}}, g_{\mathcal{E}}}$. Os demais pares de gêneros que fornecem $\mathcal{A}_{g_{p'}, g_p}$ não-nulos podem ser calculados por esta mesma sequência de passos.

Figura B.4 – Casos especiais de herança para os quais o invariante da da equação (B.34) é não-nulo. São mostrados os seguintes pares de gêneros $g_{p'}-g_p$: a) $\mathcal{W}-\mathcal{W}$, b) $\mathcal{W}-\mathcal{E}$ e b) $\mathcal{E}-\mathcal{W}$. Fonte: elaborada pela autora.

B.3.2 Elementos de $f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow}$ entre estados com spins diferentes

Finalmente, precisamos calcular os elementos de matriz de $f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow}$ com spins diferentes. Embora somente os elementos de matriz diagonais $\langle q, s, s_z + 1, r | f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} | q, s, s_z, r \rangle$ ($m, n = 0, \dots, N$) contribuam efetivamente para a taxa de relaxação $(1/T_1)_{mat}$, todos os elementos não-nulos de $f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow}$ são necessários, já que a rotação leva da base primitiva para os estados herdados na iteração $N - 1$. Dados os setores (q', s') e (q, s) , as regras de seleção permitem elementos de matriz com $q' = q$ e $s = s'$ (já discutidos na seção B.3.1) e ainda $s = \pm 1$. Estes últimos serão discutidos a seguir.

B.3.2.1 $s' = s + 1$

Em analogia com a equação(B.32), temos

$$\langle q, s+1, s_z+1, r' | f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} | q, s, s_z, r \rangle = \sum_{p, p'} U(r, p) U(r', p') \langle Q, S', S_z+1, p' | f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} | Q, S, S_z, p \rangle, \quad (\text{B.39})$$

onde (Q, S) e (Q, S') indicam, respectivamente, os setores pais dos estados $|q, s, p\rangle$ e $|q, s+1, p'\rangle$.

Novamente, recorreremos ao teorema de Wigner-Eckart para escrever os elementos de matriz como função dos invariantes. Segue que

$$\langle q, s+1, s_z+1, r' | f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} | q, s, s_z, r \rangle = -\sqrt{\frac{2(s+s_z+1)(s+s_z+2)}{(2s+1)(2s+2)}} \langle q, s+1, r' | f_{0\uparrow}^\dagger f_n | q, s, r \rangle. \quad (\text{B.40})$$

Assim como na tabela B.3, os elementos de matriz só não se anulam em duas situações: quando ambos os pais têm o mesmo gênero ou quando um gênero é $\mathcal{E}$ e o outro é $\mathcal{W}$.

Desse modo, os invariantes podem ser obtidos a partir de rotações, valendo a expressão

$$\langle q, s+1, r' | f_{0\uparrow}^\dagger f_n | q, s, r \rangle = \sum_{p,p'} U(r, p) \mathcal{B}_{g_{p'}, g_p} U(r', p') \langle Q, S', p' | f_{0\uparrow}^\dagger f_n | Q, S, p \rangle, \quad (\text{B.41})$$

com a matrix de coeficientes $\mathcal{B}$ mostrada na tabela B.4.

Tabela B.4 – Matriz de coeficientes $\mathcal{B}_{g_{p'}, g_p}$ na soma à direita da equação (B.41).

$g_{p'} \backslash g_p$	$\mathcal{N}$	$\mathcal{E}$	$\mathcal{W}$	$\mathcal{S}$
$\mathcal{N}$	1	0	0	0
$\mathcal{E}$	0	1	$\sqrt{\frac{2}{(2s+2)(2s+3)}}$	0
$\mathcal{W}$	0	0	$\sqrt{\frac{(2s+1)(2s+4)}{(2s+2)(2s+3)}}$	0
$\mathcal{S}$	0	0	0	1

Fonte: elaborada pela autora.

B.3.2.2 $s' = s - 1$

Em analogia com a equação (B.32), temos a seguinte relação para os elementos de matriz com $s' = s - 1$:

$$\langle q, s-1, s_z+1, r' | f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} | q, s, s_z, r \rangle = \sum'_{p,p'} U(r, p) U(r', p') \langle Q, S', S_z+1, p' | f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} | Q, S, S_z, p \rangle, \quad (\text{B.42})$$

onde, agora, os setores (Q, S) e (Q, S') são contêm, respectivamente, os estados $|q, s, p\rangle$ and $|q, s-1, p'\rangle$.

