

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

RODRIGO SOARES VEIGA

Efeitos de hibridização correlacionada
no modelo de Anderson de uma impureza

São Carlos

2012

RODRIGO SOARES VEIGA

Efeitos de hibridização correlacionada no modelo de Anderson de uma impureza

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 Básica
Orientador: Prof. Dr. Valter Luiz Líbero

Versão corrigida

(versão original disponível na Unidade que aloja o Programa)

São Carlos

2012

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTES TRABALHOS, 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)

Veiga, Rodrigo Soares

Efeitos de hibridização correlacionada no modelo de Anderson de uma impureza / Rodrigo Soares Veiga; orientador Valter Luiz Líbero - versão corrigida -- São Carlos, 2012.

135 p.

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

1. Modelo de Anderson. 2. Hibridização correlacionada. 3. Grupo de renormalização numérico. 4. Propriedades termodinâmicas. 5. Física da matéria condensada. I. Líbero, Valter Luiz, orient. II. Título.

À MEMÓRIA DE MEU AVÔ,

JOSÉ VEIGA MARTINS (1930-2010)

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço a meus pais, Marcos e Jane, não só por todo o apoio desde que ingressei na vida universitária e vim à São Carlos, no ano de 2006, mas principalmente por todo o amor, carinho e tolerância fornecidos por eles, desde sempre.

De minhas memórias de infância guardo com louvor e saudades as lembranças de meus avós Mercedes, Alberto e Glorinha, os quais me foram imprescindíveis e por quem sou muito grato. Ademais, agradeço profundamente ao meu avô José, para quem dedico este trabalho. Tive o prazer de conviver com ele, ou ao menos conversar desde que resido em São Carlos, cotidianamente até meados de 2010. Sua lembrança e seu modo honesto, verdadeiro e lutador de encarar a vida permanecerão sempre vivos em meu coração e minha memória.

Agradeço também ao meu orientador, Valter L. Líbero, por quem tenho grande estima, tanto profissional, quanto pessoal. Espero que nossa amizade, nascida na interação orientador-aluno, mas que no entanto a transcendeu, seja cultivada mesmo após o término deste trabalho.

Sou grato também a sempre atenciosa Maria Cristina V. L. da Silva, da secretaria do grupo, bem como a não menos dedicada e cortês Maria Cristina C. Dziabas, da biblioteca, além de suas colegas que lá trabalham, sempre dispostas a ajudar. Adicionalmente, relembro e agradeço a infra-estrutura disponibilizada pela USP e pelo IFSC, bem como o apoio financeiro da FAPESP.

Com relação às amigas é sempre difícil citar de forma justa as diversas pessoas relevantes que permeiam ou permearam nossa vida, quanto mais expressar nossos sentimentos por elas.

Primeiramente, agradeço em especial à Cora Castelo Branco. Pessoa especial e fundamental na minha vida, que tem me acompanhado ao longo desses anos; sempre, de algum modo, ao meu lado.

Gostaria muito de, além de agradecer, comentar separadamente sobre diversas pessoas importantes na minha vida e formação. Adicionado à impossibilidade de fazer isso aqui, está o temor de ser injusto. Por isso me limito a um agradecimento democrático e simples,

porém verdadeiro, a: Luciano Falqueto, Daniel Orsini, Anderson R. de Oliveira, Cássio Carrara, Felipe C. Penha, Itauã Bergoc, Tiago Batalhão, Jéssika O. Alves, Ana Leopoldina Leminski e Marcos Falqueto.

Além disso, aos amigos mais recentes do mestrado: Camilo Valencia, Luís Felipe Gonçalves, Caio Wetterich e Renato J. Martins - este último agradeço em especial pela ajuda na formatação da dissertação. Agradeço também aos meus colegas de sala: Fabiano C. de Souza, Marco Hachiya, Mariana M. Odashima, Denis R. Candido e Jiyong Fu.

De minhas amizades em Sorocaba, cujos laços, apesar da distância, ainda se mantêm, agradeço a Alexandre Sfeir, Gustavo Montanhan, Luís Felipe Abud, Laura Saker, Jean Ortiz, Danilo Janczur, Valter Santiago e Gabriella Rancan.

Agradeço também ao Colégio Dom Aguirre, escola onde passei minha infância e adolescência, em que aprendi muitas coisas e conheci diversas pessoas interessantes. Em especial guardo a lembrança da professora Joyse E. Moron, a quem agradeço pelo estímulo inicial para a física.

Por fim, peço desculpas por um eventual esquecimento.

*Este trabalho foi financiado pela
FAPESP*

“Nosso erro é admitir que as coisas se apresentem, de hábito, tais como são na realidade, os nomes tais como são escritos, as pessoas tais como a fotografia e a psicologia fornecem uma noção imóvel. Mas, na verdade, não é absolutamente isto o que em geral percebemos. Vemos, ouvimos e concebemos o mundo inteiramente às avessas.”

MARCEL PROUST (1871-1922)

Resumo

VEIGA, R. S. **Efeitos de hibridização correlacionada no modelo de Anderson de uma impureza**. 2012. 135 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) – Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.

O desenvolvimento de novos materiais tem tido papel fundamental nos recentes avanços tecnológicos. Esse progresso depende muito de fundamentos teóricos que abordem mecanismos microscópicos da matéria, ou seja, como átomos e moléculas interagem e geram configurações especiais, responsáveis pelo seu comportamento macroscópico. Dentre os materiais de interesse na atualidade estão os sistemas contendo impurezas magnéticas diluídas, isto é, átomos com camadas d ou f incompletas imersos, por exemplo, em metais não magnéticos, como átomos de ferro em uma matriz de cobre. Tradicionalmente, estes sistemas tem sido tratados através dos modelos de Kondo ou Anderson, os quais, desde os primeiros estudos na década de 1960, estão entre os mais importantes em física da matéria condensada. Neste trabalho, estudamos especificamente o modelo de Anderson de uma impureza. Ele se caracteriza por considerar uma correlação quando dois elétrons de *spins* opostos ocupam o nível localizado que representa a impureza. Além de, por outro termo no Hamiltoniano, contabilizar a hibridização eletrônica entre a banda de condução e a impureza, devido à superposição das funções de onda dos elétrons localizados e itinerantes. Em acréscimo ao modelo tradicional, incluímos um termo de hibridização adicional, que depende explicitamente do número de ocupação do nível localizado. Este termo de interação que acopla diretamente no Hamiltoniano o processo de hibridização e os efeitos de correlação é denominado de hibridização correlacionada. Através da estruturação e da consequente aplicação da técnica do Grupo de Renormalização Numérico – a qual estabelece uma transformação no Hamiltoniano, que a cada passo acrescenta uma escala de energia ao problema e constrói um método iterativo, no qual um Hamiltoniano é diagonalizado numericamente a cada iteração –, analisamos os efeitos de hibridização correlacionada sobre parte da física do modelo de Anderson de uma impureza. Em particular, isso é feito por meio de dados numéricos para a dependência da contribuição da impureza a três propriedades termodinâmicas – são elas: suscetibilidade magnética, calor específico e entropia – em função da temperatura, desde o topo da banda de condução até o nível de Fermi.

Palavras-chave: Modelo de Anderson. Hibridização correlacionada. Grupo de renormalização numérico. Propriedades termodinâmicas. Física da matéria condensada.

Abstract

VEIGA, R. S. **Effects of correlated hybridization in the single-impurity Anderson model.** 2012. 135 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2012.

The development of new materials has been playing a fundamental role in the currently technological advances. This improvement is strongly dependent on the theoretical foundations which study the microscopic matter engine, i.e., the way atoms and molecules interact and create distinct configurations, responsible for their macroscopic behavior. Among the interesting materials, there are the dilute magnetic impurity systems. They are constituted by partially filled d or f orbital atoms immersed, for example, in nonmagnetic metals; like iron atoms in a copper background. Traditionally, such system has been described by the Kondo and Anderson models, which are, since the sixties, two of the most important models in condensed matter physics. In the present work, we specifically study the single-impurity Anderson model. It is characterized by taking correlation into account when two particles with opposite spins fill the impurity localized energy level. Beyond, by another term in the Hamiltonian, it considers the electronic hybridization between impurity and conduction band, due their wave functions overlap. In addition to the usual model, we include a different hybridization term, which explicitly depends on localized level occupation number. This new interaction term, which couples hybridization process and correlation effects directly in the Hamiltonian, is named correlated hybridization. Through the exposition of Numerical Renormalization Group technique and its consequent enforcement - the procedure states a transformation in the Hamiltonian, where each step adds an energy scale to the problem and set up an iterative scheme, where a Hamiltonian is numerically diagonalized at each iteration - we analyse effects of correlated hybridization on part of the single-impurity Anderson model physics. In particular, this is done by numerical renormalization group data for the temperature dependence of the impurity contribution to three thermodynamical properties - they are: magnetic susceptibility, specific heat and entropy -, from the top of the conduction band until the Fermi level.

Keywords: Anderson model. Correlated hybridization. Numerical renormalization group. Thermodynamic properties. Condensed matter physics.

LISTA DE FIGURAS

- Figura 2.1 – Representação esquemática do modelo de Anderson de uma impureza no contexto de um banho fermiônico descrito por uma banda de condução semipreenchida no intervalo $[-1, 1]$, em unidades de D , que interage com um nível localizado via troca de partículas. Este pode estar vazio com energia zero, unicamente ocupado com energia ε_f ou duplamente ocupado com energia $2\varepsilon_f + U$. Quando $2\varepsilon_f + U = 0$, os estados vazio e duplamente ocupado são degenerados e o Hamiltoniano dado pelas Eqs.(2.2) é invariante sob as transformações $f_\sigma \leftrightarrow -f_\sigma^\dagger$ e $c_{k\sigma} \leftrightarrow c_{-k,\sigma}^\dagger$, caso em que o modelo é dito simétrico. 38
- Figura 2.2 – Representação esquemática de dois possíveis casos de hibridização, nos quais uma partícula com *spin up* sai do nível da impureza em direção ao banho. Obviamente, o processo no sentido inverso, e ainda os casos de *spin down*, são análogos. (a) Ocupação única do nível da impureza: somente o termo tradicional, proporcional a V_k , contribui para a hibridização, pois a aplicação do operador $f_\downarrow^\dagger f_\downarrow$, após $c_{k\uparrow}^\dagger f_\uparrow$, anula o de hibridização correlacionada. (b) Dupla ocupação do nível da impureza: além do termo usual, proveniente da atuação do operador $V_k c_{k\uparrow}^\dagger f_\uparrow$, há ainda a parte adicional devido à dupla ocupação do nível da impureza, pois neste caso o operador $-W_k f_\downarrow^\dagger f_\downarrow c_{k\uparrow}^\dagger f_\uparrow$ contribui, resultando em uma hibridização $V_k - W_k$. Em suma, \mathcal{H}_W apresenta contribuição não nula quando o nível da impureza está duplamente ocupado no início ou no fim do processo de troca de partículas. . . 39
- Figura 3.1 – Passos iniciais do método do GRN ilustrados para o modelo de Anderson de uma impureza, no qual a impureza (anel circular) se acopla a uma banda de condução contínua via função hibridização $\Delta(\omega)$ constante. (a) Conjunto logarítmico de intervalos introduzido pelo parâmetro de discretização $\Lambda > 1$. (b) O espectro contínuo interno a cada um destes intervalos é aproximado por um único estado. (c) O modelo discretizado é mapeado em uma cadeia semi-infinita (no sentido de apresentar uma condição de contorno mesmo sendo infinita) na qual a impureza se acopla somente ao primeiro sítio referente aos elétrons de condução, via as hibridizações V e W . (d) Construção de um processo de diagonalização iterativa da cadeia que pode ser entendido como uma transformação \mathcal{R} do grupo de renormalização. 43

- Figura 3.2 – Discretização logarítmica do domínio da função hibridização do banho por meio do parâmetro $\Lambda > 1$. Apesar de mostrarmos somente a região $\varepsilon > 0$, a discretização é simétrica com relação a $\varepsilon = 0$. Em metais considera-se que a banda de condução é sempre preenchida e simétrica ao nível de Fermi ε_F , definido como o zero de energia, $\varepsilon_F \equiv 0$ 45
- Figura 3.3 – Representação esquemática do mapeamento do modelo original em um formato de cadeia semi-infinita, dado pela Eq.(3.26). O anel circular, sobre o qual atuam os operadores $t_{0\sigma}^{(\dagger)}$, condensa os graus de liberdade da impureza. Por sua vez, a contribuição do banho é representada por círculos preenchidos, sobre os quais atuam os operadores $c_{n\sigma}^{(\dagger)}$. Somente o sítio da cadeia com $n = 0$ se liga diretamente à impureza, via V e W . A contribuição dos outros graus de liberdade do banho se dá pela interação entre os sítios referentes a ele. Os parâmetros do Hamiltoniano na forma tridiagonal, análogos aos de um modelo *tight-binding*, são as energias locais ε_n de cada sítio e os elementos de matriz t_n , sendo que estes quantificam a força da interação entre os sítios vizinhos relativos à banda de condução. 51
- Figura 3.4 – Em cada etapa do processo de diagonalização iterativa um sítio da cadeia, com energia ε_{N+1} e operadores $c_{N+1}^{(\dagger)}$, é adicionado ao Hamiltoniano \mathcal{H}_N . A base $|r; s\rangle_{N+1}$ do Hamiltoniano resultante \mathcal{H}_{N+1} é formada pelo produto dos autoestados de \mathcal{H}_N , $\{|r\rangle_N\}$, com uma base $\{|s(N+1)\rangle\}$ relativa ao sítio adicionado. 56
- Figura 3.5 – (a) Espectro $E_N(r)$ do Hamiltoniano \mathcal{H}_N com a energia do estado fundamental definida como zero. (b) Primeiro termo do lado direito da Eq.(3.37); fator de escala $\Lambda^{1/2}$ atuando sobre o espectro de \mathcal{H}_N . (c) Espectro $E_{N+1}(w)$ de \mathcal{H}_{N+1} , calculado pela diagonalização da matriz cujos elementos são dados pela Eq.(3.43). (d) Espectro de \mathcal{H}_{N+1} após o truncamento, no qual apenas os N_s estados de menor energia foram mantidos. Como, de acordo com a Eq.(3.35), os autovalores de \mathcal{H}_{N+1} são proporcionais a $\Lambda^{(N-1)/2}$, para evitar o crescimento exponencial, a cada iteração o estado fundamental é definido como o zero de energia. 57
- Figura 3.6 – Energias mais baixas de \mathcal{H}_N - dado pela Eq.(3.37) - em função de N ímpar; para $\Delta(\omega) = \Delta_0$ constante, $V = 0.00006$, $U = 0.02$, $\varepsilon_f = -10^{-5}$, $W = 0$. As energias mais baixas mudam muito pouco com N ímpar em praticamente quatro regiões: nas primeiras iterações ($N < 5$), em duas regiões de valores intermediários de N ($5 < N < 15$ e $15 < N < 30$) e para $N > 30$, as quais caracterizam quatro pontos fixos. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, em unidades da semilargura de banda D 72
- Figura 3.7 – Distinção entre os pontos provenientes das dez primeiras iterações para a dependência de uma propriedade física arbitrária e ilustrativa com a temperatura, Φ versus T , utilizando $\beta = 0.6, 0.8, 1.0, 1.2$ 74
- Figura 3.8 – Contribuição da impureza a propriedades termodinâmicas do modelo: $T\chi_{\text{imp}}$ e C_{imp} em função da temperatura no gráfico superior, sendo que o eixo ordenado da esquerda se refere a primeira propriedade e o da direita a segunda. No gráfico inferior, $\exp(S_{\text{imp}})$ em função da temperatura T . Parâmetros: $V = 0.0006$, $U = 0.02$, $\varepsilon_f = -10^{-5}$, $W = 0$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, em unidades da semilargura de banda D 80

Figura 3.9 – Representação esquemática dos estados acessíveis da impureza isolada para o particular espaço de parâmetros do modelo, cujos valores referentes a impureza são $\varepsilon_f = -10^{-5}$ e $U = 0.02$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, definido como o zero de energia, em unidades da semilargura de banda D , assim como na Fig.2.1.	81
Figura 3.10 – Comparação entre a curva universal e os dados de $T\chi_{imp}$ em função da temperatura, reescalados por $T_K = 4.1 \times 10^{-11}$, para os mesmos parâmetros da Fig.3.8: $V = 0.0006$, $U = 0.02$, $\varepsilon_f = -10^{-5}$, $W = 0$. Novamente, todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, em unidades da semilargura de banda D	85
Figura 3.11 – Exemplo de um conjunto de curvas $T\chi_{imp}$ versus T que apresenta comportamento universal em baixas temperaturas. Em cada uma delas escolhemos diferentes parâmetros V , W , ε_f e U ; conseqüentemente, cada uma é caracterizada por um valor diferente de T_K	86
Figura 3.12 – Comparação entre a curva universal e os dados de $T\chi_{imp}$ em função da temperatura, reescalados por $T_K = 5.1 \times 10^{-5}$, para um conjunto de parâmetros em que $T\chi_{imp}$ não segue o comportamento universal em baixas temperaturas.	86
Figura 3.13 – Discretização logarítmica do domínio da função hibridização do banho por meio de dois parâmetros: $\Lambda > 1$ e $0 < z \leq 1$. Apesar de mostrarmos somente a região $\varepsilon > 0$, a discretização é simétrica com relação a $\varepsilon = 0$. Note que para $z = 1$ a discretização apresentada na Fig.3.2 é recuperada.	87
Figura 3.14 – Exemplo da eficiência do uso do parâmetro z na melhora dos resultados para $T\chi_{imp}$ e $\exp(S_{imp})$, utilizando $\Lambda = 5$ e dois valores do novo parâmetro z : $z = 0.5$ e $z = 1$. Quanto aos parâmetros do modelo, $V = 0.0006$, $U = 0.02$, $\varepsilon_f = -10^{-5}$, $W = 0$	89
Figura 4.1 – Representação esquemática dos estados acessíveis da impureza isolada para o particular espaço de parâmetros do modelo, cujos valores referentes a impureza são $\varepsilon_f = -0.001$ e $U = 0.002$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, definido como o zero de energia, em unidades da semilargura de banda D , assim como na Fig.2.1.	93
Figura 4.2 – Contribuição da impureza a propriedades termodinâmicas do modelo: $T\chi_{imp}$ e $\exp(S_{imp})$ em função da temperatura T . Parâmetros do modelo: $V = 0.005$, $U = 0.002$, $\varepsilon_f = -0.001$. Parâmetros do grupo de renormalização numérico: $\Lambda = 3.5$; procedimento intercalado com $z = 1$ e $z = 1/2$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, em unidades da semilargura de banda D	94
Figura 4.3 – Contribuição da impureza a propriedades termodinâmicas do modelo: C_{imp} e $\exp(S_{imp})$ em função da temperatura T . Parâmetros do modelo: $V = 0.005$, $U = 0.002$, $\varepsilon_f = -0.001$. Parâmetros do grupo de renormalização numérico: $\Lambda = 3.5$; procedimento intercalado com $z = 1$ e $z = 1/2$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, em unidades da semilargura de banda D	96

Figura 4.4 – Representação esquemática dos estados acessíveis da impureza isolada para o particular espaço de parâmetros do modelo, cujos valores referentes a impureza são $\varepsilon_f = -0.001$ e $U = 0.001$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, definido como o zero de energia, em unidades da semilargura de banda D , assim como na Fig.2.1.	97
Figura 4.5 – Contribuição da impureza a propriedades termodinâmicas do modelo: $T\chi_{imp}$ e $\exp(S_{imp})$ em função da temperatura T . Parâmetros do modelo: $V = 0.003$, $U = 0.001$, $\varepsilon_f = -0.001$. Parâmetros do grupo de renormalização numérico: $\Lambda = 3.5$; procedimento intercalado com $z = 1$ e $z = 1/2$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, em unidades da semilargura de banda D	98
Figura 4.6 – Contribuição da impureza a propriedades termodinâmicas do modelo: C_{imp} e $\exp(S_{imp})$ em função da temperatura T . Parâmetros do modelo: $V = 0.003$, $U = 0.001$, $\varepsilon_f = -0.001$. Parâmetros do grupo de renormalização numérico: $\Lambda = 3.5$; procedimento intercalado com $z = 1$ e $z = 1/2$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, em unidades da semilargura de banda D	99
Figura 4.7 – Representação esquemática dos estados acessíveis da impureza isolada para o particular espaço de parâmetros do modelo, cujos valores referentes a impureza são $\varepsilon_f = 0$ e $U = 0.001$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, definido como o zero de energia, em unidades da semilargura de banda D , assim como na Fig.2.1.	100
Figura 4.8 – Contribuição da impureza a propriedades termodinâmicas do modelo: $T\chi_{imp}$ e $\exp(S_{imp})$ em função da temperatura T . Parâmetros do modelo: $V = 0.001$, $U = 0.001$, $\varepsilon_f = 0$. Parâmetros do grupo de renormalização numérico: $\Lambda = 3.5$; procedimento intercalado com $z = 1$ e $z = 1/2$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, em unidades da semilargura de banda D	101
Figura 4.9 – Contribuição da impureza a propriedades termodinâmicas do modelo: C_{imp} e $\exp(S_{imp})$ em função da temperatura T . Parâmetros do modelo: $V = 0.001$, $U = 0.001$, $\varepsilon_f = 0$. Parâmetros do grupo de renormalização numérico: $\Lambda = 3.5$; procedimento intercalado com $z = 1$ e $z = 1/2$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, em unidades da semilargura de banda D	102
Figura 4.10 – Contribuição da impureza a propriedades termodinâmicas do modelo: $T\chi_{imp}$ e $\exp(S_{imp})$ em função da temperatura T . Parâmetros do modelo: $V = 0.0006$, $U = 0.02$, $\varepsilon_f = -10^{-5}$. Parâmetros do grupo de renormalização numérico: $\Lambda = 3.5$; procedimento intercalado com $z = 1$ e $z = 1/2$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, em unidades da semilargura de banda D	104
Figura 4.11 – Contribuição da impureza a propriedades termodinâmicas do modelo: C_{imp} e $\exp(S_{imp})$ em função da temperatura T . Parâmetros do modelo: $V = 0.0006$, $U = 0.02$, $\varepsilon_f = -10^{-5}$. Parâmetros do grupo de renormalização numérico: $\Lambda = 3.5$; procedimento intercalado com $z = 1$ e $z = 1/2$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, em unidades da semilargura de banda D	105

LISTA DE TABELAS

- Tabela 3.1 – Base de estados utilizada na diagonalização de \mathcal{H}_0 , dado pela Eq.(3.48), com $2\varepsilon_f + U = 0$. A escolha de combinações lineares no subespaço de carga 2, apesar de não ser estritamente necessária, é conveniente e simplifica os cálculos. . . . 60
- Tabela 3.2 – Autovalores, em unidades de $\Lambda^{1/2}$, e autoestados de \mathcal{H}_0 , com $2\varepsilon_f + U = 0$, separados conforme seus valores de carga e *spin*. A letra Ω é uma mera síntese notacional e representa em cada autoestado o seu respectivo autovalor, em unidades de $\Lambda^{1/2}$. 62

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	27
1.1	Comentários preliminares e organização da dissertação	27
1.2	Uma breve história do magnetismo: da superstição às equações de Maxwell	28
1.3	O século XX e a chave para a compreensão: a mecânica quântica	31
2	MODELO DE ANDERSON	35
2.1	Modelo de Anderson de uma impureza	36
2.2	Hibridização correlacionada	38
3	GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO NUMÉRICO	41
3.1	Representação integral	42
3.2	Discretização logarítmica	45
3.3	Mapeamento em uma cadeia semi-infinita	49
3.4	Diagonalização iterativa	54
3.5	Hibridização independente de k e dispersão linear: o caso estudado numericamente neste trabalho	58

3.6	Diagonalização de \mathcal{H}_0	59
3.7	Construção da base de estados para a diagonalização de \mathcal{H}_{N+1}	62
3.8	Elementos de matriz de \mathcal{H}_{N+1}	67
3.8.1	Elementos de matriz invariantes	69
3.9	O conceito de ponto fixo	71
3.10	Contribuição da impureza a propriedades físicas	73
3.10.1	Propriedades termodinâmicas	75
3.11	Relação entre pontos fixos e propriedades termodinâmicas	79
3.11.1	Ponto fixo de impureza livre	81
3.11.2	Ponto fixo de valência flutuante	82
3.11.3	Ponto fixo de momento local	83
3.11.4	Ponto fixo de baixas temperaturas	83
3.11.4.1	Regime universal	84
3.11.4.2	Regime não universal	85
3.12	Removendo oscilações espúrias: a média em z	87
4	RESULTADOS NUMÉRICOS	91
4.1	Parâmetros: $V = 0.005$, $U = 0.002$ e $\varepsilon_f = -0.001$	92
4.2	Parâmetros: $V = 0.003$, $U = 0.001$ e $\varepsilon_f = -0.001$	95
4.3	Parâmetros: $V = 0.001$, $U = 0.001$ e $\varepsilon_f = 0$	98
4.4	Parâmetros: $V = 0.0006$, $U = 0.02$ e $\varepsilon_f = -10^{-5}$	103
5	OBSERVAÇÕES FINAIS E PERSPECTIVAS	107
	REFERÊNCIAS	109
	APÊNDICES	113

A	Demonstração do teorema de Wigner-Eckart	115
B	Tensores $c_{N\sigma}^\dagger$ e $-2\sigma c_{N\sigma}$	119
C	Cálculo dos elementos de matriz de \mathcal{H}_{N+1}	123
D	Cálculo dos elementos de matriz invariantes	131

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

1.1 Comentários preliminares e organização da dissertação

Neste trabalho temos por objetivo final a análise dos efeitos de um termo adicional de hibridização, o qual leva em conta efeitos de correlação, sobre o tradicional modelo de Anderson de uma impureza.

A dissertação está dividida em cinco capítulos e quatro apêndices. Princípios o trabalho, na sequência deste capítulo, com uma descrição histórica¹⁻³ do magnetismo, remontando brevemente desde as explicações metafísicas para o fenômeno até o advento da mecânica quântica, e o posterior estudo de momentos magnéticos localizados em metais.

Depois, no Capítulo 2, descrevemos o modelo de Anderson de uma impureza, discutindo separadamente cada termo que o compõe, para, seguidamente, introduzir o chamado termo de hibridização correlacionada.

Em seguida, no Capítulo 3, o mais extenso do trabalho, trabalhamos com a técnica do Grupo de Renormalização Numérico (GRN). Apresentamos desde a discretização logarítmica, característica do procedimento, até a construção do método iterativo. Além disso, debatemos o conceito de ponto fixo e o relacionamos a algumas propriedades termodinâmicas do modelo.

Posteriormente, no Capítulo 4, via resultados numéricos obtidos pelo GRN, analisamos os efeitos de hibridização correlacionada através da contribuição da impureza a três

propriedades termodinâmicas do modelo: suscetibilidade magnética, calor específico e entropia.

Por fim, no Capítulo 5, apresentamos um breve apanhado representativo do conteúdo desenvolvido ao longo da dissertação, além de discutir certas perspectivas de trabalho.

Adicionalmente, temos quatro apêndices, os quais serão referenciados oportunamente ao longo do texto.

1.2 Uma breve história do magnetismo: da superstição às equações de Maxwell

Os fenômenos magnéticos, conhecidos desde os tempos da Grécia Antiga, fascinam a humanidade há séculos. Os primeiros relatos datam de 800 a.C, no entanto, as explicações dos gregos eram inteiramente metafísicas. Mencionavam uma espécie de “umidade” do ferro, para a qual a “secura” do magneto era atraída; ou ainda, que algumas pedras teriam uma espécie de “alma”, de origem divina. Segundo uma lenda grega, registrada pelo historiador romano Plínio, o Velho (23-79), uma pedra teria sido encontrada por um pastor chamado Magnes. Um dia, enquanto cuidava de suas ovelhas, ele teria sentido uma estranha força que vinha do chão onde pisava, a qual puxava os pregos de sua sandália e a ponta de seu cajado. Então sua curiosidade se aguçou e ele resolveu cavar o solo, encontrando uma estranha pedra preta. O nome Magnetita teria sido dado em homenagem ao pastor. Porém, a versão mais aceita para essa nomenclatura provém do fato da pedra, capaz, em estado natural, de atrair o ferro, ter sido encontrada em uma região da Grécia chamada Magnésia.

As superstições a respeito do fenômeno perduraram até o período da renascença (entre os séculos XIII e XVII). Nesta época, o magnetismo figurou com extrema importância através da bússola, fundamental nas grandes navegações - provavelmente foi a primeira aplicação tecnológica do magnetismo. A maioria dos historiadores credita sua invenção aos chineses, em algum período entre 2600 a.C e 1100 d.C. Por volta de 1088, sabe-se que a bússola foi descrita de forma precisa por Shen Kuo (1031-1095). No entanto, os primeiros trabalhos rigorosos surgiram no século XVII com o inglês William Gilbert (1544-1603), em “*De*

Magnete, Magneticisque Corporibus, et de Magno Magnete Tellure", de 1600, e com o francês René Descartes (1596-1650). Gilbert propôs um modelo para o geomagnetismo, sendo o primeiro a afirmar que a Terra era um grande magneto, além de introduzir a palavra eletricidade. Descartes atribuiu o magnetismo a partes "enroscadas" que penetrariam em "canais" existentes nos magnetos e na Terra, indo de um polo - aqui surge o conceito de polos - a outro.

Após os séculos de ideias metafísicas, com o aprimoramento da metodologia científica - iniciada com Descartes e consolidada principalmente pelo italiano Galileu Galilei (1564-1642) e pelo inglês Isaac Newton (1643-1727) -, o entendimento do magnetismo, e também da eletricidade - ainda tratados como fenômenos distintos -, progrediu rapidamente, se comparado ao lento avanço dos séculos anteriores. Observações de 1681 narram a desorientação de uma bússola quando um raio atingiu uma embarcação, o que gerou as primeiras ideias sobre as conexões entre eletricidade e magnetismo. Em 1750, o inglês John Mitchell (1724-1793), em "*A Treatise of Artificial Magnets*", enuncia que a ação de um ímã sobre outro pode ser representada por uma lei de força que varia com o inverso do quadrado das distâncias entre os pólos individuais dos ímãs.

Na metade final do século XVIII, o francês Charles A. de Coulomb (1736-1806) estabeleceu a lei das forças eletrostáticas: utilizando uma balança de torção, inventada por ele próprio, descobre a lei do inverso do quadrado da distância para a força exercida entre cargas elétricas, conhecida como lei de Coulomb. Além disso, verifica a lei enunciada por Mitchell para ímãs e sugere a impossibilidade de monopolos magnéticos. Em seguida, merece destaque o dinamarquês Hans C. Ørsted (1777-1851). Este acreditava na unidade da natureza, e, conseqüentemente, na ligação entre fenômenos naturais. Ao conhecer o alemão Johann W. Ritter (1776-1810), o qual cria na existência de uma relação entre eletricidade e magnetismo, começou a trabalhar intensamente nesta área. Percebendo que uma corrente elétrica é capaz de gerar um efeito magnético, defletindo uma bússola nas proximidades de um circuito elétrico, mostrou claramente que havia uma conexão entre eletricidade e magnetismo. O francês André-Marie Ampère (1775-1836) estruturou a teoria desse fenômeno com a chamada lei de Ampère. Afirmou que a deflexão da agulha de uma bússola causada por uma corrente elétrica poderia ser utilizada para medir a intensidade da corrente - princípio do galvanômetro. Além disso, introduziu a noção de campo magnético, sugerindo até que o magnetismo era resultado de correntes microscópicas. O

trabalho dos franceses Jean-Baptiste Biot (1774-1862) e Félix Savart (1791-1841) forneceu uma relação entre campo magnético e as correntes, que são suas fontes, conhecida como lei de Biot-Savart, a qual pode ser derivada da lei de Ampère ou vice-versa. O tratado "*Atlas des Erdmagnetismus*", do alemão Wilhelm E. Weber (1804-1891) também é digno de referência no cenário entre os séculos XVIII e XIX. Além de escrever esta obra, ele inventou, juntamente com o compatriota Carl F. Gauss (1777-1855), o primeiro telégrafo eletromagnético. Do mesmo modo, o francês François Arago (1786-1853) merece menção pelos seus experimentos em magnetismo; além de cientista foi político e primeiro ministro da França.

O século XIX foi marcado por dois dos maiores nomes da história da física. Um deles com viés experimental, o inglês Michael Faraday (1791-1867), e outro teórico, o escocês James C. Maxwell (1831-1879).

Faraday era um experimentalista nato, não conhecia muitas ferramentas matemáticas, como o cálculo diferencial, e fez imensas contribuições sem escrever uma equação sequer. Os impactos de suas descobertas são certamente grandes, cobrem áreas significativas da física e da química modernas, e a tecnologia desenvolvida baseada em seu trabalho ainda está presente. Logo após a descoberta de Ørsted, Faraday foi um dos primeiros a estudar as conexões entre eletricidade e magnetismo. Em 1831, descobriu a indução eletromagnética, o princípio por trás do gerador e do transformador elétricos - o americano Joseph Henry (1797-1878) obteve o mesmo achado, independentemente, mas publicou seu trabalho após Faraday. Em termos práticos, essa descoberta, entre outras, forneceu a base para os trabalhos de engenharia do fim do século XIX feitos por pessoas como o austríaco Nikola Tesla (1856-1943), os americanos Thomas A. Edison (1847-1931) e George Westinghouse (1846-1914) e o alemão Ernst von Siemens (1816-1892), que tornaram possível a eletrificação das sociedades industrializadas. Ademais, as ideias de Faraday sobre os campos elétricos e magnéticos e sobre a natureza dos campos em geral, inspiraram muitos trabalhos posteriores.

Por sua vez, os estudos de Maxwell sobre eletricidade e magnetismo começaram em 1854 e terminaram um pouco antes de sua morte, em 1879. Eles podem ser divididos em duas grandes partes: antes de 1868 publicou os principais trabalhos sobre os fundamentos da teoria eletromagnética; e, após 1868, publicou seu mais famoso livro, "*A Treatise on*

Electricity and Magnetism", e uma dezena de artigos sobre outros assuntos. Sua mais notável contribuição é a exposição das leis fundamentais do então recém denominado campo eletromagnético. Formulou matematicamente as observações de Faraday, relacionando-as às leis de Gauss e Ampère - esta por ele próprio modificada -, juntando finalmente a eletricidade, o magnetismo e a óptica por meio de quatro célebres equações.

A seguir, em 1881, o escocês James A. Ewing (1855-1935) e o alemão Emil G. Warburg (1846-1931) detectam a histerese magnética - o campo residual de um material ferromagnético. Mesmo após os trabalhos de Maxwell, que representam o ápice do Eletromagnetismo Clássico, haviam questões pendentes, como o entendimento do magnetismo remanescente, a reposta da matéria a campos magnéticos aplicados. Essencialmente, explicar o magnetismo de um ímã permanente, questão que permanecia sem resposta desde a Grécia Antiga.

Apesar de tantos progressos - vitais, porém sintetizados aqui em poucas linhas, em que certamente muitos resultados e ideias relevantes foram omitidos - no entendimento da relação entre o magnetismo e outros campos da física, até então independentes, como eletricidade e óptica, a real natureza do deslumbrante fenômeno descoberto na antiguidade permanecia um mistério e só foi elucidada no século XX, com o advento da mecânica quântica.

1.3 O século XX e a chave para a compreensão: a mecânica quântica

Já no final do século XIX, as teorias atômico-moleculares demonstravam força. Ampère tinha a proposta mais coerente para a explicação do magnetismo espontâneo, relacionando o fenômeno a "micro-correntes" moleculares. Na verdade, ele não estava completamente equivocado, mas ignorava que tais "micro-correntes" fossem efeitos do *spin*, entidade que não apresenta análogo na mecânica clássica.

Em 1896, o holandês Pieter Zeeman (1875-1943), discípulo do compatriota Hendrik A. Lorentz (1853-1928), descobriu um desvio espectral, dependente de um campo magnético aplicado, nas linhas de absorção de um material. Isso indicava uma interação do campo

externo com alguma característica microscópica do material. Ademais, na época foram propostos modelos para a explicação do diamagnetismo e do paramagnetismo, em que se destacam os franceses Pierre Curie (1859-1906) e Paul Langevin (1872-1946). Embora o modelo clássico de Langevin funcionasse razoavelmente para o paramagnetismo, ele estava, acidentalmente, fundamentado na quantização do momento angular; essencial na mecânica quântica. O francês assumia que cada átomo possuía momento de dipolo magnético de magnitude bem definida, porém de direção variável.

Em 1911, ao longo de sua tese de doutorado, o dinamarquês Niels D. Bohr (1885-1962) demonstrou que quando estatística e mecânica clássicas são aplicadas consistentemente conclui-se que a média térmica da magnetização é sempre nula. Com isso demonstrou de maneira formal que o magnetismo espontâneo não pode ser explicado classicamente. Foi principalmente este resultado que o levou à descrição do átomo de hidrogênio por meio da quantização do momento angular; o modelo atômico de Bohr, o qual compunha a chamada “antiga mecânica quântica”.

A teoria quântica começou a tomar a forma atual em meados da década de 1920. Neste período e nos anos posteriores uma quantidade considerável de pessoas talentosas e criativas operou uma das maiores revoluções da história da humanidade. A título de menção, dentre muitos outros nomes importantes, destacamos os austríacos Erwin Schrödinger (1887-1961) e Wolfgang E. Pauli (1900-1958), os alemães Werner K. Heisenberg (1901-1976) e Max Born (1882-1970) e o inglês Paul A. M. Dirac (1902-1984).

No que concerne ao estudo de propriedades magnéticas, a descoberta da quantização do momento magnético em átomos de prata, pelos alemães Otto Stern (1888-1969) e Walther Gerlach (1889-1979), foi fundamental. Em 1925, os holandeses George E. Uhlenbeck (1900-1988) e Samuel A. Goudsmit (1902-1978) introduziram o conceito do *spin* eletrônico. Contudo, foi Wolfgang E. Pauli (1900-1958) quem introduziu um formalismo matemático para o *spin*, baseado em matrizes.

Com isso, estava finalmente desvendada a natureza do magnetismo: o *spin* eletrônico. Todavia, o vasto leque de efeitos magnéticos exigia, e ainda exige, muitos estudos específicos, os quais ampliam cada vez mais o conhecimento sobre o assunto. Dentre alguns nomes de destaque precursores no estudo de efeitos de magnetismo via mecânica quântica estão o russo Lev D. Landau (1908-1968), o americano John H. Van Vleck (1899-1980), o

suíço Felix Bloch (1905–1983), o italiano Enrico Fermi (1901–1954) e o inglês Paul A. M. Dirac (1902–1984) – este último construiu uma teoria relativística para o elétron, levando à explicação da interação de um campo magnético com o *spin*, além de ter proposto, assim como Heisenberg, a interação de troca entre momentos magnéticos localizados. Desde então o magnetismo tem sido uma área ainda mais efervescente da física, com diversas contribuições, tanto teóricas quanto tecnológicas.

Em especial, atentamos para certas anomalias em metais relacionadas com a presença de impurezas magnéticas. Mais especificamente ao problema do mínimo da resistividade elétrica. Em geral, espera-se que a resistividade de um metal diminua com o abaixamento da temperatura. No entanto, desde a década de 1930, medidas experimentais mostravam um ponto de mínimo na dependência da resistividade com a temperatura para amostras supostamente puras. A presença de impurezas magnéticas foi sendo comprovada progressivamente e, em seguida, o mínimo da resistividade foi relacionado diretamente com a presença de momentos magnéticos localizados. No contexto teórico, o japonês Jun Kondo (1930–)⁴⁻⁶ considerou as contribuições das impurezas à resistividade por meio de um modelo em que o *spin* efetivo da impureza, localizado, se acopla à banda de condução via interação de troca do tipo Heisenberg. Pelo cálculo da taxa de espalhamento via regra de ouro de Fermi, ele obteve uma expressão em que, para um acoplamento antiferromagnético entre o *spin* localizado e os elétrons de condução, a resistividade aumenta com a diminuição da temperatura; resultado condizente com o ponto de mínimo. No entanto, seu resultado apresentava divergência logarítmica para $T \rightarrow 0$, o que apontava uma deficiência no tratamento perturbativo em baixas temperaturas, devido ao forte acoplamento banda-impureza nesse domínio. Tal problema ficou conhecido como problema Kondo e despertou grande interesse teórico, visto a simplicidade do modelo.

O primeiro a formular uma abordagem não perturbativa para o problema Kondo, e a solucioná-lo numericamente⁷, foi o americano Kenneth G. Wilson (1936–). Tal abordagem se constituiu na criação da técnica do Grupo de Renormalização Numérico (GRN). Ela estabelece uma transformação no Hamiltoniano, que a cada passo acrescenta uma escala de energia ao problema e constrói um método iterativo, no qual um Hamiltoniano é diagonalizado numericamente a cada iteração.

Por sua vez, em 1961, o americano Philip W. Anderson (1923–) introduziu o chamado

modelo de Anderson para o estudo da influência de momentos magnéticos localizados em metais. Ele se caracteriza por considerar uma correlação quando dois elétrons de *spins* opostos ocupam o nível localizado que representa a impureza. Além de, por outro termo no Hamiltoniano, contabilizar a hibridização eletrônica entre a banda de condução e a impureza, devido à superposição das funções de onda dos elétrons localizados e itinerantes. Quando a correlação é muito alta se comparada às escalas de energia do problema, o Hamiltoniano de Anderson se reduz ao de Kondo - equivalência demonstrada pelo americano John R. Schrieffer (1931-) e por P. A. Wolff⁸. Assim como o modelo de Kondo, o Hamiltoniano de Anderson foi diagonalizado numericamente por meio do GRN^{9,10}.

Nesta dissertação, especificamente, trabalhamos com o modelo de Anderson de uma impureza. Entretanto, em acréscimo ao modelo tradicional, incluímos um termo de hibridização adicional, que depende explicitamente do número de ocupação do nível localizado. Este termo de interação que acopla diretamente no Hamiltoniano o processo de hibridização e os efeitos de correlação é denominado de hibridização correlacionada. Através da estruturação e da consequente aplicação da técnica do GRN, analisamos os efeitos de hibridização correlacionada sobre parte da física do modelo de Anderson de uma impureza. Em particular, isso é feito por meio de dados numéricos para a dependência da contribuição da impureza a três propriedades termodinâmicas - são elas: suscetibilidade magnética, calor específico e entropia - em função da temperatura, desde o topo da banda de condução até o nível de Fermi.

CAPÍTULO 2

MODELO DE ANDERSON

Sistemas quânticos envolvendo impurezas têm sido objeto de grande relevância e interesse ao longo dos anos. Em geral, são compostos por dois subsistemas, um deles com poucos graus de liberdade (a impureza), acoplado a outro dotado de um número muito maior de graus de liberdade (o meio ambiente ou “banho”) do que o primeiro, sendo que ambos devem ser tratados quanticamente.

O Hamiltoniano de tal sistema é composto por três partes, a contribuição das interações da impureza com o banho, $\mathcal{H}_{\text{imp-banho}}$, bem como dos subsistemas isolados; \mathcal{H}_{imp} referente a impureza e $\mathcal{H}_{\text{banho}}$ relativo ao banho:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{imp-banho}} + \mathcal{H}_{\text{imp}} + \mathcal{H}_{\text{banho}} . \quad (2.1)$$

Qualquer método teórico para a investigação das propriedades de \mathcal{H} enfrentará dificuldades. O banho é constituído tipicamente por um conjunto (*quasi*)contínuo de graus de liberdade, o que leva a um grande espectro de energias. Não obstante, pelo fato de a impureza ser um sistema quântico interagente, seu acoplamento com o contínuo de excitações com energias arbitrariamente baixas pode levar a divergências nos tratamentos perturbativos. Um exemplo dessa dificuldade é o chamado problema Kondo⁴⁻⁶ – enfrentado primeiramente pelo japonês Jun Kondo (1930-) –, cuja física é governada por uma escala de energia, dada pela temperatura Kondo T_K , a qual depende da interação de troca J entre a impureza e a banda de condução do hospedeiro (banho) de forma não analítica: $\log T_K \propto -1/J$.

Uma maneira não perturbativa e eficiente de tratar sistemas de muitas partículas envolvendo impurezas é a técnica do grupo de renormalização numérico (GRN). Ela permite, em geral, que se faça uma varredura no espectro, através de uma certa sequência de passos de renormalização, desde altas energias, como a largura de banda, até baixas, como a temperatura Kondo, por exemplo. No entanto, seus passos devem ser efetuados numericamente, em contrapartida ao fato do método não ser perturbativo.

2.1 Modelo de Anderson de uma impureza

Apesar dos comentários acima e da Eq.(2.1) serem absolutamente gerais, todo este trabalho versará, em especial, sobre o modelo de Anderson de uma impureza em meio metálico, o qual foi proposto¹¹ pelo americano Philip W. Anderson (1923-) em 1961 para o estudo de ligas magnéticas diluídas. Estas, comumente, são consideradas como compostos constituídos por metais magnéticos dissolvidos em metais não-magnéticos, em uma concentração menor que um por cento. Desta forma, os metais magnéticos presentes no substrato não-magnético são denominados impurezas.

O metal não magnético, naturalmente um banho fermiônico, é representado por sua banda de condução, ou, mais genericamente, por um contínuo de estados (no sentido de ter muito mais graus de liberdade do que a impureza, $\sim 10^{23}$). Como as impurezas criam momentos magnéticos localizados por terem orbitais (d ou f) incompletos, supõe-se que elas podem ser simbolizadas por um único nível localizado, razão pela qual o modelo é dito de uma única impureza, o qual pode ganhar ou perder elétrons para o contínuo.

Tradicionalmente, as três contribuições no modelo de Anderson de uma impureza são dadas, em linguagem de segunda quantização, por

$$\mathcal{H}_{\text{imp-banho}} = \sum_{k\sigma} V_k (c_{k\sigma}^\dagger f_\sigma + f_\sigma^\dagger c_{k\sigma}) , \quad (2.2a)$$

$$\mathcal{H}_{\text{imp}} = \varepsilon_f \sum_{\sigma} f_\sigma^\dagger f_\sigma + U f_\uparrow^\dagger f_\uparrow f_\downarrow^\dagger f_\downarrow , \quad (2.2b)$$

$$\mathcal{H}_{\text{banho}} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} . \quad (2.2c)$$

O modelo descreve essencialmente a interação de um nível localizado de energia ε_f com um conjunto contínuo de estados com dispersão ε_k . O termo $\mathcal{H}_{\text{imp-banho}}$, proporcional a V_k , representa o acoplamento do contínuo com o nível localizado, por meio da troca de partículas. O operador $c_{k\sigma}$ destrói uma partícula do contínuo com energia ε_k e *spin* σ , enquanto que f_σ^\dagger cria uma partícula com *spin* σ no nível localizado. Evidentemente, $c_{k\sigma}^\dagger$ e f_σ são os respectivos operadores hermitianos conjugados.

O primeiro termo de \mathcal{H}_{imp} contabiliza simplesmente a contribuição energética do nível localizado, a qual depende do número de ocupação do mesmo. Claramente, há quatro configurações acessíveis no caso de elétrons: vazio, um elétron com *spin up*, um elétron com *spin down* ou duplamente ocupado, respeitando o princípio de exclusão de Pauli – nome dado em lembrança ao austríaco Wolfgang E. Pauli (1900–1958), o primeiro a conceber um formalismo matemático para o *spin*. A colocação de um segundo elétron acrescenta a parte proporcional a $U > 0$, a qual leva em conta a repulsão coulombiana entre eles e é não nula somente quando o nível localizado está duplamente ocupado. Por sua vez, o Hamiltoniano diagonal $\mathcal{H}_{\text{banho}}$ garante que o espectro contínuo do banho metálico seja considerado.

Na Fig.2.1 ilustramos esquematicamente o modelo. Nela já antecipamos a escolha, comum e conveniente, a qual será propagada sobre toda a dissertação, de tomar o contínuo como uma banda semipreenchida que se estende no intervalo $[-D, D]$. Consideramos doravante que todas as variáveis com unidade de energia são escaladas pela semilargura de banda D . Como estamos interessados nas excitações nos arredores do nível de Fermi supomos que o formato da banda de condução é irrelevante.

Através da estrutura de $\mathcal{H}_{\text{imp-banho}}$, nota-se que no modelo de Anderson tradicional o termo de hibridização independe do número de ocupação do nível localizado. Efeitos decorrentes deste, os quais são denominados correlações, são contabilizados somente no Hamiltoniano isolado do subsistema da impureza, por meio do termo proporcional a U , o qual diferencia os casos de ocupação única e dupla.

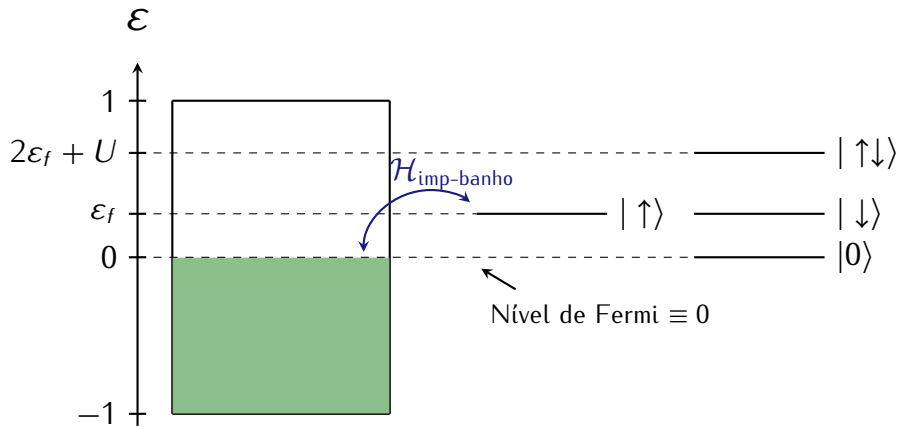


Figura 2.1 – Representação esquemática do modelo de Anderson de uma impureza no contexto de um banho fermiônico descrito por uma banda de condução semipreenchida no intervalo $[-1, 1]$, em unidades de D , que interage com um nível localizado via troca de partículas. Este pode estar vazio com energia zero, unicamente ocupado com energia ε_f ou duplamente ocupado com energia $2\varepsilon_f + U$. Quando $2\varepsilon_f + U = 0$, os estados vazio e duplamente ocupado são degenerados e o Hamiltoniano dado pelas Eqs.(2.2) é invariante sob as transformações $f_\sigma \leftrightarrow -f_\sigma^\dagger$ e $c_{k\sigma} \leftrightarrow c_{-k,\sigma}^\dagger$, caso em que o modelo é dito simétrico.

2.2 Hibridização correlacionada

Intuitivamente, não é de se esperar que seja energeticamente indiferente o processo de criação de um elétron no nível da impureza se este está vazio ou unicamente ocupado; ou ainda, a criação no banho se o nível localizado está única ou duplamente ocupado – assumimos a conservação do número de partículas. Assim, na tentativa de deixar o modelo apto a descrever situações cada vez mais realistas, vamos analisar a influência de um termo de hibridização que depende explicitamente do número de ocupação do nível localizado^{12,13}:

$$\mathcal{H}_W = - \sum_{k\sigma} W_k f_{-\sigma}^\dagger f_{-\sigma} (c_{k\sigma}^\dagger f_\sigma + f_\sigma^\dagger c_{k\sigma}), \quad (2.3)$$

o qual denominamos hibridização correlacionada.

Com a adição de \mathcal{H}_W , o número de partículas do nível localizado não é mais indiferente do ponto de vista da hibridização; fica evidente, pela estrutura da Eq.(2.3), que após (naturalmente poderia ser antes, é indiferente) a troca de partículas, o operador número $f_{-\sigma}^\dagger f_{-\sigma}$ distingue os casos de única e dupla ocupação, computando no segundo uma unidade de energia $-W_k$. Na Fig.2.2 representamos esquematicamente essa diferença.

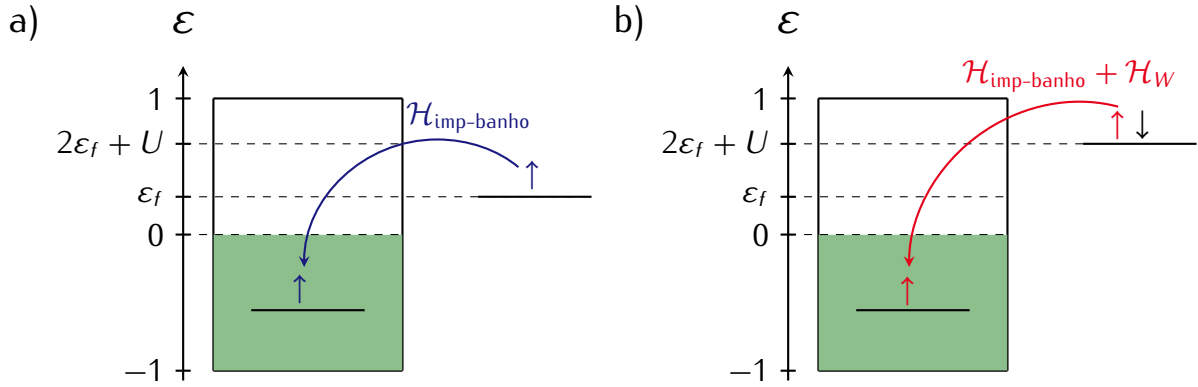


Figura 2.2 – Representação esquemática de dois possíveis casos de híbridização, nos quais uma partícula com *spin up* sai do nível da impureza em direção ao banho. Obviamente, o processo no sentido inverso, e ainda os casos de *spin down*, são análogos. (a) Ocupação única do nível da impureza: somente o termo tradicional, proporcional a V_k , contribui para a híbridização, pois a aplicação do operador $f_{\downarrow}^{\dagger}f_{\downarrow}$, após $c_{k\uparrow}^{\dagger}f_{\uparrow}$, anula o de híbridização correlacionada. (b) Dupla ocupação do nível da impureza: além do termo usual, proveniente da atuação do operador $V_k c_{k\uparrow}^{\dagger}f_{\uparrow}$, há ainda a parte adicional devido à dupla ocupação do nível da impureza, pois neste caso o operador $-W_k f_{\downarrow}^{\dagger}f_{\downarrow}c_{k\uparrow}^{\dagger}f_{\uparrow}$ contribui, resultando em uma híbridização $V_k - W_k$. Em suma, \mathcal{H}_W apresenta contribuição não nula quando o nível da impureza está duplamente ocupado no início ou no fim do processo de troca de partículas.