Figura B.5 – Setores (q, s) e $(q, s + 1)$ envolvidos no cálculo da equação (B.41). Mostramos os possíveis gêneros dos estados herdados pelos setores pais (com rótulos inclinados): **a)** $\mathcal{E}$ - $\mathcal{E}$, **b)** $\mathcal{W}$ - $\mathcal{W}$ e **c)** $\mathcal{E}$ - $\mathcal{W}$. Fonte: elaborada pela autora.

Com auxílio do teorema de Wigner-Eckart theorem, escrevemos

$$\langle q, s - 1, s_z + 1, r' | f_{0\uparrow}^\dagger f_{n\downarrow} | q, s, s_z, r \rangle = -\sqrt{\frac{2(s - s_z - 1)(s - s_z)}{2s(2s + 1)}} \langle q, s - 1, r' | f_0^\dagger f_n | q, s, r \rangle. \quad (\text{B.43})$$

As mesmas condições para que os elementos de matriz não se anulem exploradas nas seções precedentes são válidas. Assim, relacionamos os elementos de matriz desejados aos invariantes da iteração anterior com a seguinte equação:

$$\langle q, s - 1, r' | f_0^\dagger f_n | q, s, r \rangle = \sum_{p, p'} U(r, p) \mathcal{C}_{g_{p'} g_p} U(r', p') \langle Q, S', p' | f_0^\dagger f_n | Q, S, p \rangle, \quad (\text{B.44})$$

onde os coeficientes da matriz $\mathcal{C}$ são mostrados na tabela B.5.

Tabela B.5 – Coeficientes $\mathcal{C}_{g'g}$ da matriz $\mathcal{C}$ definida à direita da equação (B.44).

$g_{p'} \backslash g_p$	$\mathcal{N}$	$\mathcal{E}$	$\mathcal{W}$	$\mathcal{S}$
$\mathcal{N}$	1	0	0	0
$\mathcal{E}$	0	$\sqrt{\frac{(2s-2)(2s+1)}{(2s-1)2s}}$	0	0
$\mathcal{W}$	0	$\sqrt{\frac{2}{(2s-1)2s}}$	1	0
$\mathcal{S}$	0	0	0	1

Fonte: elaborada pela autora.

Figura B.6 – Setores (q, s) e $(q, s - 1)$ cujos estados participam da relação (B.44). Destacamos os casos não-triviais de herança para os gêneros $g_{p'}-g_p$: **a)** $\mathcal{E}-\mathcal{E}$, **b)** $\mathcal{W}-\mathcal{W}$ e **c)** $\mathcal{W}-\mathcal{E}$. Fonte: elaborada pela autora.

APÊNDICE C

Condutâncias em nanoestruturas

O modelo de Anderson para descrever a interação entre elétrons metálicos e impurezas abriu espaço para o estudo de muitos outros sistemas cujas propriedades físicas pudessem ser extraídas a partir de Hamiltonianos semelhantes. Em particular, avanços em técnicas de microscopia eletrônica favoreceram investigações experimentais e teóricas de propriedades de transporte. Nesse sentido, a concordância entre os resultados é um indicativo de que o modelo de Anderson é bastante poderoso na representação de sistemas físicos em escala nanoscópica, principalmente quando é capaz de reproduzir comportamentos *universais*.

A condutância em dispositivos nanoscópicos é uma das propriedades de transporte que teve sucesso nos resultados experimentais e teóricos e demonstra como variações do modelo de Anderson são capazes de incorporar a física em nanoestruturas. Além disso, ela é ilustrativa tanto na exploração do conceito de universalidade quanto na validação dos métodos numéricos utilizados na análise teórica.

Este apêndice é dedicado ao estudo da condutância em dois dispositivos quânticos constituídos por fios quânticos acoplados a fios quânticos (19, 20). Consideraremos duas geometrias diferentes: um transistor de um único elétron *SET* e um dispositivo em formato *T*. Partindo de variantes do modelo de Anderson, mostraremos que a condutância nos dispositivos *T* e *SET* pode ser mapeada em funções universais. Para obtê-la numericamente, precisamos obter os autovalores e autovetores do modelo através do Grupo de Renormalização Numérico.