O novo termo de interação é dado por:

$$\mathcal{H}'_{\text{imp-banho}} = \sum_{k\sigma} \left(V_k - W_k f_{-\sigma}^{\dagger} f_{-\sigma} \right) \left(c_{k\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + f_{\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \right). \quad (2.4)$$

Na prática, trabalharemos com híbridização independente de k : $V_k = V$ e $W_k = W$, e nosso grande objetivo será analisar o comportamento de algumas propriedades termodinâmicas do modelo de Anderson de uma impureza com a adição do termo de híbridização correlacionada. Através da técnica do Grupo de Renormalização Numérico (GNR), introduzida⁷ em meados da década de 1970, é possível diagonalizá-lo numericamente e estudar diversas propriedades físicas. O GRN estabelece uma transformação no Hamiltoniano que a cada passo acrescenta uma escala de energia ao problema e constrói um método iterativo no qual um Hamiltoniano é diagonalizado numericamente a cada iteração. Quanto ao modelo com a adição do termo de híbridização correlacionada, diferentemente de outros estudos realizados à temperatura zero¹³, que utilizavam um esquema interpolativo em que funções de Green[§] eram desacopladas, levando a uma aproximação de campo médio, com o

[§]nome em homenagem ao inglês George Green (1793-1841)

GRN pretendemos determinar a influência do termo adicional diretamente em propriedades termodinâmicas desde o topo da banda até o limite de baixas energias.

CAPÍTULO 3

GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO NUMÉRICO

Em geral, a técnica do Grupo de Renormalização Numérico (GRN) pode ser aplicada a sistemas compostos por uma impureza quântica de poucos graus de liberdade, de modo que é possível diagonalizar exatamente seu Hamiltoniano isolado, acoplada a um banho de férmions⁷ ou bósons^{14,15}, associado usualmente a um espectro contínuo de excitação. É importante salientar que na sentença anterior a expressão “uma impureza” é utilizada de forma completamente genérica. Não se trata necessariamente de um nível localizado e tampouco há restrição para a estrutura do Hamiltoniano referente a ela; pode apresentar, por exemplo, uma repulsão coulombiana arbitrariamente grande. Contudo, para aplicação do GRN é imprescindível que o banho seja constituído por partículas não interagentes.

Genericamente, considera-se que a impureza é um objeto adimensional (um nível de energia por exemplo), enquanto que o banho pode ter uma, duas ou três dimensões. No modelo de Anderson, caracterizado por uma impureza magnética em uma banda de condução, se trabalha normalmente com uma banda tridimensional. Entretanto, como o objetivo é o estudo das propriedades da impureza não é necessário tratar o modelo em sua real dimensão, desde que as partículas do banho não interajam entre si – além disso, considera-se apenas o acoplamento de funções de onda $1s$ do banho com a impureza⁷. Neste caso, toda a informação sobre o meio, do ponto de vista da impureza, pode ser encapsulada em uma função de apenas uma variável, $\Delta(\omega)$, denominada função hibridização do banho. Esta representação é o ponto de partida do formalismo¹⁶ que apresentaremos nas páginas

seguintes.

Antes de expor os detalhes mais técnicos e visando deixar o mais claro possível a estratégia do GRN e nossos objetivos, enumeramos sucintamente os quatro primeiros passos básicos de praticamente todas as aplicações da técnica, os quais estão representados esquematicamente na Fig.3.1:

- a) Divisão do domínio da função hibridização do banho em um conjunto logarítmico de intervalos (discretização logarítmica).
- b) Redução dos espectros contínuos internos a cada um dos intervalos em um conjunto discreto de estados.
- c) Mapeamento do modelo discretizado em uma cadeia semi-infinita.
- d) Diagonalização iterativa desta cadeia.

Mesmo com a ausência de detalhes e a enumeração um tanto quanto vaga dos procedimentos, salta aos olhos a aparente extravagância da discretização, por ela ser logarítmica. Por isso é importante frisar que quando existe a intenção de aplicar o GRN, a primeira análise que deve ser feita é a das ordens de grandeza envolvidas no problema. No caso do modelo de Anderson, a grande maioria dos metais apresenta largura de banda entre 5 e 10 eV. Todavia, é de interesse praticamente universal o estudo de propriedades termodinâmicas a temperaturas de no máximo uma ordem de grandeza maior que a temperatura ambiente, ou seja, da ordem de 10^{-3} eV, de modo que as excitações de interesse estão bastante próximas do nível de Fermi - definido como o zero de energia. E é justamente nessa região que a discretização deve reproduzir da melhor forma possível o contínuo de energias do banho. Com esta reflexão em mente, esperamos que a ideia e a conveniência da discretização logarítmica fiquem nítidas ao longo de nossa exposição.

3.1 Representação integral

Antes de partirmos para a discretização da banda de condução vamos reescrever o Hamiltoniano em uma forma integral, a qual é um ponto de partida bastante útil para a discretização logarítmica. Primeiramente, com o espírito da regra de ouro de Fermi, é

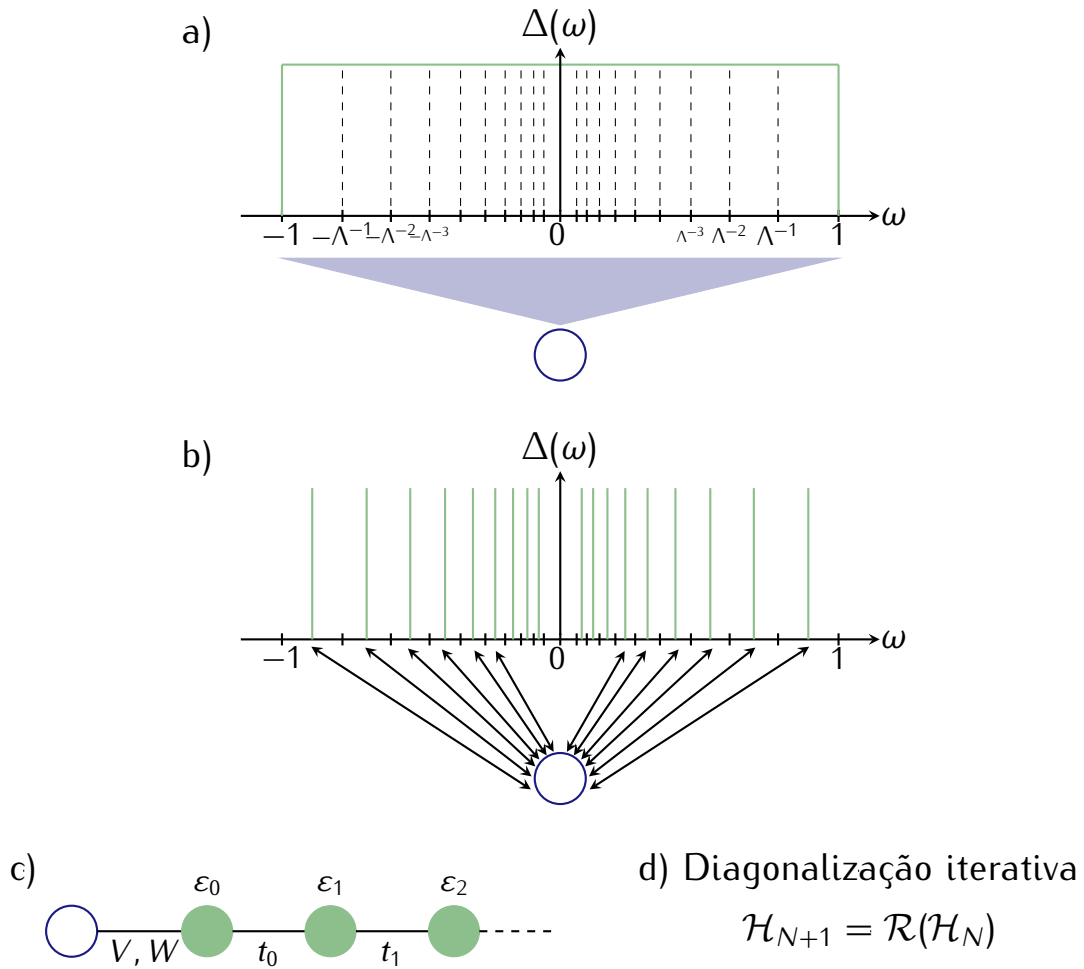


Figura 3.1 – Passos iniciais do método do GRN ilustrados para o modelo de Anderson de uma impureza, no qual a impureza (anel circular) se acopla a uma banda de condução contínua via função hibridização $\Delta(\omega)$ constante. (a) Conjunto logarítmico de intervalos introduzido pelo parâmetro de discretização $\Lambda > 1$. (b) O espectro contínuo interno a cada um destes intervalos é aproximado por um único estado. (c) O modelo discretizado é mapeado em uma cadeia semi-infinita (no sentido de apresentar uma condição de contorno mesmo sendo infinita) na qual a impureza se acopla somente ao primeiro sítio referente aos elétrons de condução, via as hibridizações V e W . (d) Construção de um processo de diagonalização iterativa da cadeia que pode ser entendido como uma transformação \mathcal{R} do grupo de renormalização.

definida de forma *ad-hoc*, a função hibridização do banho, $\Delta(\omega)$:

$$\Delta(\omega) \equiv \pi \sum_k |V_k|^2 \delta(\omega - \epsilon_k), \quad (3.1)$$

em que W_k não aparece explicitamente pois supomos que pode ser parametrizado por V_k , digamos $W_k = wV_k$, com w independente de k .

Pela estrutura da função hibridização nota-se que são consideradas somente interações

ressonantes com o banho. Na troca de partículas o nível da impureza interage com um determinado modo k . Supomos também que $\Delta(\omega)$ é limitada ao intervalo $[-1, 1]$, ou seja, que o domínio de $\Delta(\omega)$ é o mesmo da banda de condução apresentada nas Figs.2.1 e 2.2.

Uma possível reformulação do Hamiltoniano de Anderson, em que trabalhamos com o banho explicitamente no contínuo, é dada por

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{imp}} + \sum_{\sigma} \int_{-1}^1 d\varepsilon g(\varepsilon) a_{\varepsilon\sigma}^{\dagger} a_{\varepsilon\sigma} + \sum_{\sigma} \int_{-1}^1 d\varepsilon [h(\varepsilon) - h_c(\varepsilon) f_{-\sigma}^{\dagger} f_{-\sigma}] (f_{\sigma}^{\dagger} a_{\varepsilon\sigma} + a_{\varepsilon\sigma}^{\dagger} f_{\sigma}), \quad (3.2)$$

na qual introduzimos uma representação unidimensional, limitada nos pontos ± 1 , uma dispersão $g(\varepsilon)$ e as hidridizações $h(\varepsilon)$ e $h_c(\varepsilon)$, relativas a V_k e W_k , respectivamente. Observamos que quando ε representa de fato a energia, temos $g(\varepsilon) = \varepsilon$. Ademais, em conformidade à Eq.(3.1), supomos $h_c(\varepsilon) = wh(\varepsilon)$, em que o parâmetro w , independente de ε , quantifica a razão entre as contribuições provindas das hibridizações correlacionada e tradicional. Desta forma,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{imp}} + \sum_{\sigma} \int_{-1}^1 d\varepsilon g(\varepsilon) a_{\varepsilon\sigma}^{\dagger} a_{\varepsilon\sigma} + \sum_{\sigma} \int_{-1}^1 d\varepsilon h(\varepsilon) (1 - wf_{-\sigma}^{\dagger} f_{-\sigma}) (f_{\sigma}^{\dagger} a_{\varepsilon\sigma} + a_{\varepsilon\sigma}^{\dagger} f_{\sigma}). \quad (3.3)$$

Naturalmente, os operadores da banda de condução satisfazem a usual relação de anticomutação fermiônica:

$$\{a_{\varepsilon\sigma}, a_{\varepsilon'\sigma'}^{\dagger}\} = \delta(\varepsilon - \varepsilon') \delta_{\sigma\sigma'}, \quad (3.4)$$

em que $\{A, B\} \equiv AB + BA$.

As funções $g(\varepsilon)$ e $h(\varepsilon)$ estão relacionadas com a função hibridização do banho $\Delta(\omega)$ através de¹⁷

$$\Delta(\omega) = \pi \frac{d\varepsilon(\omega)}{d\omega} h[\varepsilon(\omega)]^2, \quad (3.5)$$

em que $\varepsilon(\omega)$ é a função inversa de $g(\varepsilon)$, $g[\varepsilon(\omega)] = \omega$.

A apresentação da Eq.(3.5) representa nosso esforço de tentar entender e desenvolver, ao menos inicialmente, a técnica da forma mais geral possível. Apesar do presente trabalho apresentar resultados numéricos para um caso específico, acreditamos que tal abordagem¹⁶ seja pertinente. Mesmo se não aplicada completamente na dissertação, é útil para o tratamento de variações do modelo existentes na literatura, como o de Anderson de gap suave (do inglês *Soft-gap Anderson Model*^{17,18}), ou ainda de outros Hamiltonianos^{15,19}.

Agora, ainda em linhas gerais, o próximo passo é a discretização do Hamiltoniano em sua forma integral, dada pela Eq.(3.3).

3.2 Discretização logarítmica

Como trata-se de uma técnica numérica, uma discretização é inerente ao GRN, o que se apresenta como a primeira e talvez a mais relevante sutileza do método. Diferentemente das tradicionais discretizações lineares, o americano Kenneth G. Wilson (1936-), que trabalhava no contexto de um banho fermiônico, propôs⁷ uma logarítmica e simétrica com relação ao nível de Fermi. Ela pode ser ajustada de forma a reproduzir satisfatoriamente o contínuo de energias nas proximidades deste. Tais regiões, conforme afirmamos anteriormente para o caso de um banho metálico, eram as de interesse. Além disso, a proposição considera poucos estados com energia da ordem da largura de banda, economizando tempo e infra-estrutura computacional, a qual, se comparada à atual, era bastante precária na época, contrariamente à criatividade de Wilson.

A discretização é definida por um parâmetro Λ , maior que a unidade. Na Fig.3.2 a apresentamos, assumindo que ela é simétrica com relação ao zero de energia. Claramente, o contínuo é recuperado no limite $\Lambda \rightarrow 1$.

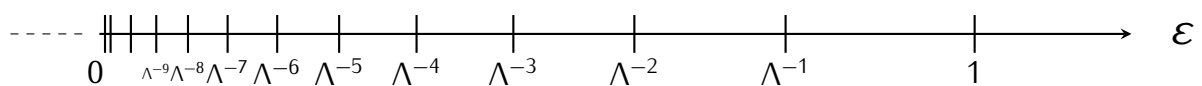


Figura 3.2 – Discretização logarítmica do domínio da função de hibridização do banho por meio do parâmetro $\Lambda > 1$. Apesar de mostrarmos somente a região $\epsilon > 0$, a discretização é simétrica com relação a $\epsilon = 0$. Em metais considera-se que a banda de condução é semipreenchida e simétrica ao nível de Fermi ϵ_F , definido como o zero de energia, $\epsilon_F \equiv 0$.

Em um banho fermiônico, sobre o qual foi escrito o trabalho pioneiro^{9,10}, definindo o nível de Fermi como o zero de energia, a Fig.3.2 deixa mais clara e visual a sagacidade da discretização logarítmica, em que o nível de Fermi torna-se um ponto de acumulação. Ela pode descrever bem o contínuo da banda de condução nos arredores da região de interesse, sem, no entanto, ao contrário da discretização linear, onerar computacionalmente a técnica nas partes do espectro com energias da ordem da largura de banda ($\epsilon \approx \pm 1$), devido à

baixa densidade de intervalos de discretização nessa região.

É evidente, à luz da Fig.3.2, que o parâmetro $\Lambda > 1$ define uma porção de intervalos com pontos de discretização

$$x_n = \pm\Lambda^{-n} \quad , \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad , \quad (3.6)$$

em que a largura do n -ésimo é fornecida por

$$d_n = \Lambda^{-n}(1 - \Lambda^{-1}) \quad . \quad (3.7)$$

Dentro de cada um deles introduzimos um conjunto completo de funções ortonormais, cada uma sendo componente de uma expansão de Fourier[§] no intervalo. Para o n -ésimo:

$$\psi_{np}^{\pm}(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{d_n}} e^{\pm i\omega_n p \varepsilon} & \text{se } x_{n+1} < \pm\varepsilon < x_n \\ 0 & \text{fora deste intervalo} \end{cases} \quad . \quad (3.8)$$

O índice p compreende todo o conjunto dos números inteiros, enquanto que a frequência característica do n -ésimo intervalo é $\omega_n = 2\pi/d_n$. A escolha de funções oscilatórias é a mais simples e comum, a despeito de não ser a única.

O próximo passo é expandir os operadores $a_{\varepsilon\sigma}$ dos elétrons de condução na nova base:

$$a_{\varepsilon\sigma} = \sum_{np} [a_{np\sigma} \psi_{np}^+(\varepsilon) + b_{np\sigma} \psi_{np}^-(\varepsilon)] \quad . \quad (3.9)$$

A Eq.(3.9) é fundamental, pois exprime a transição de um conjunto contínuo de operadores, $a_{\varepsilon\sigma}$, para um discreto, $a_{np\sigma}$ e $b_{np\sigma}$. A transformação de Fourier inversa fornece este:

$$a_{np\sigma} = \int_{-1}^1 d\varepsilon [\psi_{np}^+(\varepsilon)]^* a_{\varepsilon\sigma} \quad , \quad (3.10a)$$

$$b_{np\sigma} = \int_{-1}^1 d\varepsilon [\psi_{np}^-(\varepsilon)]^* a_{\varepsilon\sigma} \quad . \quad (3.10b)$$

[§]batizada em homenagem ao francês Jean-Baptiste J. Fourier (1768-1830)

Definindo $a_{np\sigma}^\dagger$ e $b_{np\sigma}^\dagger$ de forma análoga, os operadores do novo conjunto, agora discreto, satisfazem a estatística de férmions:

$$\{a_{np\sigma}, a_{n'p'\sigma'}^\dagger\} = \delta_{nn'} \delta_{pp'} \delta_{\sigma\sigma'} , \quad (3.11a)$$

$$\{b_{np\sigma}, b_{n'p'\sigma'}^\dagger\} = \delta_{nn'} \delta_{pp'} \delta_{\sigma\sigma'} . \quad (3.11b)$$

Em particular, a primeira parte do termo de hibridização transformado é dada por:

$$\int_{-1}^1 d\varepsilon h(\varepsilon) f_\sigma^\dagger a_{\varepsilon\sigma} = f_\sigma^\dagger \sum_{np} \left[a_{np\sigma} \int^{+,n} d\varepsilon h(\varepsilon) \psi_{np}^+(\varepsilon) + b_{np\sigma} \int^{-,n} d\varepsilon h(\varepsilon) \psi_{np}^-(\varepsilon) \right] , \quad (3.12)$$

em que definimos:

$$\int^{+,n} d\varepsilon \equiv \int_{x_{n+1}}^{x_n} d\varepsilon , \quad \int^{-,n} d\varepsilon \equiv \int_{-x_n}^{-x_{n+1}} d\varepsilon . \quad (3.13)$$

Notemos que se em cada um dos intervalos a hibridização é constante, por exemplo $h(\varepsilon) = h_0$, somente os termos com $p = 0$ contribuem na Eq.(3.12):

$$\int^{\pm,n} d\varepsilon h_0 \psi_{np}^\pm(\varepsilon) = \frac{h_0}{\sqrt{d_n}} \int^{\pm,n} d\varepsilon e^{\pm i\omega_n p \varepsilon} = h_0 \sqrt{d_n} \delta_{p,0} . \quad (3.14)$$

Portanto, neste caso a impureza se acopla somente às componentes com $p = 0$ da banda de condução. Poderíamos tomar $h(\varepsilon) = h_0$ constante para toda a banda²⁰; no entanto, buscando o máximo de generalidade possível, para uma eventual aproximação em casos de funções hibridização mais complexas, introduziremos de forma mais genérica, uma função degrau¹⁷, constante em cada intervalo:

$$h(\varepsilon) = h_n^\pm , \quad x_{n+1} < \pm\varepsilon < x_n , \quad (3.15)$$

em que h_n^\pm é fornecido pela raiz quadrada da média da função hibridização $\Delta(\varepsilon)$ no respectivo intervalo:

$$h_n^{\pm 2} = \frac{1}{d_n} \int^{\pm,n} d\varepsilon \frac{1}{\pi} \Delta(\varepsilon) . \quad (3.16)$$

Desse modo, a primeira parte do termo de hibridização apresenta o seguinte formato:

$$\int_{-1}^1 d\varepsilon h(\varepsilon) f_{\sigma}^{\dagger} a_{\varepsilon\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} f_{\sigma}^{\dagger} \sum_n (\gamma_n^+ a_{n0\sigma} + \gamma_n^- b_{n0\sigma}) , \quad (3.17)$$

em que $\gamma_n^{\pm 2} = \int^{\pm, n} d\varepsilon \Delta(\varepsilon)$. Naturalmente, o termo hermitiano conjugado é análogo.

É importante destacar que a tentativa de generalização dada pela introdução da função degrau, por ela ser constante em cada intervalo, não afeta o fato de a impureza se acoplar de forma direta somente com estados com $p = 0$, característica essencial do trabalho de Krishna-murthy et al⁹, no qual $h(\varepsilon) = h_0$ constante sobre todo o domínio.

Similarmente, a transformação do termo referente a $\mathcal{H}_{\text{banho}}$ é dada por

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 d\varepsilon g(\varepsilon) a_{\varepsilon\sigma}^{\dagger} a_{\varepsilon\sigma} &= \sum_{np} (\xi_n^+ a_{np\sigma}^{\dagger} a_{np\sigma} + \xi_n^- b_{np\sigma}^{\dagger} b_{np\sigma}) \\ &+ \sum_{n, p \neq p'} [\alpha_n^+(p, p') a_{np\sigma}^{\dagger} a_{np'\sigma} + \alpha_n^-(p, p') b_{np\sigma}^{\dagger} b_{np'\sigma}] . \end{aligned} \quad (3.18)$$

Para o caso de dispersão linear, $g(\varepsilon) = \varepsilon$, que será o de interesse desta dissertação, os fatores $\alpha_n^{\pm}(p, p')$ são os mesmos, tanto para ε positivo quanto negativo:

$$\alpha_n^{\pm}(p, p') = \frac{1 - \Lambda^{-1}}{2\pi i} \frac{\Lambda^{-n}}{p' - p} \exp\left(\frac{2\pi i(p' - p)}{1 - \Lambda^{-1}}\right) . \quad (3.19)$$

Por sua vez, cada coeficiente ξ_n^{\pm} pode ser expresso como a média de ε sobre a distribuição $\Delta(\varepsilon)$ no n -ésimo intervalo:

$$\xi_n^{\pm} = \frac{\int^{\pm, n} d\varepsilon \Delta(\varepsilon) \varepsilon}{\int^{\pm, n} d\varepsilon \Delta(\varepsilon)} . \quad (3.20)$$

Se a função hibridização é uma constante, $\Delta(\varepsilon) = \Delta_0$, temos:

$$\xi_n^{\pm} = \frac{1}{2} \Lambda^{-n} (1 + \Lambda^{-1}) . \quad (3.21)$$

As Eqs.(3.19) e (3.21) são idênticas às utilizadas por Krishna-Murthy et al⁹, e serão adotadas futuramente nesta dissertação para obtenção de nossos resultados numéricos.

Em todos os passos da expansão, com a exceção da suposição de que $h(\varepsilon)$ tem a forma dada pela Eq.(3.15), não é feita nenhuma aproximação, de forma que as Eqs.(3.17) e (3.18) são exatas. Contudo, com a intenção de simplificar a expressão referente ao banho, desprezamos nela todos os termos com $p \neq 0$. Esta aproximação foi essencial na construção argumentativa de K. G. Wilson^{7,9}, e pode ser utilizada mesmo para $\Delta(\omega)$ não constante. Em princípio, sua eficácia não é absolutamente clara, malgrado haver duas motivações. A primeira é o fato de que os estados do banho com $p \neq 0$ se acoplam com a impureza somente de forma indireta, através de sua junção com os estados com $p = 0$, via o segundo termo do lado direito da Eq.(3.18). Outra possível justificativa é a de que a interação entre os estados com $p = 0$ e $p \neq 0$ apresenta o fator multiplicativo $(1-\Lambda^{-1})$, vide Eq.(3.19), o qual vai a zero no limite do contínuo ($\Lambda \rightarrow 1$). Apesar de parecer um tanto quanto obscuro e de qualidade questionável, a prática tem mostrado que os resultados obtidos somente com os estados do banho com $p = 0$ são bastante satisfatórios, mesmo para valores do parâmetro de discretização razoavelmente maiores que a unidade, de modo que em praticamente todos os cálculos envolvendo o GRN os estados com $p \neq 0$ não são considerados.

Finalmente, após descartar os termos com $p \neq 0$ e rebatizar os operadores $a_{n\sigma} \equiv a_{n0\sigma}$ e $b_{n\sigma} \equiv b_{n0\sigma}$, obtemos o Hamiltoniano discretizado:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \mathcal{H}_{\text{imp}} + \sum_{n\sigma} (\xi_n^+ a_{n\sigma}^\dagger a_{n\sigma} + \xi_n^- b_{n\sigma}^\dagger b_{n\sigma}) \\ & + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{\sigma} (1 - wf_{-\sigma}^\dagger f_{-\sigma}) f_{\sigma}^\dagger \sum_n (\gamma_n^+ a_{n\sigma} + \gamma_n^- b_{n\sigma}) \\ & + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{\sigma} (1 - wf_{-\sigma}^\dagger f_{-\sigma}) \sum_n (\gamma_n^+ a_{n\sigma}^\dagger + \gamma_n^- b_{n\sigma}^\dagger) f_{\sigma}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

3.3 Mapeamento em uma cadeia semi-infinita

O objetivo do formalismo é, através de transformações convenientes, reescrever o Hamiltoniano original em uma forma iterativa. O passo seguinte é mapear o modelo discretizado, dado pela Eq.(3.22), em um Hamiltoniano que apresenta o formato de uma cadeia unidimensional semi-infinita, cujo primeiro sítio condensa os graus de liberdade de impu-

reza, representado na Fig.3.1(c) pelo anel circular. Primeiramente, através da definição

$$c_{0\sigma} \equiv \frac{1}{\sqrt{\xi_0}} \sum_n (\gamma_n^+ a_{n\sigma} + \gamma_n^- b_{n\sigma}), \quad (3.23)$$

em que a constante de normalização é dada por

$$\xi_0 = \sum_n [(\gamma_n^+)^2 + (\gamma_n^-)^2] = \int_{-1}^1 d\varepsilon \Delta(\varepsilon); \quad (3.24)$$

a primeira parte do termo de hibridização é escrita de forma bem mais compacta:

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} f_\sigma^\dagger \sum_n (\gamma_n^+ a_{n\sigma} + \gamma_n^- b_{n\sigma}) = \sqrt{\frac{\xi_0}{\pi}} f_\sigma^\dagger c_{0\sigma}; \quad (3.25)$$

similarmente para o termo hermitiano conjugado. Notemos que para hibridização independente de k , isto é, $V_k = V$ e $W_k = W$, o parâmetro de acoplamento ξ_0 é uma constante.

Os operadores $c_{0\sigma}^{(\dagger)}$ (uma notação condensada para mencionar tanto $c_{0\sigma}$, quanto $c_{0\sigma}^\dagger$) atuam no primeiro sítio da parte concernente aos elétrons de condução na cadeia semi-infinita, o qual é esquematicamente representado na Fig.3.1(c) pelo primeiro sítio ligado ao anel circular por V e W . Eles são claramente não ortogonais a $a_{n\sigma}^{(\dagger)}$ e $b_{n\sigma}^{(\dagger)}$. Construindo um novo conjunto de operadores mutualmente ortogonais, $c_{n\sigma}^{(\dagger)}$, a partir de $c_{0\sigma}^{(\dagger)}$, $a_{n\sigma}^{(\dagger)}$ e $b_{n\sigma}^{(\dagger)}$, através de um processo usual de tridiagonalização^{9,16}, obtemos o seguinte Hamiltoniano, o qual, por ter operadores com subíndices n e $n + 1$, já exhibe um formato que insinua um esquema iterativo:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \mathcal{H}_{\text{imp}} + \sqrt{\frac{\xi_0}{\pi}} \sum_\sigma (1 - w f_{-\sigma}^\dagger f_{-\sigma}) (f_\sigma^\dagger c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^\dagger f_\sigma) \\ & + \sum_{\sigma, n=0}^{\infty} \left[\varepsilon_n c_{n\sigma}^\dagger c_{n\sigma} + t_n \left(c_{n\sigma}^\dagger c_{(n+1)\sigma} + c_{(n+1)\sigma}^\dagger c_{n\sigma} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Na Fig.3.3, similarmente à Fig.3.1(c), representamos esquematicamente o mapeamento dado pela Eq.(3.26). Os operadores $c_{n\sigma}^{(\dagger)}$ correspondem ao $(n + 1)$ -ésimo sítio na cadeia da parte referente aos elétrons de condução - círculos preenchidos das Figs.3.1(c) e 3.3. Os parâmetros do Hamiltoniano na forma tridiagonal, análogos aos de um modelo *tight-binding*, são as energias locais ε_n de cada sítio e os elementos de matriz t_n , sendo que

estes quantificam o acoplamento entre os sítios vizinhos referentes à banda de condução.

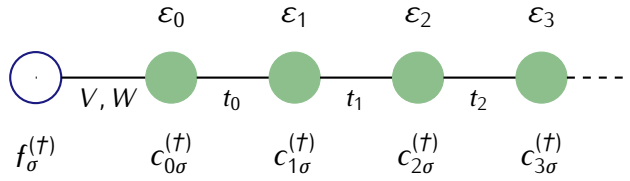


Figura 3.3 – Representação esquemática do mapeamento do modelo original em um formato de cadeia semi-infinita, dado pela Eq.(3.26). O anel circular, sobre o qual atuam os operadores $f_{0\sigma}^{(\dagger)}$, condensa os graus de liberdade da impureza. Por sua vez, a contribuição do banho é representada por círculos preenchidos, sobre os quais atuam os operadores $c_{n\sigma}^{(\dagger)}$. Somente o sítio da cadeia com $n = 0$ se liga diretamente à impureza, via V e W . A contribuição dos outros graus de liberdade do banho se dá pela interação entre os sítios referentes a ele. Os parâmetros do Hamiltoniano na forma tridiagonal, análogos aos de um modelo *tight-binding*, são as energias locais ϵ_n de cada sítio e os elementos de matriz t_n , sendo que estes quantificam a força da interação entre os sítios vizinhos relativos à banda de condução.

Claramente, no Hamiltoniano mapeado no formato de cadeia semi-infinita a impureza se acopla de forma direta a apenas um grau de liberdade da banda de condução, com $c_{0\sigma}^{(\dagger)}$. Os operadores $c_{n\sigma}^{(\dagger)}$ estão relacionados com $a_{n\sigma}^{(\dagger)}$ e $b_{n\sigma}^{(\dagger)}$ através de uma transformação ortogonal:

$$a_{n\sigma} = \sum_{m=0}^{\infty} u_{mn} c_{m\sigma} , \quad (3.27a)$$

$$b_{n\sigma} = \sum_{m=0}^{\infty} v_{mn} c_{m\sigma} , \quad (3.27b)$$

$$c_{n\sigma} = \sum_{m=0}^{\infty} (u_{nm} a_{m\sigma} + v_{nm} b_{m\sigma}) . \quad (3.27c)$$

Impondo a consistência das expressões acima com a definição de $c_{0\sigma}$, dada pela Eq.(3.23), notamos que os coeficientes iniciais das expansões são necessariamente dados por

$$u_{0m} = \frac{\gamma_m^+}{\sqrt{\xi_0}} \quad \text{e} \quad v_{0m} = \frac{\gamma_m^-}{\sqrt{\xi_0}} . \quad (3.28)$$

Para os coeficientes u_{nm} e v_{nm} restantes, assim como para os parâmetros ϵ_n e t_n , é possível obter relações recursivas, cujo ponto de partida¹⁵ é a imposição de equivalência

das partes referentes à banda de condução livre nas Eqs.(3.22) e (3.26):

$$\sum_{np} (\xi_n^+ a_{np\sigma}^\dagger a_{np\sigma} + \xi_n^- b_{np\sigma}^\dagger b_{np\sigma}) = \sum_{\sigma, n=0}^{\infty} \left[\varepsilon_n c_{n\sigma}^\dagger c_{n\sigma} + t_n \left(c_{n\sigma}^\dagger c_{(n+1)\sigma} + c_{(n+1)\sigma}^\dagger c_{n\sigma} \right) \right]. \quad (3.29)$$

As relações recursivas¹⁶ são inicializadas por:

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{\xi_0} \int_{-1}^1 d\varepsilon \Delta(\varepsilon) \varepsilon, \quad (3.30a)$$

$$t_0^2 = \frac{1}{\xi_0} \sum_m \left[(\xi_m^+ - \varepsilon_0)^2 (\gamma_m^+)^2 + (\xi_m^- - \varepsilon_0)^2 (\gamma_m^-)^2 \right], \quad (3.30b)$$

$$u_{1m} = \frac{1}{t_0} (\xi_m^+ - \varepsilon_0) u_{0m}, \quad (3.30c)$$

$$v_{1m} = \frac{1}{t_0} (\xi_m^- - \varepsilon_0) v_{0m}. \quad (3.30d)$$

Para $n \geq 1$ temos:

$$\varepsilon_n = \sum_m (\xi_m^+ u_{nm}^2 + \xi_m^- v_{nm}^2), \quad (3.31a)$$

$$t_n^2 = \sum_m \left[(\xi_m^+)^2 u_{nm}^2 + (\xi_m^-)^2 v_{nm}^2 \right] - t_{n-1}^2 - \varepsilon_n^2, \quad (3.31b)$$

$$u_{n+1,m} = \frac{1}{t_n} \left[(\xi_m^+ - \varepsilon_n) u_{nm} - t_{n-1} u_{n-1,m} \right], \quad (3.31c)$$

$$v_{n+1,m} = \frac{1}{t_n} \left[(\xi_m^- - \varepsilon_n) v_{nm} - t_{n-1} v_{n-1,m} \right]. \quad (3.31d)$$

Naturalmente, para um função hibridização $\Delta(\omega)$ genérica, as relações recursivas devem ser resolvidas numericamente. Todavia, há alguns casos especiais em que é possível obter expressões analíticas. K. G. Wilson obteve uma expressão para t_n considerando que a densidade de estados do banho é constante^{7,9}, o que é equivalente, em nosso contexto, a função hibridização $\Delta(\omega)$ constante sobre todo seu domínio – que será a situação de interesse do trabalho. Neste caso, $\varepsilon_n = 0$ para todo n e o elemento de matriz t_n é dado

por:

$$t_n = \frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1})\Lambda^{-n/2}\zeta_n, \quad (3.32)$$

em que:

$$\zeta_n = (1 - \Lambda^{-n-1})(1 - \Lambda^{-2n-1})^{-1/2}(1 - \Lambda^{-2n-3})^{-1/2}. \quad (3.33)$$

Notemos que como $\zeta_n \rightarrow 1$ para $n \rightarrow \infty$, o elemento de matriz t_n se reduz nesse limite a

$$t_n \rightarrow \frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1})\Lambda^{-n/2}. \quad (3.34)$$

O decréscimo exponencial de t_n com n é essencial para o sucesso da técnica, pois significa que ao passo que o valor de n aumenta, o acoplamento entre o sítio adicional e a cadeia é cada vez menor; o que é vital no processo iterativo porque computacionalmente n é sempre finito, e a dependência $t_n \propto \Lambda^{-n/2}$ sugere que o procedimento seja interrompido em determinado ponto sem lesar a precisão dos resultados. É justamente nesta constatação que a argúcia da proposição de discretizar o banho de forma logarítmica fica matematicamente cristalina.

Resumidamente, a Eq.(3.26) é uma representação unidimensional do modelo de Anderson de uma impureza com a característica especial de que os elementos de matriz t_n decaem exponencialmente com n . No entanto, é importante lembrar que tal representação, inobstante bem sucedida, conforme será verificado em seções posteriores, não é exata, pois desprezamos os termos com $p \neq 0$. Constatemos também que a dimensionalidade do Hamiltoniano mapeado em formato de cadeia nada tem a ver com a do modelo original, que descreve, por exemplo, uma impureza em um hospedeiro tridimensional. Todavia, segundo o trabalho de Krishna-murthy et al⁹, os sítios da cadeia referentes aos elétrons de condução tem significado físico no modelo original quando interpretados como uma sequência de cascas ao redor da impureza. O primeiro sítio relativo à parte de condução (com operadores $c_{0\sigma}^{(\dagger)}$) corresponde a uma casca cuja função de onda interfere diretamente com a função de onda da impureza. Da mesma forma, interfere com a função de onda de outra casca mais longe da impureza (em nosso contexto via o acoplamento t_n) e assim por diante.

3.4 Diagonalização iterativa

As transformações descritas até agora foram necessárias para que pudéssemos mapear o Hamiltoniano de Anderson em uma forma [cadeia semi-infinita, Eq.(3.26)] na qual um procedimento iterativo do grupo de renormalização pudesse ser definido. Por fim, o caráter iterativo da técnica aparecerá explicitamente.

Notemos que o Hamiltoniano dado pela Eq.(3.26) pode ser visto como uma série de Hamiltonianos \mathcal{H}_N :

$$\mathcal{H}_N = \Lambda^{(N-1)/2} \left[\mathcal{H}_{\text{imp}} + \sqrt{\frac{\xi_0}{\pi}} \sum_{\sigma} \left(1 - w f_{-\sigma}^{\dagger} f_{-\sigma} \right) \left(f_{\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} \right) + \sum_{\sigma, n=0}^N \varepsilon_n c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n\sigma} + \sum_{\sigma, n=0}^{N-1} t_n \left(c_{n\sigma}^{\dagger} c_{(n+1)\sigma} + c_{(n+1)\sigma}^{\dagger} c_{n\sigma} \right) \right], \quad (3.35)$$

com $N = 0, 1, 2, \dots$, que se aproxima de \mathcal{H} no limite $N \rightarrow \infty$:

$$\mathcal{H} = \lim_{N \rightarrow \infty} \Lambda^{-(N-1)/2} \mathcal{H}_N. \quad (3.36)$$

O fator de escala $\Lambda^{(N-1)/2}$ foi introduzido convenientemente na expressão de \mathcal{H}_N visando cancelar a dependência com N de t_{N-1} , o elemento de matriz que acopla os últimos dois sítios da cadeia descrita por \mathcal{H}_N .

É simples perceber que dois elementos sucessivos são relacionados por

$$\mathcal{H}_{N+1} = \Lambda^{1/2} \mathcal{H}_N + \Lambda^{N/2} \sum_{\sigma} \left[\varepsilon_{N+1} c_{(N+1)\sigma}^{\dagger} c_{(N+1)\sigma} + t_N \left(c_{N\sigma}^{\dagger} c_{(N+1)\sigma} + c_{(N+1)\sigma}^{\dagger} c_{N\sigma} \right) \right], \quad (3.37)$$

cujo princípio é dado pelo Hamiltoniano \mathcal{H}_0 :

$$\mathcal{H}_0 = \Lambda^{-1/2} \left[\mathcal{H}_{\text{imp}} + \varepsilon_0 \sum_{\sigma} c_{0\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + \sqrt{\frac{\xi_0}{\pi}} \sum_{\sigma} \left(1 - w f_{-\sigma}^{\dagger} f_{-\sigma} \right) \left(f_{\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} \right) \right], \quad (3.38)$$

o qual pode ser diagonalizado analiticamente.

Evidenciamos que \mathcal{H}_{N+1} apresenta o formato:

$$\mathcal{H}_{N+1} = \Lambda^{1/2} \mathcal{H}_N + \mathcal{Y}_{N+1} + \mathcal{X}_{N,N+1} , \quad (3.39)$$

em que o operador \mathcal{Y}_{N+1} contém somente os graus de liberdade do sítio adicionado e $\mathcal{X}_{N,N+1}$ uma mistura destes com aqueles considerados em \mathcal{H}_N . Em geral, a estrutura deles depende do modelo, a despeito do cálculo acima. Em nosso caso a identificação por simples comparação entre as Eqs.(3.37) e (3.39) é imediata.

A relação recursiva - dada pela Eq.(3.37) - e a dependência $t_n \propto \Lambda^{-n/2}$ compõem o aspecto central do formalismo da técnica do grupo de renormalização numérico. Em termos de uma transformação \mathcal{R} do grupo de renormalização, a Eq.(3.37) pode ser entendida como

$$\mathcal{H}_{N+1} = \mathcal{R}[\mathcal{H}_N] . \quad (3.40)$$

Nossa meta é organizar um esquema iterativo de diagonalização. Supomos que para um dado N , o Hamiltoniano \mathcal{H}_N já foi diagonalizado:

$$\mathcal{H}_N |r\rangle_N = E_N(r) |r\rangle_N \quad , \quad r = 1, \dots, N_s , \quad (3.41)$$

em que $|r\rangle_N$ é o r -ésimo autoestado de \mathcal{H}_N , correspondente ao autovalor $E_N(r)$. A dimensionalidade, finita, do espaço de Hilbert[§] associado a \mathcal{H}_N é N_s . Advertimos que tal suposição se encaixa no procedimento, pois é possível diagonalizar o Hamiltoniano \mathcal{H}_0 de forma exata.

A base de estados do próximo componente da série, \mathcal{H}_{N+1} , é construída simplesmente pelo produto dos estados da que diagonaliza \mathcal{H}_N pelos de uma outra base $\{|s(N+1)\rangle\}$, referente ao novo sítio adicionado à cadeia:

$$|r; s\rangle_{N+1} = |r\rangle_N \otimes |s(N+1)\rangle . \quad (3.42)$$

Na Fig.3.4 exibimos uma representação esquemática do processo iterativo de construção da base de \mathcal{H}_{N+1} a partir da de \mathcal{H}_N .

Tendo em mãos a nova base é, em princípio, imediato construir a matriz de \mathcal{H}_{N+1} , cujos

[§]nome em homenagem ao alemão David Hilbert (1862-1943)

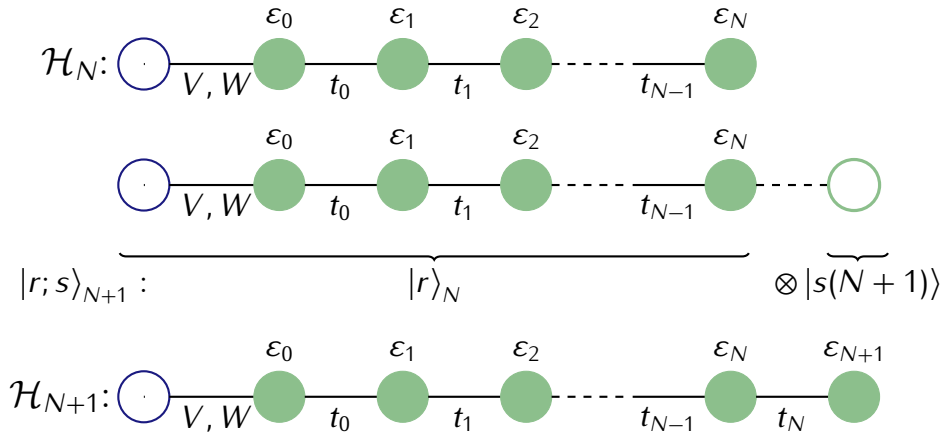


Figura 3.4 – Em cada etapa do processo de diagonalização iterativa um sítio da cadeia, com energia ϵ_{N+1} e operadores $c_{N+1}^{(\dagger)}$, é adicionado ao Hamiltoniano \mathcal{H}_N . A base $|r; s\rangle_{N+1}$ do Hamiltoniano resultante \mathcal{H}_{N+1} é formada pelo produto dos autoestados de \mathcal{H}_N , $\{|r\rangle_N\}$, com uma base $\{|s(N+1)\rangle\}$ relativa ao sítio adicionado.

elementos são dados por:

$$\mathcal{H}_{N+1}(r, s; r', s') = {}_{N+1}\langle r; s | \mathcal{H}_{N+1} | r'; s' \rangle_{N+1} . \quad (3.43)$$

Os próximos passos estão ilustrados na Fig.3.5.

Na Fig.3.5(a) mostramos ilustrativamente o espectro de energias de \mathcal{H}_N , isto é, a seqüência de níveis $E_N(r)$, em que o estado fundamental é definido como o zero de energia. Na Fig.3.5(b) aduzimos ao primeiro termo do lado direito da Eq.(3.37), expondo esquematicamente a ação do fator de escala $\Lambda^{1/2}$ sobre o espectro de \mathcal{H}_N . Por sua vez, a diagonalização da matriz cujos elementos são dados pela Eq.(3.43) fornece um novo conjunto de autovalores $E_{N+1}(w)$, os quais estão ilustrados na Fig.3.5(c), e, naturalmente, um novo conjunto de autoestados $\{|w\rangle_{N+1}\}$. Tais autoestados estão relacionados com $\{|r; s\rangle_{N+1}\}$ via uma matriz unitária \mathcal{U} :

$$|w\rangle_{N+1} = \sum_{rs} \mathcal{U}(w; r, s) |r; s\rangle_{N+1} , \quad (3.44)$$

cujos elementos são dados por $\mathcal{U}(w; r, s) = {}_{N+1}\langle r; s | \mathcal{U} | w \rangle_{N+1}$.

É manifesto que o número de estados aumenta com a adição do novo sítio. Fatalmente,

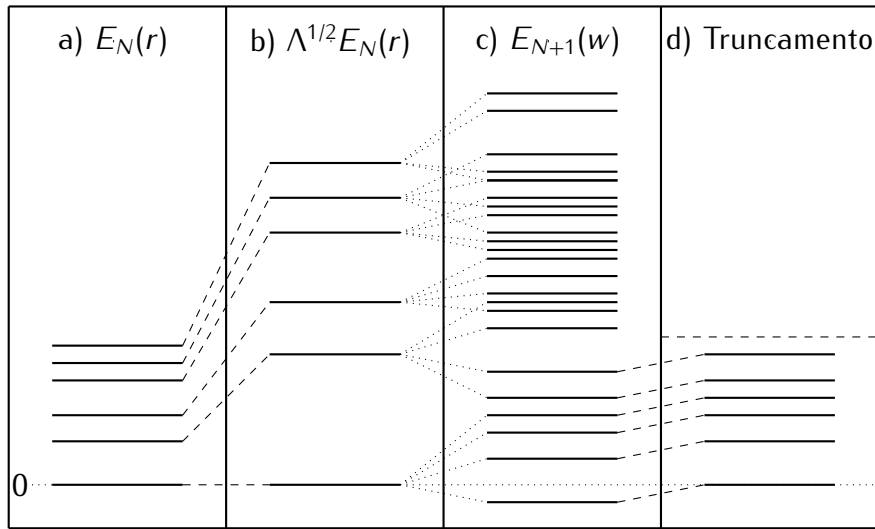


Figura 3.5 – (a) Espectro $E_N(r)$ do Hamiltoniano \mathcal{H}_N com a energia do estado fundamental definida como zero. (b) Primeiro termo do lado direito da Eq.(3.37); fator de escala $\Lambda^{1/2}$ atuando sobre o espectro de \mathcal{H}_N . (c) Espectro $E_{N+1}(w)$ de \mathcal{H}_{N+1} , calculado pela diagonalização da matriz cujos elementos são dados pela Eq.(3.43). (d) Espectro de \mathcal{H}_{N+1} após o truncamento, no qual apenas os N_s estados de menor energia foram mantidos. Como, de acordo com a Eq.(3.35), os autovalores de \mathcal{H}_{N+1} são proporcionais a $\Lambda^{(N-1)/2}$, para evitar o crescimento exponencial, a cada iteração o estado fundamental é definido como o zero de energia.

mesmo quando levamos em conta as simetrias do modelo, o que nos permite construir uma matriz blocodiagonal, o aumento da dimensão do espaço de Hilbert será um entrave para a diagonalização numérica. O obstáculo é subjulgado com um processo *ad-hoc* de truncamento, o qual está esquematizado na Fig.3.5(d). Após a diagonalização dos diversos blocos da matriz de \mathcal{H}_{N+1} , mantemos na base que será utilizada na próxima iteração somente os N_s autoestados de menor energia, ou seja, a partir do momento em que o truncamento passa a atuar, a dimensão do espaço de Hilbert permanece fixa. Naturalmente, não há garantia alguma, *a priori*, de que qualquer valor de energia de corte obtenha êxito; seu sucesso deve ser verificado em cada aplicação. Valores satisfatórios de N_s dependem do modelo considerado; para o modelo de Anderson de uma impureza experiências anteriores garantem que um valor razoável para N_s é de algumas centenas.

Um critério para a validade do procedimento é notar se a retirada dos estados de maior energia afeta o espectro de baixas energias da iteração subsequente; numericamente essa análise é perfeitamente possível variando-se o valor de N_s .

É importante salientar que devido à dependência de t_n com n , o truncamento não é

tão arbitrário quanto pôde parecer nos parágrafos precedentes. A influência dos estados de alta energia sobre os de baixa é pequena, pois a adição de um novo sítio pode ser entendida como uma perturbação proporcional a $\Lambda^{-1/2} < 1$. Este fator é irrelevante para grandes valores de Λ , mas para $\Lambda \rightarrow 1$ fica evidente que devem ser mantidos cada vez mais estados para que sejam obtidos bons resultados. Em suma, a precisão dos resultados obtidos via GRN diminui quando N_s é fixo e Λ se aproxima da unidade; por sua vez, o parâmetro de discretização não pode ser escolhido arbitrariamente maior que a unidade, pois quanto maior o valor de Λ , mais longe estaremos do limite de espectro contínuo do banho e, conseqüentemente, mais distante da situação física considerada no modelo não discretizado. O sucesso da técnica frente a essa ambivalência depende da consciência do programador na escolha de Λ e N_s e, adicionalmente, de uma análise *a posteriori*.

3.5 Hibridização independente de k e dispersão linear: o caso estudado numericamente neste trabalho

Nesta seção já consideramos a redução do modelo em um caso específico, para o qual apresentaremos, no capítulo posterior intitulado “Resultados numéricos”, dados obtidos numericamente, por meio do GRN, para a contribuição da impureza a propriedades termodinâmicas do modelo.

Trabalharemos com hibridização independente de k , isto é, $V_k = V$ e $W_k = W$. Tal aproximação é bastante justificável no caso de metais, em que há uma forte blindagem em energias específicas, sendo que o potencial é uma soma de distribuições deltas, o qual, no espaço de momento, transforma-se em uma constante. Além disso, supomos que o banho possui densidade de estados ρ constante. Com essas duas considerações aplicadas à Eq.(3.1), temos:

$$\Delta(\omega) = \pi|V|^2 \sum_k \delta(\omega - \varepsilon_k) = \pi|V|^2 \rho. \quad (3.45)$$

o que é equivalente a afirmar que escolhemos uma função hibridização constante. Portanto, as Eqs.(3.21) e (3.32) são válidas, além de que as energias locais ε_n são nulas para todo valor de n .

Ademais, supomos que a dispersão dos estados do banho é linear, $g(\varepsilon) = \varepsilon$, em que

conservamos somente o termo de primeira ordem de uma expansão em série de Taylor nas proximidades do nível de Fermi. Neste caso, vale também a Eq.(3.19).

Com essas ponderações, reduzimos o modelo àquele estudado por Krishna-murthy et al^{9,10}, com a adição do termo proporcional a W . Tomando, por simplificação, $\rho = 1/2$, em unidades convenientes, o Hamiltoniano \mathcal{H}_N , dado pela Eq.(3.35) se reduz a

$$\mathcal{H}_N = \Lambda^{(N-1)/2} \left[\mathcal{H}_{\text{imp}} + \sum_{\sigma} \left(V - W f_{-\sigma}^{\dagger} f_{-\sigma} \right) \left(f_{\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} \right) + \sum_{\sigma, n=0}^{N-1} t_n \left(c_{n\sigma}^{\dagger} c_{(n+1)\sigma} + c_{(n+1)\sigma}^{\dagger} c_{n\sigma} \right) \right], \quad (3.46)$$

em que utilizamos as Eqs.(3.24) e (3.25), além de $w = W_k/V_k = W/V$. Os termos de acoplamento entre os sítios referentes ao banho, t_n , são dados pela Eq.(3.32). O Hamiltoniano inicial, dado anteriormente pela Eq.(3.38), é reduzido a

$$\mathcal{H}_0 = \Lambda^{-1/2} \left[\mathcal{H}_{\text{imp}} + \sum_{\sigma} \left(V - W f_{-\sigma}^{\dagger} f_{-\sigma} \right) \left(f_{\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} \right) \right]. \quad (3.47)$$

Salientamos que, para a continuação do formalismo desenvolvido até aqui, não havia a necessidade de tais considerações. A construção da base de estados para a diagonalização de \mathcal{H}_{N+1} , supondo \mathcal{H}_N diagonal, e todos os passos subsequentes independem delas. No entanto, antes de entrar no método iterativo de fato, gostaríamos de apresentar instrutivamente um exemplo analítico da diagonalização exata de \mathcal{H}_0 . Por essa razão já introduzimos na presente seção as condições sob as quais analisaremos a contribuição da impureza a algumas propriedades termodinâmicas do modelo, via dados numéricos obtidos por meio do GRN. Acreditamos que, mesmo se não tivéssemos o desejo de expor a próxima seção, é interessante esclarecer melhor ao leitor nossos objetivos finais em meio a todo o formalismo apresentado até aqui e ao que está por vir.

3.6 Diagonalização de \mathcal{H}_0

A seguir, de forma instrutiva, enumeramos os passos para a diagonalização exata do Hamiltoniano inicial \mathcal{H}_0 . Contudo, visando a redução das expressões finais, consideramos

que $2\varepsilon_f + U = 0$ - caso em que o modelo apresenta simetria partícula-buraco quando $W = 0$. Tal restrição é particular à seção atual e não necessária, somente conveniente para a apresentação do espectro de energias. Portanto, queremos diagonalizar

$$\mathcal{H}_0 = \Lambda^{-1/2} \left[\varepsilon_f \sum_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + U f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} f_{\downarrow}^{\dagger} f_{\downarrow} + \sum_{\sigma} \left(V - W f_{-\sigma}^{\dagger} f_{-\sigma} \right) \left(f_{\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} \right) \right], \quad (3.48)$$

com $2\varepsilon_f + U = 0$.

Naturalmente, para diagonalizar qualquer Hamiltoniano é necessário uma base de estados completa. Sejam $\{|r\rangle\}$ os estados do primeiro sítio referente à banda de condução, ou seja, aqueles sobre os quais atuam os operadores $c_{0\sigma}^{(\dagger)}$. Similarmente, sejam $\{|s\rangle\}$ os estados do primeiro sítio da cadeia semi-infinita, a impureza. Construiremos a base de estados $\{|r; s\rangle\}$, em que $|r; s\rangle = |r\rangle \otimes |s\rangle$. Claramente, em cada um dos subespaços, há quatro estados acessíveis, vazio $|0\rangle$, *spin up* $|\uparrow\rangle$, *spin down* $|\downarrow\rangle$ ou duplamente ocupado $|\uparrow\downarrow\rangle$. Portanto, o espaço de Hilbert associado ao sistema apresenta dimensionalidade dezesseis.