C.1 Condutância universal

Em ambos os dispositivos, ilustrados na figura C.1, o número de ocupação n_d do ponto quântico é controlado pela voltagem V_d . Quando o número n_d é ímpar, o momento magnético do ponto interage antiferromagneticamente com os elétrons de condução do fio, dando origem a um sistema que se comporta analogamente a um sistema Kondo. No regime de baixas temperaturas, o ponto quântico é rodeado pela nuvem Kondo, que pode bloquear ou favorecer a condução eletrônica, dependendo da geometria do sistema. No arranjo *SET*, o forte

acoplamento entre os elétrons de condução e o ponto supera o bloqueio quântico e favorece a condução – que cresce com a diminuição da temperatura. Em especial, nos pontos fixos, o resultado da condutância pelo método NRG é uma função universal $\mathcal{G}_{SET}(T/T_K)$ da temperatura escalada pela temperatura Kondo T_K que desce monotonicamente. Por outro lado, no dispositivo em formato T , a nuvem obstrui o transporte ao longo do fio nas proximidades do ponto quântico. Nos dispositivos menos elaborados, a condutância decai muito rápido para zero quando o sistema é resfriado e encontra-se em temperaturas $T < T_K$.

Figura C.1 – Geometrias de ponto quântico acoplado com um fio quântico. **a)** Dispositivo em formato T . O círculo laranja refere-se a um ponto quântico acoplado lateralmente a um fio quântico. Os potenciais de *gate* V_d e V_w controlam, respectivamente, a ocupação eletrônica do ponto e do orbital de Wannier. Esse dispositivo permite que haja interferência entre a corrente fluindo ao longo do fio (setas brancas) e os elétrons que conseguem passar do fio ao ponto. **b)** Transistor de um único elétron SET. Um ponto quântico faz a ponte entre dois fios quânticos não-interagentes. Um potencial V_d controla a energia no ponto quântico, enquanto os potenciais V_w deslocam a energia dos orbitais do fio próximo ao ponto. Fonte: elaborado pela autora.

No limite de acoplamento fraco, o sistema pode ser caracterizado essencialmente pelo número de ocupação n_d . A voltagem V_d controla n_d . Para V_d 's adequadamente escolhidos, a ocupação n_d pode ser fracionária, o que neutraliza o bloqueio de Coulomb e permite condução.

É portanto interessante analisar como a condutância se comporta como função da voltagem V_d . Para temperaturas não muito baixas, verifica-se uma sequência de ressonâncias, enquanto para temperaturas muito baixas a condutância apresenta uma sequência de intervalos alternados entre vales e platôs associados, respectivamente, aos comportamentos isolante e condutor. Os platôs são devidos ao efeito Kondo: a medida que o dispositivo é resfriado a temperaturas inferiores a T_K o momento espalhado produz a ressonância Kondo, capaz de superar o bloqueio Coulombiano e, por conseguinte, permitir condução através do ponto quântico.

Aplicando um desvio infinitesimal de voltagem ao sistema, podemos obter a seguinte expressão para a condutância

$$G(T) = \mathcal{G}_2 \pi \Gamma_w \int_{-D}^D \rho_d(\varepsilon, T) \left[-\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} d\varepsilon \right], \quad (\text{C.1})$$

onde $f(\varepsilon)$ é a função de Fermi, $\mathcal{G}_2 \equiv 2e^2/h$ é o quantum de condutância, $\Gamma_w = \Gamma/(1 + \pi^2 \rho^2 W^2)$ é a largura do nível do ponto c_d normalizado e ρ_d é a densidade espectral do nível energético do ponto quântico.

A seguir, apresentamos os Hamiltonianos das configurações T e SET e mostraremos como a condutância (C.1) é definida em cada uma delas.

C.2 Dispositivo em formato T

O dispositivo lateralmente acoplado em formato T compreende um fio acoplado a um ponto quântico. A corrente no sistema é carregada por elétrons que podem "pular" do fio para o ponto quântico. O parâmetro V mede a amplitude desse processo de transição, tal que para $v \rightarrow \infty$ o sistema emularia um SET. As voltagens V_d e V_w controlam a ocupação do orbital de Wanier

$$f_0 \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_k, \quad (\text{C.2})$$

onde N é o número de estados do sistema.

O Hamiltoniano que representa o dispositivo em formato T é dado por

$$H^{side} = \overbrace{\sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k + W f_0^\dagger f_0 + V(f_0^\dagger c_d + H.c.)}^{H_A} + \overbrace{\left(\varepsilon_d + \frac{U}{2} \right) n_d - \frac{U}{2} n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}}^{H_d}, \quad (\text{C.3})$$

onde $c_k (c_k^\dagger)$ aniquilam (criam) um elétron com energia ε_k , V é a amplitude de transição entre o fio e o ponto quântico, U representa a repulsão Coulombiana entre os elétrons no orbital do ponto de energia ε_d e n_d é o número de ocupação controlado pela voltagem V_d .