Definimos três números quânticos vinculados a cada estado da base, os quais servirão como rótulo. São eles: o número de partículas, denominado carga, o *spin* total e sua projeção azimutal, denominada componente z . Na Tab.3.1 apresentamos os 16 estados da base.

Tabela 3.1 – Base de estados utilizada na diagonalização de \mathcal{H}_0 , dado pela Eq.(3.48), com $2\varepsilon_f + U = 0$. A escolha de combinações lineares no subespaço de carga 2, apesar de não ser estritamente necessária, é conveniente e simplifica os cálculos.

Carga	Spin	Componente z	Estado
0	0	0	$ 0; 0\rangle$
1	1/2	-1/2	$ \downarrow; 0\rangle, 0; \downarrow\rangle$
		1/2	$ \uparrow; 0\rangle, 0; \uparrow\rangle$
2	0	0	$ 0; \uparrow\downarrow\rangle, \frac{ \uparrow; \downarrow\rangle - \downarrow; \uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, \uparrow\downarrow; 0\rangle$
		-1	$ \downarrow; \downarrow\rangle$
	1	0	$\frac{ \uparrow; \downarrow\rangle + \downarrow; \uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$
		1	$ \uparrow; \uparrow\rangle$
3	1/2	-1/2	$ \downarrow; \uparrow\downarrow\rangle, \uparrow\downarrow; \downarrow\rangle$
		1/2	$ \uparrow; \uparrow\downarrow\rangle, \uparrow\downarrow; \uparrow\rangle$
4	0	0	$ \uparrow\downarrow; \uparrow\downarrow\rangle$

É possível ordenar os estados de forma que a matriz de \mathcal{H}_0 seja bloco diagonal; por

consequente, não há matriz a ser diagonalizada de dimensão maior que três. Principiemos pelas unidimensionais: claramente $|0;0\rangle$ e $|\uparrow\downarrow; \uparrow\downarrow\rangle$ são autoestados degenerados com energia nula.

Em seguida, avançando às bidimensionais, trabalhamos com o subespaço de carga 1, cuja única matriz não diagonal, visto que estados com diferentes componentes z do *spin* nunca se acoplam, é dada por:

$$\begin{pmatrix} 0 & V \\ V & \varepsilon_f \end{pmatrix}. \quad (3.49)$$

No modelo de Anderson tradicional, isto é, com $W = 0$, os subespaços de carga 1 e 3 apresentariam os mesmos autovalores. Entretanto, no segundo, a dupla ocupação tem por consequência a contribuição do novo termo de hibridização, o qual altera ligeiramente dois elementos de matriz:

$$\begin{pmatrix} 0 & V - W \\ V - W & \varepsilon_f \end{pmatrix}. \quad (3.50)$$

Por último, nos resta o subespaço de carga 2. Nele, os três estados de *spin* 1 são rapidamente identificados como autoestados degenerados, com energia $\Lambda^{1/2}\varepsilon_f$. Os outros três, de *spin* zero, fornecem uma matriz na qual há elementos dependentes de W :

$$\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2}V & 0 \\ \sqrt{2}V & \varepsilon_f & \sqrt{2}(V - W) \\ 0 & \sqrt{2}(V - W) & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.51)$$

As três matrizes acima podem ser diagonalizadas sem maiores dificuldades. Na Tab.3.2, utilizando a síntese notacional Ω , definida na legenda, resumimos os resultados da diagonalização de \mathcal{H}_0 com $2\varepsilon_f + U = 0$.

Evidentemente, a solução do Hamiltoniano inicial para $2\varepsilon_f + U \neq 0$ é imediata com a utilização de qualquer subrotina computacional de diagonalização ou ainda, demandando mais labor e paciência, é possível, em princípio, resolvê-lo com a ausência total de métodos computacionais. A simplificação $2\varepsilon_f + U = 0$ foi assumida somente para as expressões expostas na Tab.3.2 tomarem formas mais amigáveis. Assim sendo, fica cristalino que os autovalores e autovetores, em termos de hibridização, dependem de V e $|V - W|$, ou seja,

Tabela 3.2 – Autovalores, em unidades de $\Lambda^{1/2}$, e autoestados de \mathcal{H}_0 , com $2\varepsilon_f + U = 0$, separados conforme seus valores de carga e *spin*. A letra Ω é uma mera síntese notacional e representa em cada autoestado o seu respectivo autovalor, em unidades de $\Lambda^{1/2}$.

Carga	Spin	Energia/ $\Lambda^{1/2}$	Autoestados
0	0	0	$ 0; 0\rangle$
1	1/2	$\frac{1}{2}\varepsilon_f - \frac{1}{2}\sqrt{\varepsilon_f^2 + 4V^2}$	$\frac{V}{\Omega}(\downarrow; 0\rangle + 0; \downarrow\rangle)$ e $\frac{V}{\Omega}(\uparrow; 0\rangle + 0; \uparrow\rangle)$
		$\frac{1}{2}\varepsilon_f + \frac{1}{2}\sqrt{\varepsilon_f^2 + 4V^2}$	$\frac{V}{\Omega}(\uparrow; 0\rangle + 0; \uparrow\rangle)$ e $\frac{V}{\Omega}(\downarrow; 0\rangle + 0; \downarrow\rangle)$
2	0	$\frac{1}{2}\varepsilon_f - \frac{1}{2}\sqrt{\varepsilon_f^2 + 8[V^2 + (V - W)^2]}$	Combinações; coeficientes proporcionais a V, Ω e $V - W$ $\frac{V \uparrow; 0\rangle + (V - W) 0; \uparrow\rangle}{\sqrt{V^2 + (V - W)^2}}$
		0	
	$\frac{1}{2}\varepsilon_f + \frac{1}{2}\sqrt{\varepsilon_f^2 + 8[V^2 + (V - W)^2]}$	Combinações; coeficientes proporcionais a V, Ω e $V - W$	
	1	ε_f	$ \downarrow; \downarrow\rangle$
		ε_f	$\frac{ \uparrow; \downarrow\rangle + \downarrow; \uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$
		ε_f	$ \uparrow; \uparrow\rangle$
3	1/2	$\frac{1}{2}\varepsilon_f - \frac{1}{2}\sqrt{\varepsilon_f^2 + 4(V - W)^2}$	$\frac{V - W}{\Omega}(\uparrow; \uparrow\rangle + \uparrow; \downarrow\rangle)$ e $\frac{V - W}{\Omega}(\downarrow; \uparrow\rangle + \uparrow; \downarrow\rangle)$
		$\frac{1}{2}\varepsilon_f + \frac{1}{2}\sqrt{\varepsilon_f^2 + 4(V - W)^2}$	$\frac{V - W}{\Omega}(\uparrow; \uparrow\rangle + \uparrow; \downarrow\rangle)$ e $\frac{V - W}{\Omega}(\downarrow; \uparrow\rangle + \uparrow; \downarrow\rangle)$
4	0	0	$ \uparrow; \downarrow; \uparrow; \downarrow\rangle$

com exceção ao caso em que $V = 0$, a dependência com W sempre vem acompanhada de V ; efetivamente, é dada pela razão entre eles. Tal verificação é importante, pois, como os graus de liberdade da impureza só aparecem explicitamente no Hamiltoniano inicial, essa característica deve ser respeitada na continuidade do método e, conseqüentemente, no cálculo numérico das propriedades termodinâmicas, apresentado no Capítulo 4.

3.7 Construção da base de estados para a diagonalização de \mathcal{H}_{N+1}

Após a diagonalização de \mathcal{H}_0 , que foi ilustrada na seção anterior para o caso particular dado pela Eq.(3.48) com $2\varepsilon_f + U = 0$, precisamos escolher $\{|s(1)\rangle\}$, montar uma nova base $\{|r; s\rangle_1\}$, diagonalizar \mathcal{H}_1 , e assim por diante, conforme assertamos na discussão ao redor da Eq.(3.42).

Na construção de $\{|r; s\rangle_{N+1}\}$, dados os autoestados de \mathcal{H}_N , deve-se, primeiramente, decidir quais simetrias do Hamiltoniano serão consideradas na diagonalização iterativa. Consideraremos, a cada iteração, as conservações da carga Q , do *spin* S e de sua componente azimutal, S_z . Para cada valor de N definimos os operadores

$$\hat{Q} \equiv \sum_{\sigma, n=0}^N c_{n\sigma}^\dagger c_{n\sigma} + \sum_{\sigma} f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} \quad (3.52)$$

e

$$\hat{S} \equiv \frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu, n=0}^N c_{n\mu}^\dagger \sigma_{\mu\nu} c_{n\nu} + \frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu} f_{\mu}^\dagger \sigma_{\mu\nu} f_{\nu} , \quad (3.53)$$

sendo que este último fornece

$$\hat{S}_+ = \sum_{n=0}^N c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\downarrow} + f_{\uparrow}^\dagger f_{\downarrow} , \quad (3.54a)$$

$$\hat{S}_- = \sum_{n=0}^N c_{n\downarrow}^\dagger c_{n\uparrow} + f_{\downarrow}^\dagger f_{\uparrow} , \quad (3.54b)$$

$$\hat{S}_z = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N \left(c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} - c_{n\downarrow}^\dagger c_{n\downarrow} \right) + \frac{1}{2} \left(f_{\uparrow}^\dagger f_{\uparrow} - f_{\downarrow}^\dagger f_{\downarrow} \right) , \quad (3.54c)$$

em que $\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$ e $\hat{S}_{\pm} = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$. A partir deles, mostra-se que

$$[\mathcal{H}_N, \hat{Q}] = [\mathcal{H}_N, \hat{S}^2] = [\mathcal{H}_N, \hat{S}_z] = 0 \quad , \quad N \geq 0 , \quad (3.55)$$

em que $[A, B] \equiv AB - BA$. Os números Q , $S(S+1)$ e S_z são autovalores de \hat{Q} , \hat{S}^2 e \hat{S}_z , respectivamente.

Há ainda outra conservação - isto é, outro operador que pode comutar com \mathcal{H}_N - a ser mencionada: a da carga axial²¹. Ela foi utilizada formalmente anos depois do trabalho precursor de Krishna-murthy et al^{9,10}, no contexto do modelo de Kondo de duas impurezas. É representada por um operador vetorial que satisfaz a álgebra de momento angular, cujas componentes \mathcal{J}_x , \mathcal{J}_y e \mathcal{J}_z são completamente determinadas por

$$\mathcal{J}_+ = \sum_{n=0}^N (-1)^n c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\downarrow}^\dagger - f_\uparrow^\dagger f_\downarrow^\dagger, \quad (3.56a)$$

$$\mathcal{J}_- = \sum_{n=0}^N (-1)^n c_{n\downarrow} c_{n\uparrow} - f_\downarrow f_\uparrow, \quad (3.56b)$$

$$\mathcal{J}_z = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N \left(c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} - c_{n\downarrow} c_{n\downarrow}^\dagger \right) + \frac{1}{2} \left(f_\uparrow^\dagger f_\uparrow - f_\downarrow f_\downarrow^\dagger \right), \quad (3.56c)$$

em que $\mathcal{J}^2 = \mathcal{J}_x^2 + \mathcal{J}_y^2 + \mathcal{J}_z^2$ e $\mathcal{J}_\pm = \mathcal{J}_x \pm i\mathcal{J}_y$. No entanto, esse operador só comuta com o Hamiltoniano quando $2\varepsilon_f + U = W = 0$, razão pela qual não o utilizaremos nesta dissertação - o mencionamos, pois pode ser útil em outras situações -, porque visamos justamente analisar os efeitos provenientes de $W \neq 0$.

Prosseguindo, seja $|Q, S, S_z, r\rangle_N$ o r -ésimo autoestado de \mathcal{H}_N , com carga Q , *spin* S e componente S_z . Definimos o grupo de estados:

$$|Q, S, S_z, r; 0\rangle_N \equiv |Q, S, S_z, r\rangle_N, \quad (3.57a)$$

$$|Q, S, S_z, r; \uparrow\rangle_N \equiv c_{(N+1)\uparrow}^\dagger |Q, S, S_z, r\rangle_N, \quad (3.57b)$$

$$|Q, S, S_z, r; \downarrow\rangle_N \equiv c_{(N+1)\downarrow}^\dagger |Q, S, S_z, r\rangle_N, \quad (3.57c)$$

$$|Q, S, S_z, r; \uparrow\downarrow\rangle_N \equiv c_{(N+1)\uparrow}^\dagger c_{(N+1)\downarrow}^\dagger |Q, S, S_z, r\rangle_N, \quad (3.57d)$$

o qual evidencia que a adição de um novo sítio à cadeia semi-infinita aumenta a dimensão do espaço de Hilbert por um fator quatro. É necessário elucidar que mesmo nos estados da esquerda os números quânticos Q , S e S_z dizem respeito à cadeia de N sítios - após o “;” há a informação sobre o sítio adicionado.

Para usufruirmos das conservações de \hat{Q} , \hat{S}^2 e \hat{S}_z , ou seja, montarmos uma matriz blocodiagonal, queremos uma base na qual os números quânticos Q , S e S_z sejam bem definidos. Com este fim, construiremos combinações dos estados dados pelas Eqs.(3.57).

Impondo a conservação da carga e do *spin*; há dois estados imediatos:

$$|Q, S, S_z, r, 1\rangle_{N+1} = |Q, S, S_z, r; 0\rangle_N, \quad (3.58a)$$

$$|Q, S, S_z, r, 2\rangle_{N+1} = |Q - 2, S, S_z, r; \uparrow\downarrow\rangle_N, \quad (3.58b)$$

em que todos os números quânticos dos estados da esquerda referem-se à cadeia de $N + 1$ sítios e os índices 1 e 2 apenas rotulam o “tipo” de estado da base, ou seja, como ele foi gerado. Os estados dados pelas Eqs.(3.58), assim como os outros dois que obteremos abaixo, são, por construção, autoestados dos operadores carga, *spin* total ao quadrado e componente z do *spin* - relativos à iteração $N + 1$ - com autovalores Q , $S(S + 1)$ e S_z , respectivamente.

Quanto aos outros dois estados, malgrado a conservação do número de partículas ser novamente imediata, a respeito da conservação do *spin* é imprescindível considerar com mais cuidado a adição de um *spin* $1/2$ ao sistema descrito por \mathcal{H}_N . Indubitavelmente, de acordo com a regra de adição de momento angular, um estado da base de \mathcal{H}_{N+1} com *spin* S descende de um autoestado de \mathcal{H}_N com *spin* $S + 1/2$ ou $S - 1/2$, bem como um estado com S_z provém da adição de um *spin up* a um estado com $S_z - 1/2$ ou da de um *spin down* a um com $S_z + 1/2$.

Genericamente, a combinação de estados com momento angular j_1 e j_2 resulta em um ket²²

$$|j, m\rangle = \sum_{m_1=-(2j_1+1)}^{2j_1+1} \sum_{m_2=-(2j_2+1)}^{2j_2+1} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m\rangle |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle, \quad (3.59)$$

em que $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$ e $m = -(2j_1+1), -2j, \dots, 2j, 2j_2+1$. Os números $\langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m\rangle$ foram batizados em homenagem aos alemães Alfred Clebsch (1833-1872) e Paul A. Gordan (1837-1912), os quais se depararam com um resultado equivalente na teoria dos invariantes. São chamados de coeficientes de Clebsch-Gordan e são tabelados.

Na Eq.(3.59), optamos pelas variáveis de subíndice 2 para rotular o sítio acrescido, portanto $j_2 = 1/2$ e $m_2 = \pm 1/2$. Desta forma, conforme a discussão acima, j_1 pode assumir dois valores: $j - 1/2$ e $j + 1/2$. Os coeficientes de Clebsch-Gordan que nos serão úteis são

dados por^{23,24}

$$\left\langle j_1, m_1; \frac{1}{2}, m_2 \left| j; m \right. \right\rangle = \begin{cases} \sqrt{\frac{j_1 \pm m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}} & \text{para } j = j_1 + \frac{1}{2} \text{ e } m_2 = \pm \frac{1}{2} \\ \mp \sqrt{\frac{j_1 \mp m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}} & \text{para } j = j_1 - \frac{1}{2} \text{ e } m_2 = \pm \frac{1}{2} \end{cases}. \quad (3.60)$$

No caso em que $j_1 = j - 1/2$, ou melhor, $j_1 = S - 1/2$, suprimindo dos kets a informação de que $j_2 = 1/2$, temos

$$|Q, S, S_z, r, 3\rangle_{N+1} = \eta_+ \left| Q - 1, S - \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2}, r; \uparrow \right\rangle_N + \eta_- \left| Q - 1, S - \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}, r; \downarrow \right\rangle_N, \quad (3.61)$$

em que

$$\eta_{\pm} = \sqrt{\frac{S \pm S_z}{2S}}. \quad (3.62)$$

Similarmente para o caso em que $j_1 = S + 1/2$:

$$|Q, S, S_z, r, 4\rangle_{N+1} = \eta'_+ \left| Q - 1, S + \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2}, r; \uparrow \right\rangle_N + \eta'_- \left| Q - 1, S + \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}, r; \downarrow \right\rangle_N, \quad (3.63)$$

em que

$$\eta'_{\pm} = \mp \sqrt{\frac{S \mp S_z + 1}{2S}}. \quad (3.64)$$

Logo, através dos autoestados de \mathcal{H}_N , organizamos uma base para diagonalizar \mathcal{H}_{N+1} , na qual, como desejávamos preliminarmente, os estados apresentam números quânticos Q , S e S_z bem definidos:

$$|Q, S, S_z, r, 1\rangle_{N+1} = |Q, S, S_z, r; 0\rangle_N, \quad (3.65a)$$

$$|Q, S, S_z, r, 2\rangle_{N+1} = |Q - 2, S, S_z, r; \uparrow\downarrow\rangle_N, \quad (3.65b)$$

$$|Q, S, S_z, r, 3\rangle_{N+1} = \sqrt{\frac{S + S_z}{2S}} \left| Q - 1, S - \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2}, r; \uparrow \right\rangle_N \\ + \sqrt{\frac{S - S_z}{2S}} \left| Q - 1, S - \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}, r; \downarrow \right\rangle_N, \quad (3.65c)$$

$$|Q, S, S_z, r, 4\rangle_{N+1} = -\sqrt{\frac{S - S_z + 1}{2S + 2}} \left| Q - 1, S + \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2}, r; \uparrow \right\rangle_N \\ + \sqrt{\frac{S + S_z + 1}{2S + 2}} \left| Q - 1, S + \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}, r; \downarrow \right\rangle_N. \quad (3.65d)$$

3.8 Elementos de matriz de \mathcal{H}_{N+1}

A partir das Eqs.(3.65), poderíamos calcular imediatamente os elementos de matriz da $(N + 1)$ -ésima iteração. Todavia, é possível escrevê-los em termos de elementos que independem de S_z . Para tal proeza utilizaremos o teorema devido ao húngaro Eugene P. Wigner (1902-1995) e ao americano Carl H. Eckart (1902-1973), conhecido como teorema de Wigner-Eckart²⁵ - cuja demonstração explícita é feita no Apêndice A - para um operador tensorial de ordem L , cuja M -ésima componente é dada por \mathcal{T}_M^L , definido através das relações:

$$[J_z, \mathcal{T}_M^L] = M\mathcal{T}_M^L, \quad (3.66a)$$

$$[J_{\pm}, \mathcal{T}_M^L] = \sqrt{L(L + 1) - M(M \pm 1)}\mathcal{T}_{M\pm 1}^L, \quad (3.66b)$$

em que J_z e J_{\pm} são componentes de um operador vetorial \mathbf{J} que satisfaz a álgebra tradicional de momento angular, com $\mathbf{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ e $J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$. Segundo tal teorema, o elemento de matriz $\langle j, m | \mathcal{T}_M^L | j', m' \rangle$, para o acoplamento $L \otimes j' \rightarrow j$, pode ser escrito como

$$\langle j, m | \mathcal{T}_M^L | j', m' \rangle = \langle L, M; j', m' | j, m \rangle \langle j || \mathcal{T}^L || j' \rangle, \quad (3.67)$$

em que o segundo objeto do lado direito independe de m ou m' e é denominado elemento de matriz invariante - em inglês: *reduced matrix element*.

No Apêndice B mostramos que os operadores $c_{N\sigma}^{(\dagger)}$ definem dois tensores de ordem $L = 1/2$, os quais satisfazem as Eqs.(3.66) para \mathbf{J} representado pelo operador $\hat{\mathbf{S}}$:

$$c_N^\dagger \rightarrow \begin{pmatrix} c_{N\uparrow}^\dagger \\ c_{N\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad c_N \rightarrow \begin{pmatrix} c_{N\downarrow} \\ -c_{N\uparrow} \end{pmatrix}; \quad (3.68)$$

o que corresponde a dizermos que o tensor c_N^\dagger apresenta componentes $c_{N\sigma}^\dagger$ e o c_N componentes $-2\sigma c_{N\sigma}$; convencionamos que σ fora de índices apresenta valor $1/2$ para *spin up* e $-1/2$ para *spin down*.

Depois de apresentados os tensores c_N^\dagger e c_N , reescrevemos o teorema de Wigner-Eckart para o primeiro, que nos será útil, dentro do nosso contexto:

$${}_N \langle Q', S', r' || c_N^\dagger || Q, S, r \rangle_N = \frac{{}_N \langle Q', S', S'_z, r' | c_{N\sigma}^\dagger | Q, S, S_z, r \rangle_N}{\langle S, S_z; \frac{1}{2}, \sigma | S', S'_z \rangle}, \quad (3.69)$$

com $\sigma = \pm 1/2$.

Não obstante o título desta seção, aduzimos não exatamente aos elementos de matriz de \mathcal{H}_{N+1} , mas sim de $\sum_\sigma c_{N\sigma}^\dagger c_{(N+1)\sigma}$. Tendo estes determinados, a obtenção daqueles é direta, pois exige somente - segundo a Eq.(3.37) - um fator multiplicativo, já que o Hamiltoniano é hermitiano; além, é claro, dos autovalores provenientes da cadeia precedente.

Examinando a base de estados dada pelas Eqs.(3.65) nota-se que somente quatro classes de elementos de matriz de $\sum_\sigma c_{N\sigma}^\dagger c_{(N+1)\sigma}$ são não nulas, dado que os autoestados de \mathcal{H}_N formam uma base ortonormal. Elas são caracterizadas por elementos de matriz formados pelo "tipo" 1 com "tipo" 3, 1 com 4, 3 com 2 e 4 com 2. No Apêndice C, escrito especialmente para o leitor interessado nestas minúcias, apresentamos os cálculos explícitos, juntamente com observações sobre as convenções de sinal adotadas. Aqui, no

corpo principal do trabalho, utilizando a definição

$${}_{r',i'} \langle c_{N\sigma}^\dagger c_{(N+1)\sigma} \rangle_{r,i} \equiv {}_{N+1} \langle Q, S, S_z, r', i' \mid c_{N\sigma}^\dagger c_{(N+1)\sigma} \mid Q, S, S_z, r, i \rangle_{N+1}, \quad (3.70)$$

nos limitamos a apresentar os resultados:

$$\sum_{\sigma} {}_{r',1} \langle c_{N\sigma}^\dagger c_{(N+1)\sigma} \rangle_{r,3} = {}_N \langle Q, S, r' \parallel c_N^\dagger \parallel Q-1, S-\frac{1}{2}, r \rangle_N, \quad (3.71a)$$

$$\sum_{\sigma} {}_{r',1} \langle c_{N\sigma}^\dagger c_{(N+1)\sigma} \rangle_{r,4} = {}_N \langle Q, S, r' \parallel c_N^\dagger \parallel Q-1, S+\frac{1}{2}, r \rangle_N, \quad (3.71b)$$

$$\sum_{\sigma} {}_{r',3} \langle c_{N\sigma}^\dagger c_{(N+1)\sigma} \rangle_{r,2} = \sqrt{\frac{2S}{2S+1}} {}_N \langle Q-1, S-\frac{1}{2}, r' \parallel c_N^\dagger \parallel Q-2, S, r \rangle_N, \quad (3.71c)$$

$$\sum_{\sigma} {}_{r',4} \langle c_{N\sigma}^\dagger c_{(N+1)\sigma} \rangle_{r,2} = -\sqrt{\frac{2S+2}{2S+1}} {}_N \langle Q-1, S+\frac{1}{2}, r' \parallel c_N^\dagger \parallel Q-2, S, r \rangle_N, \quad (3.71d)$$

em que fica cristalino o cunho iterativo da técnica, visto que os elementos de matriz de \mathcal{H}_{N+1} dependem explicitamente, via elementos invariantes, da iteração N .

3.8.1 Elementos de matriz invariantes

Após reduzirmos os elementos de matriz de \mathcal{H}_{N+1} - Eqs.(3.71) - a, essencialmente, elementos invariantes providos da iteração N , resta, obviamente, determinar estes. Genericamente, o propósito é calcular o objeto

$${}_N \langle Q', S', w' \parallel c_N^\dagger \parallel Q, S, w \rangle_N, \quad (3.72)$$

para o qual utilizamos a Eq.(3.69), além de expandir os autoestados de \mathcal{H}_N em termos dos estados da base utilizada antes da diagonalização:

$$\mid Q, S, S_z, w \rangle_N = \sum_{r,i} \mathcal{U}_{r,i}(Q, S, w) \mid Q, S, S_z, r, i \rangle_N, \quad (3.73)$$

em que os elementos $U_{r,i}(Q, S, w)$ pertencem a uma matriz U , ortogonal, formada pelos autovetores de \mathcal{H}_N . Portanto,

$$\begin{aligned} & {}_N \langle Q', S', w' \parallel c_N^\dagger \parallel Q, S, w \rangle_N = \\ & = \sum_{r',i'} \sum_{r,i} U_{r',i'}(Q', S', w') U_{r,i}(Q, S, w) \frac{{}_N \langle Q', S', S'_z, r', i' \mid c_{N\sigma}^\dagger \mid Q, S, S_z, r, i \rangle_N}{\langle S, S_z, \frac{1}{2}, \sigma \mid S', S'_z \rangle}. \end{aligned} \quad (3.74)$$

A base de estados de \mathcal{H}_N é, naturalmente, análoga a de \mathcal{H}_{N+1} , exibida nas Eqs.(3.65); a partir dela nota-se que o operador $c_{N\sigma}^\dagger$ não altera r , de modo que a somatória acima apresenta termo não nulo somente para $r = r'$. Também, devido à conservação da carga e do *spin*, é necessário que $Q' = Q + 1$ e $S' = S \pm 1/2$. Em vista disso, a Eq.(3.74) se reduz a

$$\begin{aligned} & {}_N \langle Q + 1, S', w' \parallel c_N^\dagger \parallel Q, S, w \rangle_N = \\ & = \sum_{i',i} U_{r,i'}(Q + 1, S', w') U_{r,i}(Q, S, w) \quad {}_N \langle Q + 1, S', r, i' \parallel c_N^\dagger \parallel Q, S, r, i \rangle_N, \end{aligned} \quad (3.75)$$

com $S' = S \pm 1/2$. Acima, utilizamos novamente, para condensar a expressão, o teorema de Wigner-Eckart como exposto na Eq.(3.69), com a inclusão dos índices i e i' . A matriz U , proveniente da iteração N , é, por construção do método, conhecida da diagonalização de \mathcal{H}_N . Quanto aos elementos invariantes da Eq.(3.75) há, similarmente à seção anterior, quando trabalhávamos diretamente com os elementos de matriz, quatro deles não nulos, dois relacionados com $S' = S + 1/2$ e outra dupla com $S' = S - 1/2$. Nos restringimos a apresentá-los abaixo, salientando ao leitor interessado em mais detalhes que convenções de sinais e o cálculo explícito são discutidos especificamente no Apêndice D:

$${}_N \langle Q + 1, S + \frac{1}{2}, r, 3 \parallel c_N^\dagger \parallel Q, S, r, 1 \rangle_N = 1, \quad (3.76a)$$

$${}_N \langle Q + 1, S + \frac{1}{2}, r, 2 \parallel c_N^\dagger \parallel Q, S, r, 4 \rangle_N = \sqrt{\frac{2S+1}{2S+2}}, \quad (3.76b)$$

$${}_N \langle Q + 1, S - \frac{1}{2}, r, 4 \parallel c_N^\dagger \parallel Q, S, r, 1 \rangle_N = 1, \quad (3.76c)$$

$${}_N \langle Q + 1, S - \frac{1}{2}, r, 2 \parallel c_N^\dagger \parallel Q, S, r, 3 \rangle_N = -\sqrt{\frac{2S+1}{2S}}. \quad (3.76d)$$

Após o extenso formalismo do GRN apresentado nas seções anteriores, nos concentramos agora na discussão de pontos que constituirão o alicerce da análise dos resultados.

3.9 O conceito de ponto fixo

Este conceito é bastante útil na interpretação dos resultados numéricos concernentes às propriedades termodinâmicas do modelo. Apesar de sua utilidade neste trabalho ser basicamente resumida pela sentença anterior, nesta seção o trataremos sem nenhuma relação com elas, de modo a evidenciar que é um conceito independente, que pode, contudo, ser visualizado através delas.

De forma geral, seja \mathcal{R} uma transformação qualquer do grupo de renormalização; um ponto fixo \mathcal{H}^* , de \mathcal{R} , é o Hamiltoniano que permanece invariante sob a aplicação de \mathcal{R} :

$$\mathcal{R}[\mathcal{H}^*] = \mathcal{H}^* . \quad (3.77)$$

Em outras palavras, mais particulares ao nosso processo iterativo – em que assumimos doravante \mathcal{R} fornecido pela Eq.(3.37) e nos referimos a \mathcal{H}_N , Eq.(3.35) –, a variação com N representa uma trajetória no espaço dos Hamiltonianos reescalados, em que cada ponto é caracterizado por um conjunto de níveis de energia e autoestados; nas proximidades de um ponto fixo as energias mais baixas mudam muito pouco com a variação de N . Tais trajetórias, dependentes dos números quânticos Q e S , podem ser visualizadas a partir da construção de um diagrama como o apresentado na Fig.3.6.

Na verdade, \mathcal{R} não apresenta pontos fixos, todavia \mathcal{R}^2 , que também é uma transformação do grupo de renormalização, os exhibe, fato pelo qual deve-se escolher entre valores de N pares ou ímpares na construção do diagrama de trajetórias.

Na Fig.3.6 são patentes quatro regiões com a distinção aproximada de pontos fixos: nas primeiras iterações ($N < 5$), em valores intermediários de N ($5 < N < 15$ e $15 < N < 30$) e para $N > 30$. A física delas não pode ser extraída simplesmente pelo diagrama de autoenergias, é necessária uma análise ulterior; especificamente, a diagonalização direta dos Hamiltonianos de ponto fixo \mathcal{H}^* (que usualmente têm estrutura simples, se comparada a de \mathcal{H}_N) e a comparação de seus espectros com os dados numéricos. Uma discussão pro-

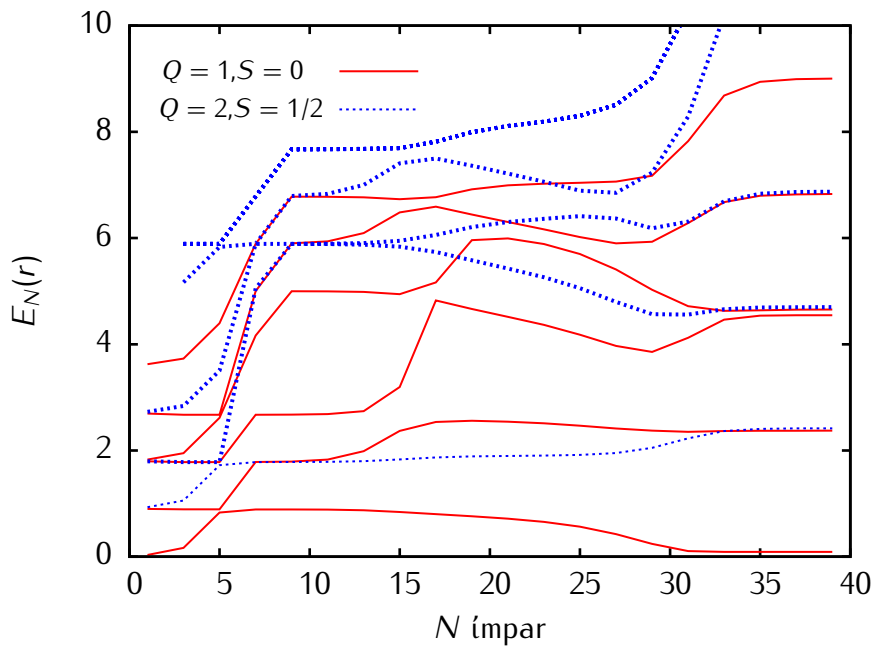


Figura 3.6 – Energias mais baixas de \mathcal{H}_N - dado pela Eq.(3.37) - em função de N ímpar; para $\Delta(\omega) = \Delta_0$ constante, $V = 0.00006$, $U = 0.02$, $\varepsilon_f = -10^{-5}$, $W = 0$. As energias mais baixas mudam muito pouco com N ímpar em praticamente quatro regiões: nas primeiras iterações ($N < 5$), em duas regiões de valores intermediários de N ($5 < N < 15$ e $15 < N < 30$) e para $N > 30$, as quais caracterizam quatro pontos fixos. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, em unidades da semilargura de banda D .

longada, aprofundada e recomendada ao leitor interessado sobre este procedimento, com a construção de Hamiltonianos efetivos para cada ponto fixo, foi apresentada em 1980, tanto para o modelo simétrico⁹, quanto para o assimétrico¹⁰, em referências que, juntamente com *review* de Wilson⁷, são o fundamento do Grupo de Renormalização Numérico. Neste trabalho nos contentamos com a enumeração dos pontos fixos do modelo e o estudo direto na contribuição da impureza a propriedades termodinâmicas, relacionando-os qualitativamente a ela. Tal abordagem, embora simplificada, nos será fundamental, pois os efeitos do termo de hibridização correlacionada mencionados desde o título desta dissertação são justamente os efeitos sobre as transições, do inglês *crossover*, entre os pontos fixos.

Antes de batizar e relacionar os pontos fixos à contribuição da impureza a algumas propriedades termodinâmicas do modelo, discorreremos primeiro sobre estas e aquela, introduzindo-as no trama do GRN.

3.10 Contribuição da impureza a propriedades físicas

Agora, temos o receituário do GRN estruturado, com o mapeamento do modelo em um Hamiltoniano representativo de uma cadeia semi-infinita de N sítios, resultando na diagonalização iterativa do modelo – ao invés da diagonalização direta do Hamiltoniano completo dado pela Eq.(3.26). A sequência natural é o cálculo de propriedades físicas, o que passa, invariavelmente, pela função de partição. Indubitavelmente, ela deve ser incorporada no atual entrecho e o fato de que – recordando as Eqs.(3.32) e (3.34) – os coeficientes t_n decaem com $\Lambda^{-n/2}$ pode ser utilizado como um preâmbulo para relacionar uma certa cadeia de comprimento N com uma escala de energia do modelo (em unidades da semilargura de banda D), a qual, sem maiores surpresas, denominamos temperatura.

A diagonalização do Hamiltoniano reescalado \mathcal{H}_N , dado pela Eq.(3.35), fornece um conjunto de autovalores $\{E_l^{(N)}\}$ em que, devido ao fator de escala $\Lambda^{(N-1)/2}$, o espaçamento entre os níveis de menor energia é da ordem da unidade. Para uma dada temperatura T , os autovalores $E_l^{(N)}$ que satisfazem

$$E_l^{(N)} - E_0^{(N)} \gg \Lambda^{(N-1)/2} T, \quad (3.78)$$

em que $E_0^{(N)}$ é a energia do estado fundamental, não contribuirão significativamente no cálculo de propriedades físicas nessa escala de energia, pois seus respectivos fatores de Boltzmann[§] tenderão a zero (assumimos doravante $k_B = 1$). Portanto, para um dado T_N , com

$$T_N \equiv \frac{\Lambda^{-(N-1)/2}}{\tilde{\beta}}, \quad (3.79)$$

e $\tilde{\beta}$ da ordem da unidade, é permitido substituir o Hamiltoniano completo, dado pela Eq.(3.26), pelo Hamiltoniano truncado na iteração N , garantindo-se que sejam mantidos estados suficientes para se comprovar que ao menos o último dos remanescentes obedece

$$E_l^{(N)} - E_0^{(N)} \gg \Lambda^{(N-1)/2} T_N. \quad (3.80)$$

Equivalentemente, tendo em mente a Eq.(3.36), para se definir T_N pode-se pensar nas

[§]homenagem ao austríaco Ludwig E. Boltzmann (1844-1906)

transformações:

$$\exp(-\beta\mathcal{H}) \rightarrow \exp(-\beta\mathcal{H}_N\Lambda^{-(N+1)/2}) \equiv \exp(-\bar{\beta}\mathcal{H}_N), \quad (3.81)$$

em que $\bar{\beta} = \beta\Lambda^{-(N+1)/2}$, e

$$\beta = \frac{1}{T} \rightarrow \frac{1}{T_N} = \frac{\bar{\beta}}{\Lambda^{-(N-1)/2}}. \quad (3.82)$$

Logo, para um dado $\bar{\beta}$, a cada Hamiltoniano \mathcal{H}_N há uma temperatura T_N envolvida no problema, possibilitando o cálculo da função de partição com as aproximações inerentes ao método. Com efeito, não há obrigatoriamente um único valor de T_N associado à \mathcal{H}_N ; como a única limitação para $\bar{\beta}$ é que seja da ordem da unidade, pode-se escolher mais de um valor que a satisfaça, de modo que, em uma curva de determinada propriedade física *versus* temperatura, cada iteração fornece um número de pontos maior ou igual a um. Na Fig.3.7, como exemplo, exibimos com a devida distinção, para uma propriedade arbitrária e ilustrativa, Φ *versus* T , os pontos provenientes das dez primeiras iterações escolhendo-se quatro valores de $\bar{\beta}$.

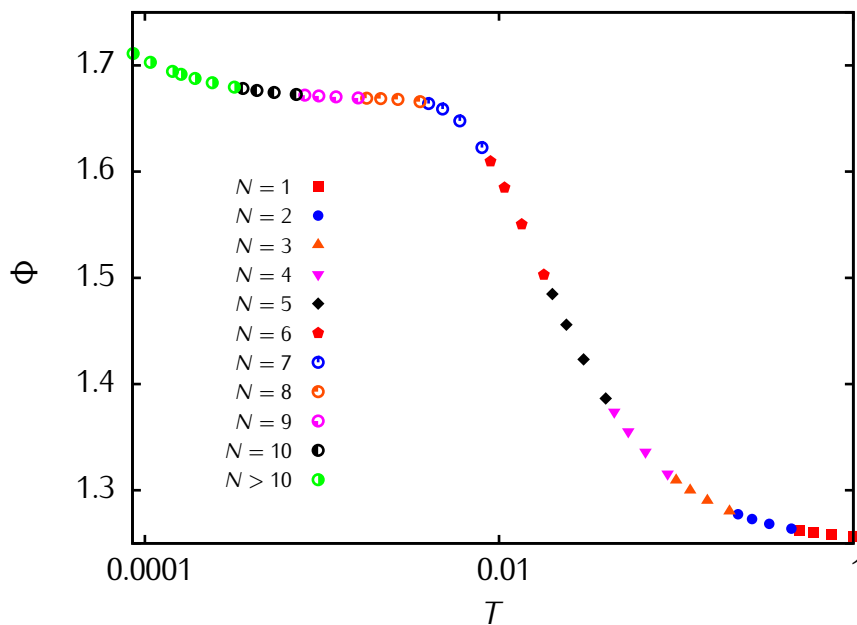


Figura 3.7 – Distinção entre os pontos provenientes das dez primeiras iterações para a dependência de uma propriedade física arbitrária e ilustrativa com a temperatura, Φ *versus* T , utilizando $\bar{\beta} = 0.6, 0.8, 1.0, 1.2$.

A escolha de mais de um valor para $\bar{\beta}$ colabora para que os dados fiquem menos rarefeitos, isto é, para que seja diminuído o espaço entre os pontos, dando uma sensação

maior de continuidade nos dados obtidos numericamente.

Na discussão acima, supusemos que há apenas uma escala de energia envolvida, caracterizada por $\Lambda^{(N-1)/2}$, o que resulta em uma relação direta na definição de temperatura, feita na Eq.(3.79). Neste trabalho, tal definição é suficiente, pois seu escopo é o cálculo de propriedades estáticas, mais especificamente, termodinâmicas. Porém, a situação se torna mais complexa quando há interesse em informações caracterizadas por diferentes escalas de energia, como no caso de funções resposta dinâmicas.

3.10.1 Propriedades termodinâmicas

As quantidades físicas mais simples relacionadas com os graus de liberdade da impureza são a contribuição dela à entropia, S_{imp} , ao calor específico, C_{imp} , e à suscetibilidade magnética, χ_{imp} . O objeto principal deste trabalho é estudar o efeito do termo adicional, proporcional a W , sobre elas.

A entropia e o calor específico são, essencialmente, as primeiras derivadas da energia livre $F = -T \log Z$ e da energia interna, respectivamente, com relação à temperatura:

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}, \quad (3.83a)$$

$$C = \frac{\partial \langle \mathcal{H} \rangle}{\partial T}, \quad (3.83b)$$

em que o valor esperado é calculado, genericamente para qualquer observável \mathcal{O} , por meio de

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} (e^{-\beta \mathcal{H}} \mathcal{O}), \quad (3.84)$$

com

$$Z = \text{Tr} (e^{-\beta \mathcal{H}}) \quad \text{e} \quad \beta = \frac{1}{T}. \quad (3.85)$$

Do ponto de vista numérico, é interessante, sempre que possível, evitar o cálculo de

derivadas. Por consequência, é conveniente calculá-las de forma analítica, o que resulta:

$$S = \frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{T} + \log Z , \quad (3.86a)$$

$$C = \frac{\langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2}{T^2} . \quad (3.86b)$$

Afora isso, na conjuntura específica da implementação do GNR, há ainda outra tenuidade. Para se esquivar do crescimento exponencial das energias - fator $\Lambda^{(N-1)/2}$ da Eq.(3.35) - é vital que a cada iteração a energia do estado fundamental seja subtraída de todo o espectro, o que não altera as conclusões físicas, pois o relevante são excitações, isto é, a diferença de energia entre os níveis do espectro.

Outras propriedades locais envolvem usualmente o cálculo de funções de correlação, como a contribuição da impureza à suscetibilidade magnética isotérmica; esta, em termos genéricos, assumindo $g\mu_B = \hbar = 1$, pode ser definida como²⁶

$$\chi(T) = \int_0^\beta d\tau \langle \hat{S}_z[\tau] \hat{S}_z \rangle - \beta \langle \hat{S}_z \rangle^2 , \quad (3.87)$$

com tempo imaginário τ e

$$\langle \hat{S}_z[\tau] \hat{S}_z \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left(e^{-\beta \mathcal{H}} e^{\tau \mathcal{H}} \hat{S}_z e^{-\tau \mathcal{H}} \hat{S}_z \right) . \quad (3.88)$$

Em geral, no formato apresentado acima, o cálculo da Eq.(3.88) é equivalente ao de uma função de correlação dinâmica²⁶, em que o Hamiltoniano pode apresentar, em princípio, um campo indução magnética dependente do tempo. Todavia, em nosso caso, como $[\mathcal{H}, \hat{S}_z] = 0$, ela é independente do tempo e se reduz a

$$\langle \hat{S}_z[\tau] \hat{S}_z \rangle \Big|_{[\mathcal{H}, \hat{S}_z]=0} = \frac{\beta}{Z} \text{Tr} \left(e^{-\beta \mathcal{H}} \hat{S}_z^2 \right) = \beta \langle \hat{S}_z^2 \rangle , \quad (3.89)$$

revertendo-se, finalmente, em

$$\chi(T) = \frac{\langle \hat{S}_z^2 \rangle - \langle \hat{S}_z \rangle^2}{T} . \quad (3.90)$$

Este resultado é exatamente igual ao obtido pela definição mais simples e particular da chamada suscetibilidade magnética a campo nulo:

$$\chi(T) \equiv \lim_{B \rightarrow 0} \frac{\partial \langle \hat{S}_z \rangle}{\partial B} = \frac{\langle \hat{S}_z^2 \rangle - \langle \hat{S}_z \rangle^2}{T}, \quad (3.91)$$

em que \mathbf{B} é um campo indução magnética externo na direção da componente z do *spin* \mathbf{S} , com magnitude B independente do tempo. Nela é mais cristalina sua característica de função resposta, pois a derivada deixa claro que ela mede a “resposta” do *spin* à variação do campo magnético.

Agora, para obter a contribuição da impureza às três propriedades termodinâmicas de interesse, subtraímos dos valores calculados para todo o sistema, os de um de referência escolhido adequadamente⁹, discriminado pelo superíndice (0):

$$\chi_{\text{imp}}(T) \equiv \chi(T) - \chi^{(0)}(T), \quad (3.92a)$$

$$\mathcal{S}_{\text{imp}}(T) \equiv \mathcal{S}(T) - \mathcal{S}^{(0)}(T), \quad (3.92b)$$

$$C_{\text{imp}}(T) \equiv C(T) - C^{(0)}(T). \quad (3.92c)$$

Advertimos que desde as Eqs.(3.83) até as Eqs.(3.92) não há alusão direta ao número de iteração N . As expressões são genéricas, para qualquer escala de energia ou, em outras palavras, definição de T ; inclusive as que fazem menção a um sistema de referência, ainda não especificado. Todavia, conforme aduzimos no início desta seção, na contextura do GRN, a cada iteração N , ou seja, a cada conjunto – como vimos, finito – de autovalores de \mathcal{H}_N , está associada uma escala logarítmica de temperatura T_N , de modo que cada quantidade acima é, implicitamente, no enredo do GRN, função de N . Discutiremos abaixo detalhes desta dependência e do sistema de referência citado acima, mas, por economia de espaço e principalmente, esperamos, melhor entendimento do leitor, trabalharemos de modo explícito somente com a entropia, visto que as outras duas propriedades seguem considerações análogas. Primeiramente, introduzimos

$$\mathcal{S}^{(N)} \equiv \bar{\beta} \langle \mathcal{H}_N \rangle + \log Z^{(N)}, \quad (3.93)$$

em que a função de partição e, por resultado, os valores esperados são calculados como indicado nas Eqs.(3.84) e (3.85), com as substituições $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}_N$ e $\beta \rightarrow \bar{\beta}$.

A contribuição da impureza à entropia do sistema para uma dada temperatura T_N pode ser obtida por

$$\mathcal{S}_{\text{imp}}(T_N) \equiv \mathcal{S}^{(N)} - \mathcal{S}_{\text{banho}}^{(N)}, \quad (3.94)$$

em que aqui introduzimos o tal sistema de referência, sendo

$$\mathcal{S}_{\text{banho}}^{(N)} \equiv \bar{\beta} \langle \mathcal{H}_{N,\text{banho}} \rangle + \log Z_{\text{banho}}^{(N)}, \quad (3.95)$$

obtida a partir do Hamiltoniano referente ao banho isolado, isto é, sem a presença da impureza e, obviamente, sem a respectiva interação:

$$\mathcal{H}_{N,\text{banho}} = \Lambda^{(N-1)/2} \left[\sum_{\sigma,n=0}^N \varepsilon_n c_{n\sigma}^\dagger c_{n\sigma} + \sum_{\sigma,n=0}^{N-1} t_n \left(c_{n\sigma}^\dagger c_{(n+1)\sigma} + c_{(n+1)\sigma}^\dagger c_{n\sigma} \right) \right], \quad (3.96)$$

o qual provém da Eq.(3.35). As quantidades $\mathcal{C}_{\text{imp}}(T_N)$ e $\chi_{\text{imp}}(T_N)$ são obtidas de forma completamente semelhante.

Pondo fim a esta seção, há ainda alguns comentários remanescentes de interesse prático a serem feitos, os quais se relacionam diretamente aos gráficos que apresentaremos no Capítulo 4, "Resultados numéricos". A respeito da suscetibilidade magnética, trabalharemos, na verdade, com ela multiplicada pela temperatura. O produto $T\chi_{\text{imp}}$ é conveniente pois trata-se simplesmente - quando se trabalha na ausência de campo magnético - da média do quadrado do momento magnético, uma quantidade cujos valores se mostrarão bastante intuitivos em certos limites de temperatura relativos à largura da banda. Sobre o calor específico, antecipamos aqui que, numericamente, o fator $1/T^2$ pode ser um tanto desagradável nas cercanias do nível de Fermi, região onde $T \rightarrow 0$. A superação desse obstáculo^{27,28} é facilitada com a introdução de um segundo parâmetro^{29,30} de discretização, o qual será o tema da seção 3.12. Quanto à entropia, examinaremos de fato a grandeza $\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}})$, a qual representa o número de graus de liberdade da impureza efetivamente acoplados ao banho.

Por último, evidenciamos que o eixo da abcissas, relativo a temperatura, estará sempre em escala logarítmica, o que permite uma correspondência direta entre os pontos obtidos

e as trajetórias de \mathcal{H}_N em função de N , discutidas na seção 3.9. Tal conexão provém da Eq.(3.79) e será discutida com mais detalhes na seção seguinte.

3.11 Relação entre pontos fixos e propriedades termodinâmicas

Em seções precedentes, depois de fixar o conceito de ponto fixo, relacionamos uma escala de temperatura T_N a cada iteração do método, o que permite, dentro do contexto do GRN, calcular a função de partição. Agora, já que podemos determinar diretamente propriedades termodinâmicas de interesse, vamos relacionar o comportamento delas em função da temperatura com regiões que distinguem os pontos fixos.

Utilizando os mesmos parâmetros da Fig.3.6, calculamos a contribuição da impureza como função da temperatura - desde o topo da banda até as cercanias do nível de Fermi - para a suscetibilidade magnética multiplicada pela temperatura, o calor específico e a entropia. Os resultados são mostrados na Fig.3.8.

Na Fig.3.8, especialmente na parte inferior, onde exibimos $\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}})$, que representa o número de graus de liberdade da impureza efetivamente acoplados ao banho, são claros alguns domínios em que as propriedades termodinâmicas variam pouco com a temperatura. Tais regiões estão diretamente relacionadas com aquelas discutidas na Fig.3.6. Como $T_N \propto \Lambda^{-N}$, o esquema iterativo, crescente em N , fornece dados relativos às redondezas do topo da banda nas primeiras iterações, atingindo os arredores do nível de Fermi conforme avança. Desta forma, os pontos fixos apontados na seção 3.9, nos intervalos ($N < 5$), ($5 < N < 15$), ($15 < N < 30$) e ($N > 30$), estão relacionados a $\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}})$ aproximadamente igual a 4, 3, 2 e 1, respectivamente.

Mencionamos preliminarmente a exponencial da entropia pois é ela que revela de forma mais límpida os pontos fixos; comentários semelhantes para $T\chi_{\text{imp}}$ e C_{imp} (sendo que este último indica em cada pico uma transição entre os pontos fixos) serão feitos abaixo, enquanto nomeamos cada ponto fixo. Com esse batismo, no qual aproveitaremos como exemplo uma escolha de parâmetros específica, estabeleceremos uma linguagem para analisar os efeitos do termo de hibridização correlacionada sobre as transições entre os

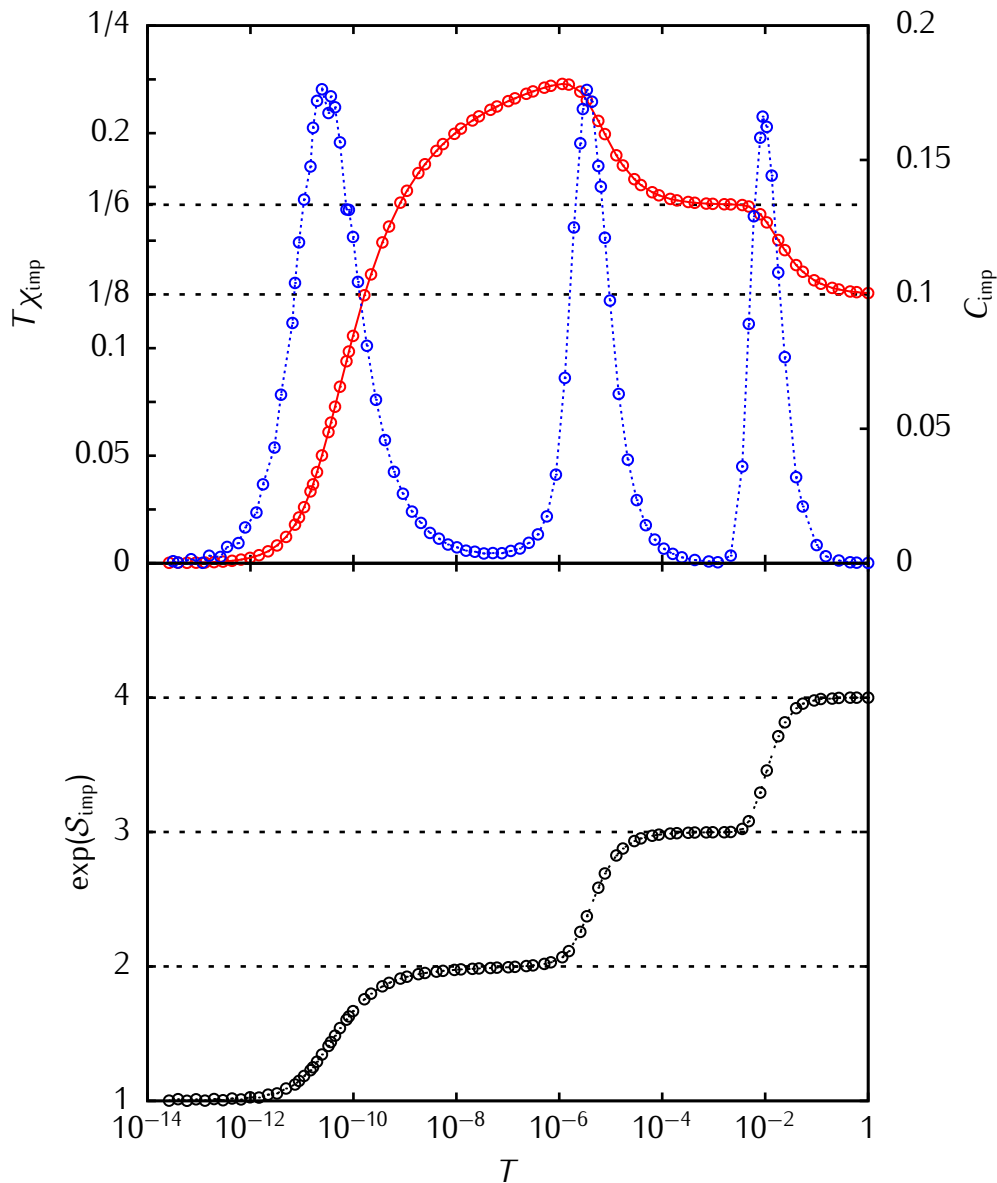


Figura 3.8 – Contribuição da impureza a propriedades termodinâmicas do modelo: $T\chi_{\text{imp}}$ e C_{imp} em função da temperatura no gráfico superior, sendo que o eixo ordenado da esquerda se refere a primeira propriedade e o da direita a segunda. No gráfico inferior, $\exp(S_{\text{imp}})$ em função da temperatura T . Parâmetros: $V = 0.0006$, $U = 0.02$, $\varepsilon_f = -10^{-5}$, $W = 0$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, em unidades da semilargura de banda D .

pontos fixos, para qualquer conjunto de parâmetros.