O primeiro termo do Hamiltoniano H_A define a banda de condução semi-preenchida com meia-largura D . O segundo termo introduz um pontencial de espalhamento controlado pela tensão V_w . A amplitude de tunelamento V acopla o nível spin-degenerado do ponto quântico ao orbital de Wanier.

Na configuração em formato T , a condutância (C.1) no nanodispositivo pode ser escrita

como

$$\mathcal{G}_{side}(T) = \mathcal{G}_2 \frac{\beta\pi\Gamma}{\mathcal{Z}} \sum_{\varphi,\psi} \frac{|\langle\varphi|f_0|\psi\rangle|^2}{e^{\beta E_\varphi} + e^{\beta E_\psi}}, \quad (\text{C.4})$$

onde $\mathcal{Z}$ é a função de partição, $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ são autoestados de H^{side} dado em (C.3) com autovalores E_φ e E_ψ , respectivamente e $\Gamma \equiv \pi\rho V^2$ é a largura do nível eletrônico do ponto quântico devida ao acoplamento com o fio.

C.3 Transístor de um único elétron

O dispositivo SET pode ser entendido como duas bandas de condução independentes acopladas com um nível localizado. O ponto quântico é assimetricamente acoplado com dois fios - que nada mais são do que gases de elétrons e estão representados por retângulos na figura C.1 b).

Quanticamente, o sistema pode ser representado por uma variante do Hamiltoniano de Anderson. O nível degenerado c_d representa o ponto quântico e as duas bandas de condução semi-preenchidas, rotuladas por $L(\text{left})$ e $R(\text{right})$, representam os dois fios quânticos. Cada um dos fios $L(R)$ compreende N estados $c_{kL}(c_{kR})$ com energia definida pela relação de dispersão $\varepsilon = (k - k_F)v_F$ tal que a largura da banda é $2D = 2k_F v_F$, onde v_F é a velocidade de fermi. O Hamiltoniano compreende três termos que representam os fios, o ponto quântico e o acoplamento entre os últimos e é escrito como

$$H^{SET} = \overbrace{\sum_{k,\alpha} \varepsilon_k c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} + W \sum_{k,q,\alpha} c_{k\alpha}^\dagger c_{q\alpha}}^{H_W} + \overbrace{V(f_0^\dagger c_d + H.c.)}^{H_d} + \overbrace{\varepsilon_d n_d + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}}^{H_{wd}}, \quad (\text{C.5})$$

onde W é o potencial de espalhamento intra-fio fixado pelo potencial V_w , $\alpha = L, R$, ε_d é a energia do nível do ponto controlada pelo potencial V_d .

Adaptando a equação (C.1) para a condutância do sistema SET, obtemos a expressão

$$\mathcal{G}_{SET}(T) = \mathcal{G}_2 \frac{\beta\pi\Gamma_w}{\mathcal{Z}} \sum_{\varphi,\psi} \frac{|\langle\varphi|c_d|\psi\rangle|^2}{e^{\beta E_\varphi} + e^{\beta E_\psi}}, \quad (\text{C.6})$$

onde $|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ são autoestados de H^{SET} com energias E_φ e E_ψ , respectivamente.

C.4 Resultados numéricos

Utilizando o método NRG para obter o espectro e o conjunto de autoestados dos Hamiltonianos H^{side} e H^{SET} dados, respectivamente, nas equações (C.3) e (C.5), somos capazes de obter numericamente as condutâncias $\mathcal{G}_{side}$ e $\mathcal{G}_{SET}$. Na figura C.2 apresentamos os resultados da condutância computada através rotina de diagonalização implementada para este trabalho de mestrado. O cálculo foi executado para três parâmetros de discretização: $\Lambda = 3.0$, $\Lambda = 2.5$ e $\Lambda = 2.0$.

Os resultados da condutância obtidos numericamente foram utilizados para validar o código que foi desenvolvido para todos as demais etapas deste projeto.

Figura C.2 – Condutâncias $\mathcal{G}_{SET}$ e $\mathcal{G}_{side}$ como função de T/T_K normalizadas pela condutância quântica $\mathcal{G}_2$. A curva vermelha mostra a condutância $\mathcal{G}_{side}$ através do dispositivo lateralmente acoplado. A medida que a temperatura é resfriada, a condutância decai a zero. Por outro lado, a condutância $\mathcal{G}_{SET}$, mostrada em verde, cresce para $T < T_K$ e tende à unidade no limite $T \rightarrow 0$. Note que para $T = T_K$ temos $G(T/T_K) = 0.5\mathcal{G}_2$ e as duas condutâncias coincidem. Fonte: elaborado pela autora.