Em conformidade à seção “O conceito de ponto fixo”, onde assestamos que a nossa abordagem dos pontos fixos seria modesta se comparada às mais completas, utilizamos abaixo, para obter valores de $T\chi_{\text{imp}}$ característicos de cada ponto fixo, uma imagem pictórica da impureza isolada, cujos níveis, especificamente para a escolha de parâmetros da Fig.3.8, estão ilustrados na Fig.3.9. Obviamente, o problema é muito mais complexo. Mas, ainda assim, a representação de quatro estados - vazio, um elétron com *spin up*, um elétron com

spin down e duplamente ocupado - fornece valores de referência de $T\chi_{\text{imp}}$ para cada ponto fixo.

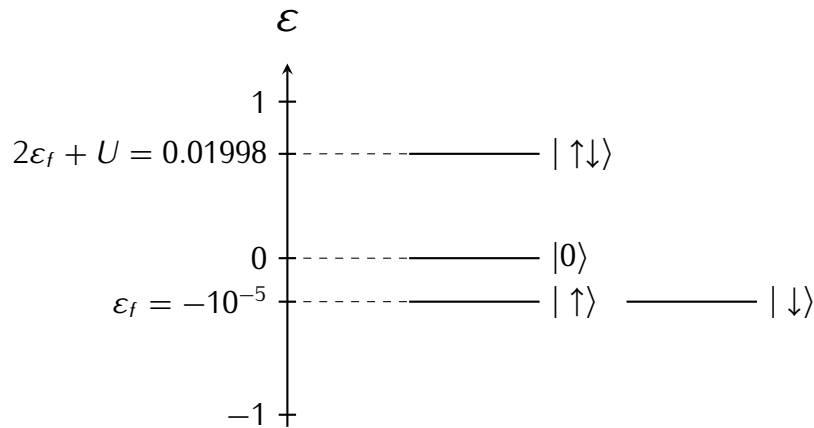


Figura 3.9 – Representação esquemática dos estados acessíveis da impureza isolada para o particular espaço de parâmetros do modelo, cujos valores referentes a impureza são $\varepsilon_f = -10^{-5}$ e $U = 0.02$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, definido como o zero de energia, em unidades da semilargura de banda D , assim como na Fig.2.1.

3.11.1 Ponto fixo de impureza livre

As primeiras iterações, que provêm dados para escalas próximas ao topo da banda, apresentam um ponto fixo caracterizado por $\exp(S_{\text{imp}}) \approx 4$ e $T\chi_{\text{imp}} \approx 1/8$; vide Fig.3.8. Ele recebe o sobrenome “de impureza livre” pois esse valor para $T\chi_{\text{imp}}$ é recuperado se consideramos que a temperatura é suficientemente alta se comparada a ε_f e U , de forma que os quatros estados do nível isolado são igualmente prováveis. De fato, neste caso $\exp(S_{\text{imp}}) = 4$, o que figura um estado vazio com energia zero, um duplamente ocupado com $2\varepsilon_f + U$ e dois de energia ε_f com ocupação unitária; ambos deste último par apresentam momento magnético não nulo. Portanto:

$$T\chi_{\text{imp}} = \frac{0 + 0 + 2 \left(\frac{1}{2}\right)^2 e^{-\beta\varepsilon_f}}{1 + e^{-\beta(2\varepsilon_f+U)} + 2e^{-\beta\varepsilon_f}}. \quad (3.97)$$

No limite de altas temperaturas, em que β é muito pequeno se comparado a ε_f e U , as exponenciais acima tendem a unidade, de modo que o lado direito da Eq.(3.97) se reduz, neste regime, a 1/8. Embasados nisso, definimos o valor característico da suscetibilidade

magnética multiplicada pela temperatura no ponto fixo de impureza livre:

$$T\chi_{\text{imp}} \Big|_{\text{imp.livre}} \equiv \frac{1}{8}, \quad (3.98)$$

o qual, previsivelmente, é associado a

$$\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}}) \Big|_{\text{imp.livre}} = 4. \quad (3.99)$$

O primeiro pico do calor específico - ordenamos os picos em termos do número de iteração ($T_N \propto \Lambda^{-N}$) - indica a transição do comportamento de impureza livre para outro ponto fixo, discutido em seguida.

3.11.2 Ponto fixo de valência flutuante

O ponto fixo seguinte é caracterizado por $T\chi_{\text{imp}} \approx 1/6$ e $\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}}) \approx 3$. Pela exponencial da entropia nota-se que, devido à diminuição do valor da escala de temperatura sob análise, um dos graus de liberdade do nível localizado tornou-se irrelevante. Evidentemente, trata-se daquele com maior energia: o estado duplamente ocupado. Excluindo-o:

$$T\chi_{\text{imp}} = \frac{0 + 2 \left(\frac{1}{2}\right)^2 e^{-\beta\epsilon_f}}{1 + 2e^{-\beta\epsilon_f}}, \quad (3.100)$$

e considerando igualmente prováveis os estados vazio e unicamente ocupados - razão pela qual o ponto fixo é dito "de valência flutuante" -, isto é, degenerados, $\epsilon_f \rightarrow 0$, o lado direito da Eq.(3.100) se reduz a 1/6. Com efeito, definimos o valor característico da suscetibilidade magnética multiplicada pela temperatura no ponto fixo de valência flutuante:

$$T\chi_{\text{imp}} \Big|_{\text{val.flut.}} \equiv \frac{1}{6}, \quad (3.101)$$

o qual é associado a

$$\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}}) \Big|_{\text{val.flut.}} = 3. \quad (3.102)$$

O segundo pico do calor específico mostra a transição do regime de valência flutuante para o de momento local.

3.11.3 Ponto fixo de momento local

Vindo do comportamento de valência flutuante, há a transição para o ponto fixo representado por $\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}}) \approx 2$. Novamente, o abaixamento da escala de energia, com o aumento de N , tornou um dos graus de liberdade não relevante. Supondo $\varepsilon_f < 0$, em nossa imagem pictórica, o estado vazio é dispensável; somente os de momento magnético não nulo são importantes, razão pela qual o ponto fixo recebe a nomenclatura “de momento local”. Portanto:

$$T\chi_{\text{imp}} = \frac{2 \left(\frac{1}{2}\right)^2 e^{-\beta\varepsilon_f}}{2e^{-\beta\varepsilon_f}}, \quad (3.103)$$

que nos faz, similarmente aos anteriores, definir

$$T\chi_{\text{imp}} \Big|_{\text{mom.local}} \equiv \frac{1}{4}, \quad (3.104)$$

grandeza naturalmente associada a

$$\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}}) \Big|_{\text{mom.local}} = 2. \quad (3.105)$$

O terceiro e derradeiro pico de C_{imp} aponta a transição para o último ponto fixo, aquele em que $T\chi_{\text{imp}}$ vai a zero e $\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}})$ à unidade.

3.11.4 Ponto fixo de baixas temperaturas

A medida que a temperatura se aproxima de zero é natural esperar que $T\chi_{\text{imp}} \rightarrow 0$ e $\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}}) \rightarrow 1$. Todavia, o estado remanescente pode ser caracterizado unicamente por uma combinação dos estados com *spin up* e *down*, chamada de singleto de Kondo, ou ainda também ser “contaminado” pelos outros estados, apresentando componentes deles. Ambos os casos tem média do quadrado do momento magnético nula; entretanto, a forma como $T\chi_{\text{imp}}$ vai a zero não é a mesma.

A diferenciação entre as duas possibilidades é feita, na prática, pelo mapeamento entre as suscetibilidades dos modelos de Kondo e Anderson⁹. É possível mostrar que, para certas escolhas de parâmetros, $T\chi_{\text{imp}}$ vai a zero no modelo de Anderson obedecendo

uma função que tem uma correspondente de igual comportamento no modelo de Kondo - o estado sobejante é caracterizado pelo singlete de Kondo. Neste caso, os elétrons da banda de condução formam uma nuvem - a chamada nuvem Kondo - que blinda e isola o nível da impureza, de modo que os elétrons de condução se comportam como líquido de Fermi em baixas temperaturas; isto é, há interações envolvidas no sistema, contudo, nas proximidades do nível da Fermi o comportamento é equivalente ao de um gás de elétrons livres (C e $T\chi$ lineares).

Abaixo, comentamos separadamente cada um dos regimes.

3.11.4.1 Regime universal

Neste caso, o estado em baixas temperaturas apresenta componente provinda do nível da impureza caracterizada pelo singlete de Kondo. Nas redondezas do nível Fermi, $T\chi_{\text{imp}}$ obedece à função mencionada no preâmbulo da seção 3.11.4, denominada universal. Há várias maneiras dela ser obtida; uma alternativa é o mapeamento entre as suscetibilidades dos Hamiltonianos de Kondo e Anderson, procedimento adotado por Krishna-murthy et al⁹, cujo resultado, apresentado na tabela V do referido trabalho, é utilizado nesta dissertação.

O termo “universal” provém de que quando, nas vizinhanças do nível de Fermi, o sistema obedece à curva universal, o modelo apresenta somente uma escala de grandeza característica, T_K , chamada temperatura de Kondo. Dado T_K , a curva de suscetibilidade a baixas temperaturas é completamente determinada.

Inicialmente, a determinação de T_K para uma dada curva $T\chi_{\text{imp}}$ versus T é feita através da translação dela no eixo das abcissas até que coincida com a universal.

Na Fig.3.10 apresentamos os pontos para $T\chi_{\text{imp}}$ da Fig.3.8 transladados, de modo que, em baixas temperaturas, sejam equivalentes à curva universal.

Outra opção seria observar primeiramente que na curva universal $T\chi_{\text{imp}} = 0.071$ em $T = T_K$; por conseguinte, poderíamos obter a temperatura de Kondo interpolando no conjunto de pontos obtido o valor de T para o qual $T\chi_{\text{imp}} = 0.071$. Assim, uma opção seria transladar a curva universal ao invés dos dados prévios - foi o que fizemos no Capítulo 4, intitulado “Resultados numéricos”, razão pela qual em todas as curvas daquele capítulo o eixo das abcissas é caracterizado por T e não T/T_K . Esta escolha foi feita para melhor

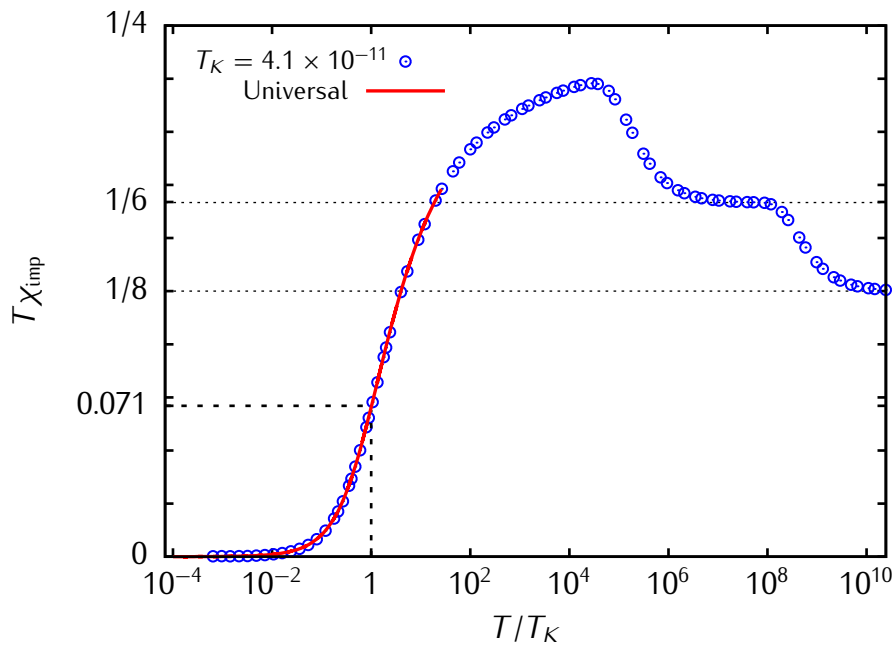


Figura 3.10 – Comparação entre a curva universal e os dados de $T\chi_{\text{imp}}$ em função da temperatura, reescalados por $T_K = 4.1 \times 10^{-11}$, para os mesmos parâmetros da Fig.3.8: $V = 0.0006$, $U = 0.02$, $\varepsilon_f = -10^{-5}$, $W = 0$. Novamente, todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, em unidades da semilargura de banda D .

visualização das curvas separadamente.

Nesta seção, em contrapartida a frase final do parágrafo precedente, o interesse é evidenciar o chamado comportamento “universal”. Na Fig.3.11, ilustrativamente, expomos outros dados de suscetibilidade, obtidos por parâmetros diversos, enfatizando a similaridade das curvas em baixas temperaturas, independentemente da forma diversa com que os pontos se portam em escalas de energia mais altas.

3.11.4.2 Regime não universal

No regime não universal, o estado remanescente em baixas temperaturas é “contaminado” pelo estado vazio ou pelo duplamente ocupado, ou ainda por ambos (a definição de qual apresenta componente majoritária depende dos parâmetros do modelo). Neste caso, $T\chi_{\text{imp}}$ não apresenta o comportamento universal indicado na Fig.3.10. Atráves do mesmo procedimento anterior, no qual interpolamos o valor de T para o qual $T\chi_{\text{imp}} = 0.071$ e transladamos uma das curvas, notamos a não universalidade. A Fig.3.12 apresenta um exemplo de tal situação.

Em nossos resultados numéricos, apresentados no Capítulo 4, seguindo as instruções

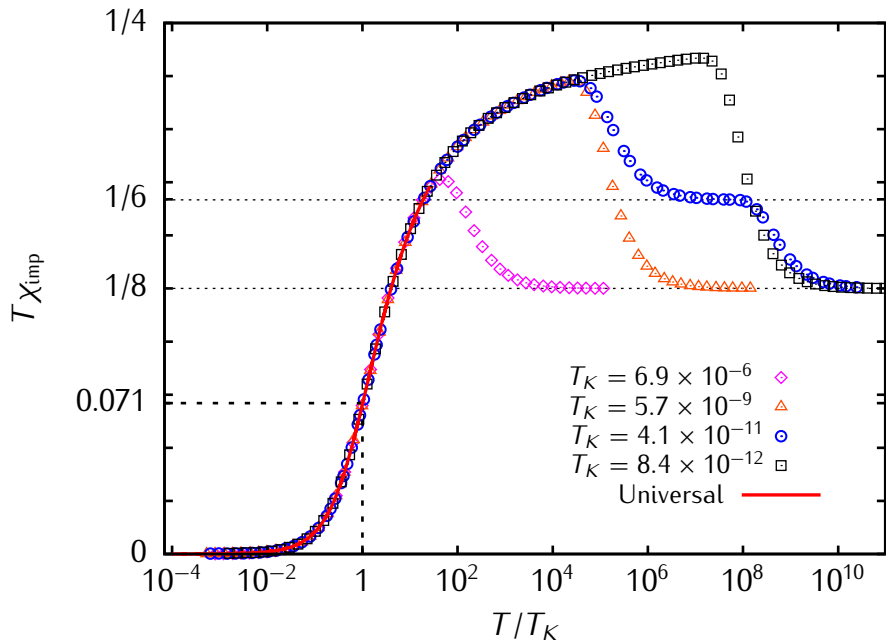


Figura 3.11 – Exemplo de um conjunto de curvas $T\chi_{\text{imp}}$ versus T que apresenta comportamento universal em baixas temperaturas. Em cada uma delas escolhemos diferentes parâmetros V , W , ε_f e U ; conseqüentemente, cada uma é caracterizada por um valor diferente de T_K .

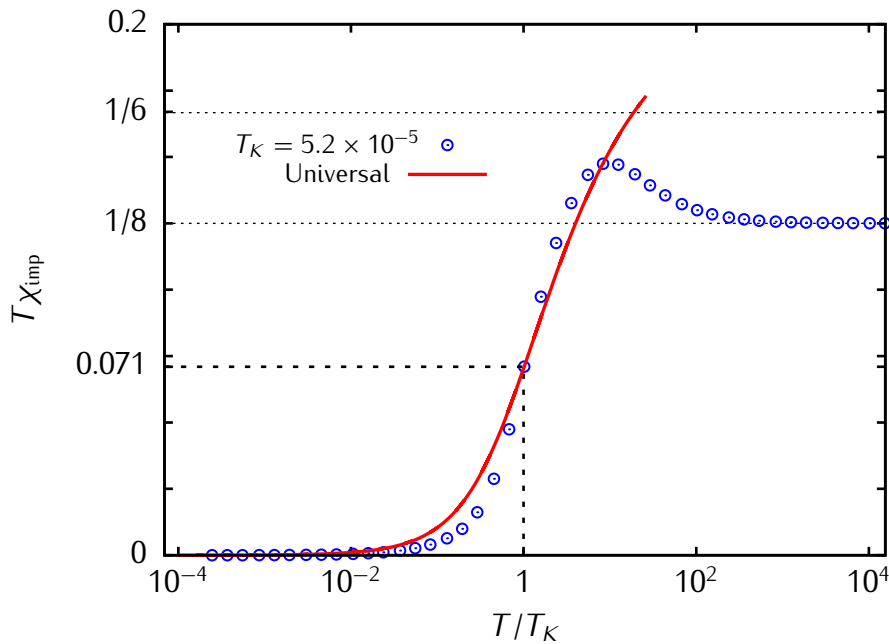


Figura 3.12 – Comparação entre a curva universal e os dados de $T\chi_{\text{imp}}$ em função da temperatura, reescalados por $T_K = 5.1 \times 10^{-5}$, para um conjunto de parâmetros em que $T\chi_{\text{imp}}$ não segue o comportamento universal em baixas temperaturas.

desta seção analisaremos o efeito do termo de hibridização correlacionada sobre a universalidade – esta, é tipicamente presente (exceto quando V é muito grande se comparado aos outros parâmetros do modelo) no caso do modelo simétrico, isto é $2\varepsilon_f + U = W = 0$.

3.12 Removendo oscilações espúrias: a média em z

Em modelos de impureza quântica mais complexos, como o de Kondo ou o de Anderson com dois canais de hibridização³¹, ou modelos envolvendo mais de uma impureza³, o espaço de Hilbert em cada iteração do GRN cresce mais rapidamente do que aquele relativo a modelos mais simples, de apenas um nível localizado e um canal. Inclusive nestes, grupo a que o Hamiltoniano deste trabalho pertence, a dimensionalidade do espaço de Hilbert já é amiúde considerável. O custo computacional em tais situações, poderia, em tese, ser compensado pela elevação do valor de Λ . Entretanto, valores muito altos para Λ afastam a técnica do limite do contínuo ($\Lambda \rightarrow 1$), ou seja, da situação física real. Ademais, aumentam o efeito de oscilações espúrias, provenientes da discretização logarítmica, nas propriedades termodinâmicas – no caso de $T_{\chi_{\text{imp}}}$ as oscilações tem amplitude que cresce com Λ pelo fator $\exp(-\pi^2/\log \Lambda)$ e frequência próxima a $\log \Lambda$, mais proeminentes em baixas temperaturas³⁰.

Uma alternativa pouco custosa em termos computacionais, de aplicação quase imediata e muito bem sucedida, a esse conflito é a introdução de outro parâmetro de discretização – o qual surgiu inicialmente no contexto do cálculo de propriedades dinâmicas^{32–36}, depois utilizado também em propriedades estáticas^{28,30}, arbitrário no intervalo $0 < z \leq 1$. Na Fig.3.13, em contraposição à Fig.3.2, exibimos a discretização com a inclusão de z .

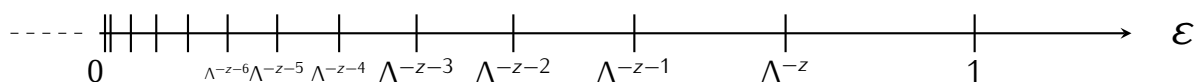


Figura 3.13 – Discretização logarítmica do domínio da função de hibridização do banho por meio de dois parâmetros: $\Lambda > 1$ e $0 < z \leq 1$. Apesar de mostrarmos somente a região $\varepsilon > 0$, a discretização é simétrica com relação a $\varepsilon = 0$. Note que para $z = 1$ a discretização apresentada na Fig.3.2 é recuperada.

Novamente temos um conjunto de intervalos, porém com pontos de discretização de-

pendentes de z :

$$x_{n,z} = \pm \Lambda^{-n-z} \quad , \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad , \quad (3.106)$$

em que z é um número real escolhido arbitrariamente no intervalo $0 < z \leq 1$; para $z = 1$ a discretização tradicional, mostrada na Fig.3.2 e com pontos de discretização dados pela Eq.(3.6), é recuperada.

Apesar deste novo personagem, todo o procedimento, principiado na seção 3.2, é feito retrospectivamente de forma análoga, com a substituição $\Lambda^{-n} \rightarrow \Lambda^{-n-z}$, para $n \geq 1$, o que tem por efeito que qualquer quantidade dependente de Λ também o será de z .

Naturalmente, se para um determinado Λ a propriedade física calculada apresenta inoportunas oscilações, a inclusão de um z fixo não as elimina, visto que, dentro do intervalo $0 < z \leq 1$, ela somente redefine a discretização - coloquialmente, diríamos que ela a arrasta³⁰ - como se estivéssemos utilizando um outro Λ . Justamente devido à defasagem ao se utilizar diferentes valores de z para um dado Λ , não é absurda a esperança de que a integração no novo parâmetro de uma propriedade física, função de T e de z , elimine as incômodas e inaceitáveis oscilações. Tal integração deve ser feita de forma numérica e, surpreendentemente, a chamada regra do trapézio, a mais simplista dentre as aproximações, já é bastante satisfatória. Abaixo a apresentamos com dois pontos particulares, utilizando como exemplo $T_{\chi_{\text{imp}}}$:

$$\begin{aligned} T_{\chi_{\text{imp}}}(T) &= \int_0^1 dz T_{\chi_{\text{imp}}}(T, z) \\ &\approx T_{\chi_{\text{imp}}}(T, z = 1)(1 - 0.5) + T_{\chi_{\text{imp}}}(T, z = 0.5)(0.5 - 0) \quad , \end{aligned} \quad (3.107)$$

o que é simplesmente a média

$$T_{\chi_{\text{imp}}}(T) \approx \frac{T_{\chi_{\text{imp}}}(T, z = 1) + T_{\chi_{\text{imp}}}(T, z = 0.5)}{2} \quad , \quad (3.108)$$

razão pela qual parte do título desta seção é “média em z ”.

Utilizando $\Lambda = 5$, valor relativamente alto em algumas situações, e também a Eq.(3.108), exibimos na Fig.3.14 um exemplo no contexto do modelo de Anderson de uma impureza, tanto para a suscetibilidade magnética quanto para a entropia, da eficiência do uso do parâmetro z - é apenas um exemplo, pois as oscilações dependem do modelo e, além disso,

de seus parâmetros, juntamente com escolhas do GRN: Λ e o corte. Ao invés de expor as dependências com T sobre toda a banda, restringimos a escala, para melhor visualização, a uma região de baixa temperaturas, onde as oscilações são mais evidentes.

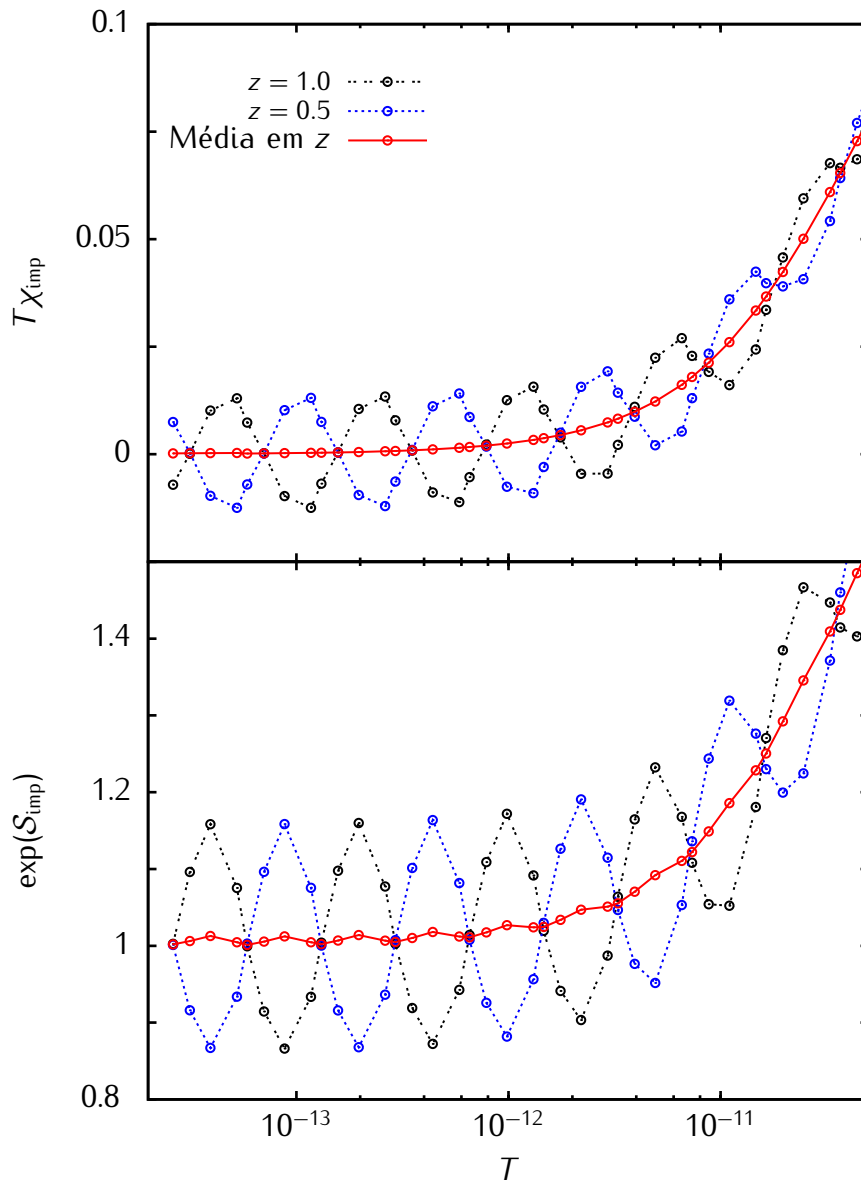


Figura 3.14 – Exemplo da eficiência do uso do parâmetro z na melhora dos resultados para $T\chi_{\text{imp}}$ e $\exp(S_{\text{imp}})$, utilizando $\Lambda = 5$ e dois valores do novo parâmetro z : $z = 0.5$ e $z = 1$. Quanto aos parâmetros do modelo, $V = 0.0006$, $U = 0.02$, $\varepsilon_f = -10^{-5}$, $W = 0$.

Quanto à exemplificação do poder de suavização das oscilações que tem o procedimento enunciado acima, a Fig.3.14 é bastante clara. Todavia, ela incita alguns comentários. As oscilações dependem da propriedade termodinâmica considerada. São mais suaves para $T\chi_{\text{imp}}$ do que para $\exp(S_{\text{imp}})$ e, nesta última, a despeito das oscilações na Fig.3.14 serem irrelevantes na escala $1 \leq \exp(S_{\text{imp}}) \leq 4$ (que será a escala sob análise nos resultados numéricos, relativa aos quatro estados permitidos no nível localizado), seria necessário o

uso de mais valores de z para eliminar completamente as oscilações.

Existem situações mais complexas em que mais de uma dezena de valores de z é exigida para amenizar satisfatoriamente as oscilações; até no modelo de Anderson de uma impureza, o calor específico as apresenta bem mais fortes se comparadas às da suscetibilidade magnética ou da entropia, devido ao fator $1/T^2$, problemático em baixas temperaturas, quando $T \rightarrow 0$, o que requisita o aumento do conjunto de valores de z ou a diminuição de Λ .

Nesta dissertação, na apresentação dos resultados numéricos no Capítulo 4, trabalhamos sempre com Λ suficientemente baixo para que quaisquer cálculos envolvendo a dependência de qualquer propriedade termodinâmica com a temperatura fossem feitos como no exemplo acima, com dois valores de z (mais especificamente $z = 0.5$ e $z = 1$), sendo o resultado final obtido por uma média como a da Eq.(3.108).

CAPÍTULO 4

RESULTADOS NUMÉRICOS

Depois do prefácio feito no capítulo introdutório, da articulação realizada no segundo capítulo, com o estabelecimento do modelo e a apresentação do termo adicional, do extenso discurso sobre o GRN do capítulo anterior, atingimos, finalmente, o ponto em que uma grande porção das informações precedentes são confluídas.

Servindo-se do GRN expomos nas páginas seguintes alguns resultados que visam a análise da influência do termo dado pela Eq.(2.3) sobre parte da física do modelo de Anderson de uma impureza – sempre sob as condições enunciadas na seção 3.5. Em especial, por meio de um estudo qualitativo, os efeitos do termo adicional sobre as transições entre os pontos fixos característicos do modelo, estudadas por meio da contribuição da impureza em função da temperatura à suscetibilidade magnética, $T\chi_{imp}$, ao calor específico, C_{imp} , e à entropia, $\exp(\mathcal{S}_{imp})$.

Em cada uma das figuras apresentadas, o espaço de parâmetros tradicional do modelo (V, U, ε_f) – grandezas sempre medidas com relação ao nível de Fermi e em unidades da semilargura de banda D –, indicado nas respectivas legendas, é mantido fixo, enquanto que W pode assumir tanto valores positivos quanto negativos. Com relação aos parâmetros do grupo de renormalização numérico, tomamos sempre $\Lambda = 3.5$ e energia de corte $\varepsilon_{cut} = 20$. Tal escolha representaria no topo da banda ($T_N \approx 1$) o descarte das contribuições para a função de partição com ordens de grandeza menores ou iguais a 10^{-9} :

$$e^{-20} \sim 10^{-9} . \quad (4.1)$$

Obviamente, como para energias próximas a ε_{cut} as contribuições à função de partição são dadas aproximadamente por $\exp(-\varepsilon_{\text{cut}}/T_N)$, a medida que a temperatura diminui (quando de fato o corte passa a atuar, pois nas primeiras iterações todos os níveis do espectro apresentam energia menor que ε_{cut}) menos ordens de grandeza são desprezadas, garantindo cada vez mais a condição dada pela Eq.(3.80).

Além disso, em consonância ao que sentenciamos no capítulo anterior, sempre utilizamos $z = 0.5$ e $z = 1$ na obtenção dos dados numéricos, aplicando às três propriedades sob estudo a média exemplificada na Eq.(3.108) para $T_{\chi_{\text{imp}}}$.

Salientamos que, por opção, sempre apresentamos $T_{\chi_{\text{imp}}}$ e C_{imp} acompanhados da respectiva curva de $\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}})$. Esta, conforme afirmamos anteriormente, representa o número de graus de liberdade da impureza efetivamente acoplados ao banho e é a grandeza mais direta na identificação de um ponto fixo. Quando apresentada simultaneamente a $T_{\chi_{\text{imp}}}$ e C_{imp} evidencia o comportamento destes em regiões de pontos fixos e transições.

Agora, vamos de fato à análise dos dados.

4.1 Parâmetros: $V = 0.005$, $U = 0.002$ e $\varepsilon_f = -0.001$

Iniciamos com a escolha particular e arbitrária de parâmetros do modelo: $V = 0.005$, $U = 0.002$ e $\varepsilon_f = -0.001$. Na Fig.4.1 expomos, ilustrativamente, um diagrama dos estados acessíveis do nível da impureza isolado relativo à essa escolha.

Na Fig.4.2 apresentamos $T_{\chi_{\text{imp}}}$ e $\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}})$ em função da temperatura T para seis valores diversos de W .

Primeiramente, salientamos que, a despeito da clara presença do ponto fixo de impureza livre ($\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}}) \rightarrow 4$) em todas as situações da Fig.4.2, o de valência flutuante ($\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}}) \rightarrow 3$) praticamente inexistente, independentemente dos valores escolhidos para W . Pode-se pensar que tal comportamento é evidente e previsível, pois segundo a discussão referente à Eq.(3.101), em tal ponto fixo os níveis vazio e unicamente ocupados são aproximadamente degenerados e, contrariamente, na Fig.4.2 trabalhamos com $\varepsilon_f \neq 0$. Contudo, como observaremos na seção 4.3, a opção de $\varepsilon_f = 0$ não favorece necessariamente o regime caracterizado por $T_{\chi_{\text{imp}}}$ igual a $1/6$ e $\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}})$ igual a 3. Na verdade, é possível

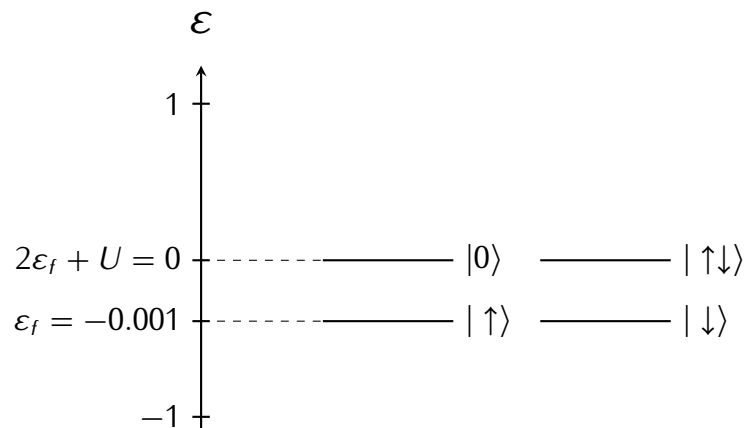


Figura 4.1 – Representação esquemática dos estados acessíveis da impureza isolada para o particular espaço de parâmetros do modelo, cujos valores referentes a impureza são $\varepsilon_f = -0.001$ e $U = 0.002$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, definido como o zero de energia, em unidades da semilargura de banda D , assim como na Fig.2.1.

visualizá-lo sem essa escolha, conforme mostraremos na seção 4.4. A hibridização define um tempo de vida dos estados unicamente ocupados e, conseqüentemente, uma largura de linha, dependente dos parâmetros do modelo e da temperatura^{9,10}. Portanto, efetivamente, os níveis de ocupação única apresentam energia ε_f^* , diferente de ε_f – apesar das imagens, naturalmente alegóricas, das Figs.2.1 e 2.2. Assim, para uma certa escolha de parâmetros e a determinada temperatura T é, em princípio, possível que o sistema permaneça – por algumas escalas de temperatura – no ponto fixo de valência flutuante, mesmo sem a escolha preliminar de $\varepsilon_f = 0$.

Mais especificamente no que concerne ao termo adicional, visto que $W = 0$ é representado na Fig.4.2 pelos símbolos triangulares pretos, notabilizamos o quão drástica é a influência da hibridização correlacionada. Valores positivos de W prolongam a permanência do sistema no ponto fixo de momento local ($\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}}) \rightarrow 2$), ao passo que negativos aceleram a tendência $T\chi_{\text{imp}} \rightarrow 0$, característica do ponto fixo de baixas temperaturas ($\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}}) \rightarrow 1$).

Como a hibridização efetiva, além de dependente de V , o é de $|V - W|$, valores positivos de W privilegiam o comportamento de momento local, em que a correlação é suficientemente forte para que o estado duplamente ocupado do nível da impureza seja irrelevante. Por sua vez, valores negativos de W amplificam os efeitos da hibridização

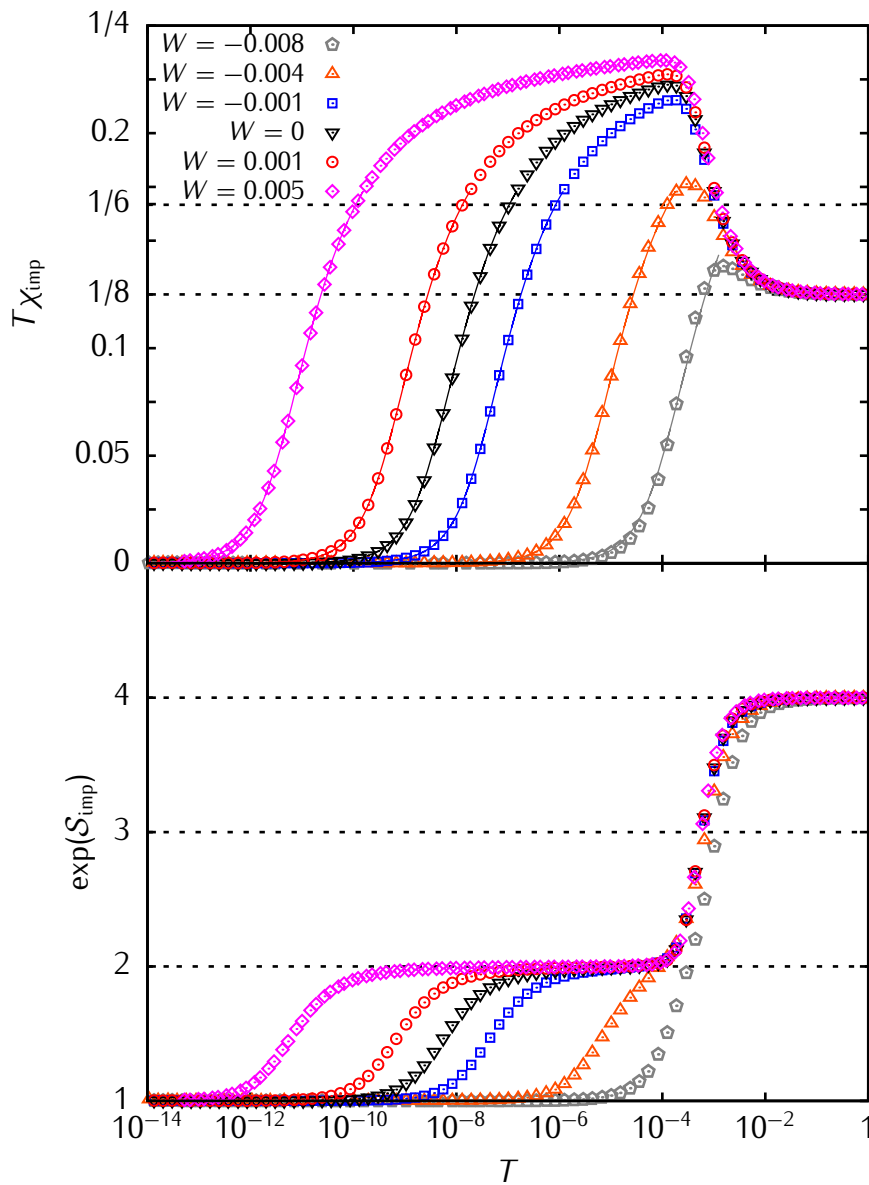


Figura 4.2 – Contribuição da impureza a propriedades termodinâmicas do modelo: $T\chi_{imp}$ e $\exp(S_{imp})$ em função da temperatura T . Parâmetros do modelo: $V = 0.005$, $U = 0.002$, $\varepsilon_f = -0.001$. Parâmetros do grupo de renormalização numérico: $\Lambda = 3.5$; procedimento intercalado com $z = 1$ e $z = 1/2$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, em unidades da semilargura de banda D .

e, comparativamente, diminuem os de correlação. Claramente, eles desfavorecem a permanência do sistema no regime de momento local. Quanto mais negativo for W , mais rapidamente $T\chi_{imp}$ atinge o ponto fixo de baixas temperaturas, caracterizado pelo curto tempo de vida de uma partícula no nível localizado, e, conseqüentemente, pela média nula do quadrado do momento magnético. De fato, notamos que a hibridização depende de $|V - W|$ - assim como nos autovalores de \mathcal{H}_0 , apresentados na seção 3.6. Quanto maior o valor deste módulo, mais velozmente temos $T\chi_{imp} \rightarrow 0$ e $\exp(S_{imp}) \rightarrow 1$. Em suma, valores positivos de W (da mesma ordem de V) diminuem a hibridização, fazendo com que os

efeitos de correlação sejam amplificados; valores negativos atuam de forma contrária.

Com relação à universalidade, discutida genericamente na seção 3.11.4, as linhas contínuas nas curvas de $T\chi_{\text{imp}}$ versus T da Fig.4.2 representam a curva universal (apresentada primeiramente na Fig.3.10) transladada pelo valor de T_K referente a cada um dos conjuntos de pontos. Observa-se que, a menos do caso em que $W = -0.008$, todos os dados respeitam o comportamento universal em baixas temperaturas. Portanto, a inclusão da hibridização correlacionada, dependendo de seu valor e da escolha dos demais parâmetros, é capaz de retirar o sistema do regime de universalidade em baixas temperaturas.

Na Fig.4.3 apresentamos, para os mesmos parâmetros da Fig.4.2, a contribuição da impureza ao calor específico, em função da temperatura, juntamente com $\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}})$ compartilhando o eixo das abcissas.

Comparando os dados de C_{imp} com os de $\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}})$, nota-se que cada pico do calor específico está relacionado a uma transição entre pontos fixos. Se, para um determinado conjunto de parâmetros, o sistema exibisse todos os pontos fixos, e, conseqüentemente, $\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}})$ as transições $4 \rightarrow 3$, $3 \rightarrow 2$, $2 \rightarrow 1$, a curva de calor específico apresentaria três picos de mesmo valor máximo ($C_{\text{imp}} \approx 0.2$), cada um representando uma das transições. Picos mais altos se comparados aos que apresentam topo próximo a 0.2 são relativos à superposição de picos menores. Isto ocorre quando mais de um grau de liberdade da impureza torna-se irrelevante em uma curta faixa de temperaturas. Na Fig.4.3 nota-se claramente que os picos mais altos estão relacionados à transição direta $\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}}) = 4 \rightarrow 2$. Os picos mais baixos são relativos à transição $\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}}) = 2 \rightarrow 1$.

4.2 Parâmetros: $V = 0.003$, $U = 0.001$ e $\varepsilon_f = -0.001$

Agora, continuando nossa análise, optamos arbitrariamente por $V = 0.003$, $U = 0.001$ e $\varepsilon_f = -0.001$. Similarmente à seção anterior, mostramos na Fig.4.4, esquematicamente, um diagrama dos estados acessíveis do nível da impureza isolado relativo à escolha de parâmetros atual.

Na Fig.4.5 apresentamos $T\chi_{\text{imp}}$ e $\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}})$ em função da temperatura T para cinco valores diversos de W .

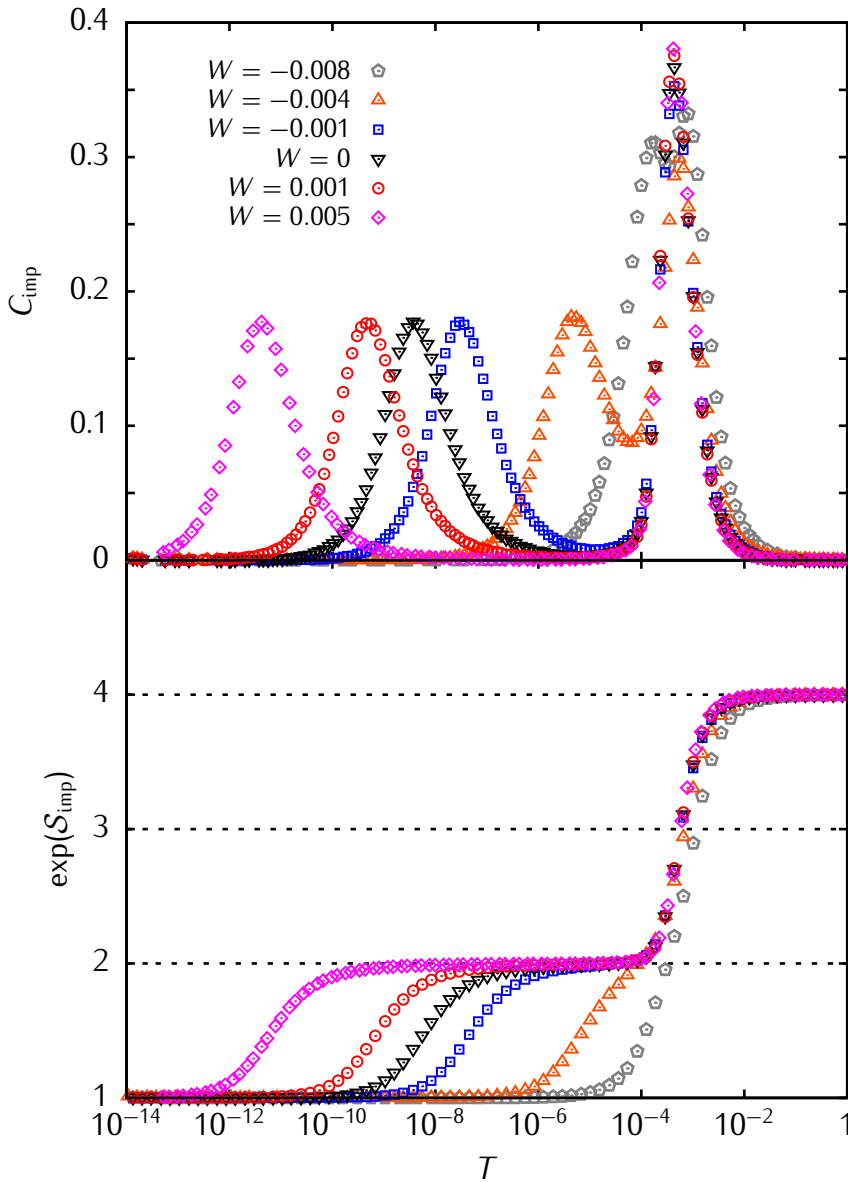


Figura 4.3 – Contribuição da impureza a propriedades termodinâmicas do modelo: C_{imp} e $\exp(S_{\text{imp}})$ em função da temperatura T . Parâmetros do modelo: $V = 0.005$, $U = 0.002$, $\varepsilon_f = -0.001$. Parâmetros do grupo de renormalização numérico: $\Lambda = 3.5$; procedimento intercalado com $z = 1$ e $z = 1/2$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, em unidades da semilargura de banda D .

Novamente as tendências apontadas na Fig.4.2 são respeitadas, mesmo com uma curva base para comparação, a $W = 0$, totalmente diferente. Valores positivos de W permanecem privilegiando o ponto fixo de momento local ($\exp(S_{\text{imp}}) \rightarrow 2$), acentuando os efeitos de correlação, enquanto que negativos beneficiam a hibridização, acelerando a tendência da média do quadrado do momento magnético se anular em baixas temperaturas. Ademais, nota-se novamente que a hibridização depende de $|V - W|$, quanto maior este módulo, mais forte o acoplamento entre a banda de condução e a impureza, e menor o tempo de vida de uma partícula no nível localizado. Por consequência, mais rapidamente o número

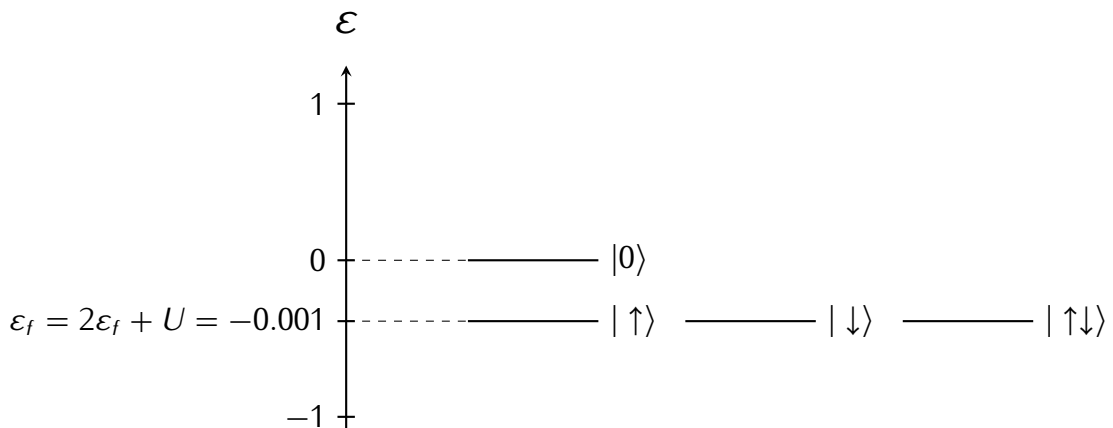


Figura 4.4 – Representação esquemática dos estados acessíveis da impureza isolada para o particular espaço de parâmetros do modelo, cujos valores referentes a impureza são $\varepsilon_f = -0.001$ e $U = 0.001$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, definido como o zero de energia, em unidades da semilargura de banda D , assim como na Fig.2.1.

de graus de liberdade da impureza efetivamente acoplados ao banho tende a unidade e $T\chi_{\text{imp}} \rightarrow 0$.

Assim como na Fig.4.2, as linhas contínuas na Fig.4.5 representam a curva universal transladada. Na primeira percebemos que W pode retirar o sistema do comportamento universal. Contrariamente, na segunda notamos que a inserção de $W \neq 0$ tem a habilidade de fazer com que o sistema, para um mesmo conjunto (V, U, ε_f) , abandone a não universalidade característica de $W = 0$.

Na Fig.4.6 apresentamos, para os mesmos parâmetros da Fig.4.5, a contribuição da impureza ao calor específico, em função da temperatura, juntamente com $\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}})$ compartilhando o eixo das abcissas.

Como, com a exceção de $W = 0.004$, para a presente escolha de (V, U, ε_f) os valores de $\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}})$ vão rapidamente de 4 a 1, os picos do calor específico estão concentrados em temperaturas mais próximas ao topo da banda, se comparados aos da Fig.4.3. Os triângulos laranjas, relativos à $W = -0.004$, mostram apenas um pico, relativo à transição direta $\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}}) = 4 \rightarrow 1$ devida à forte hibridização introduzida pelo termo $|V - W|$, fazendo com que a correlação seja desprezível. Por outro lado, os outros conjuntos de dados mostram mais de um pico, todos menores se comparados ao referente a $W = -0.004$. Isso ocorre, sobretudo, com os representados pelos círculos vermelhos e pelos losangos roxos

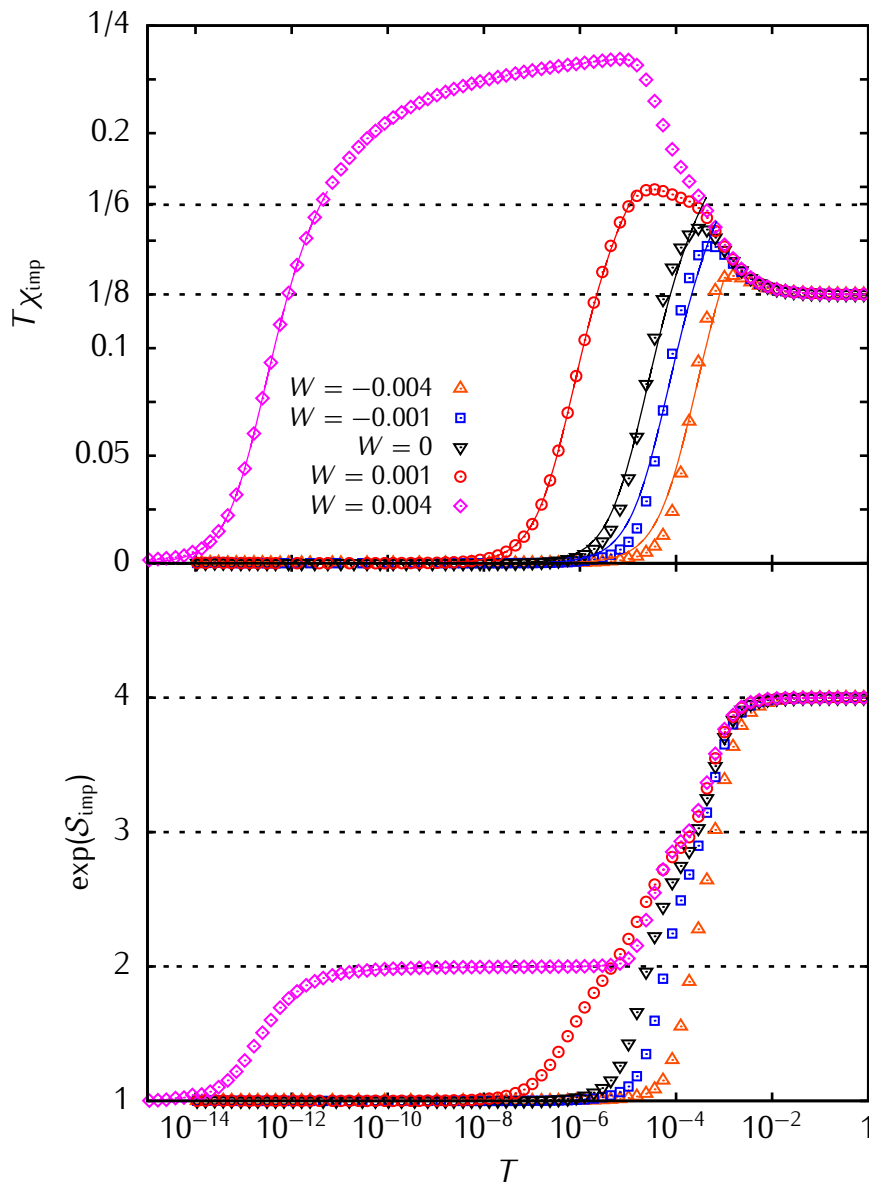


Figura 4.5 – Contribuição da impureza a propriedades termodinâmicas do modelo: $T\chi_{\text{imp}}$ e $\exp(S_{\text{imp}})$ em função da temperatura T . Parâmetros do modelo: $V = 0.003$, $U = 0.001$, $\varepsilon_f = -0.001$. Parâmetros do grupo de renormalização numérico: $\Lambda = 3.5$; procedimento intercalado com $z = 1$ e $z = 1/2$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, em unidades da semilargura de banda D .

- $W = 0.001$ e $W = 0.004$, respectivamente - por apresentarem transições mais suaves entre os pontos fixos, se comparadas às relativas a $W = -0.004$, $W = -0.001$ e $W = 0$.

4.3 Parâmetros: $V = 0.001$, $U = 0.001$ e $\varepsilon_f = 0$

Em seguida, trabalhamos no espaço de parâmetros do modelo caracterizado por $V = 0.001$, $U = 0.001$ e $\varepsilon_f = 0$. Neste caso, os estados vazio e unicamente ocupados do

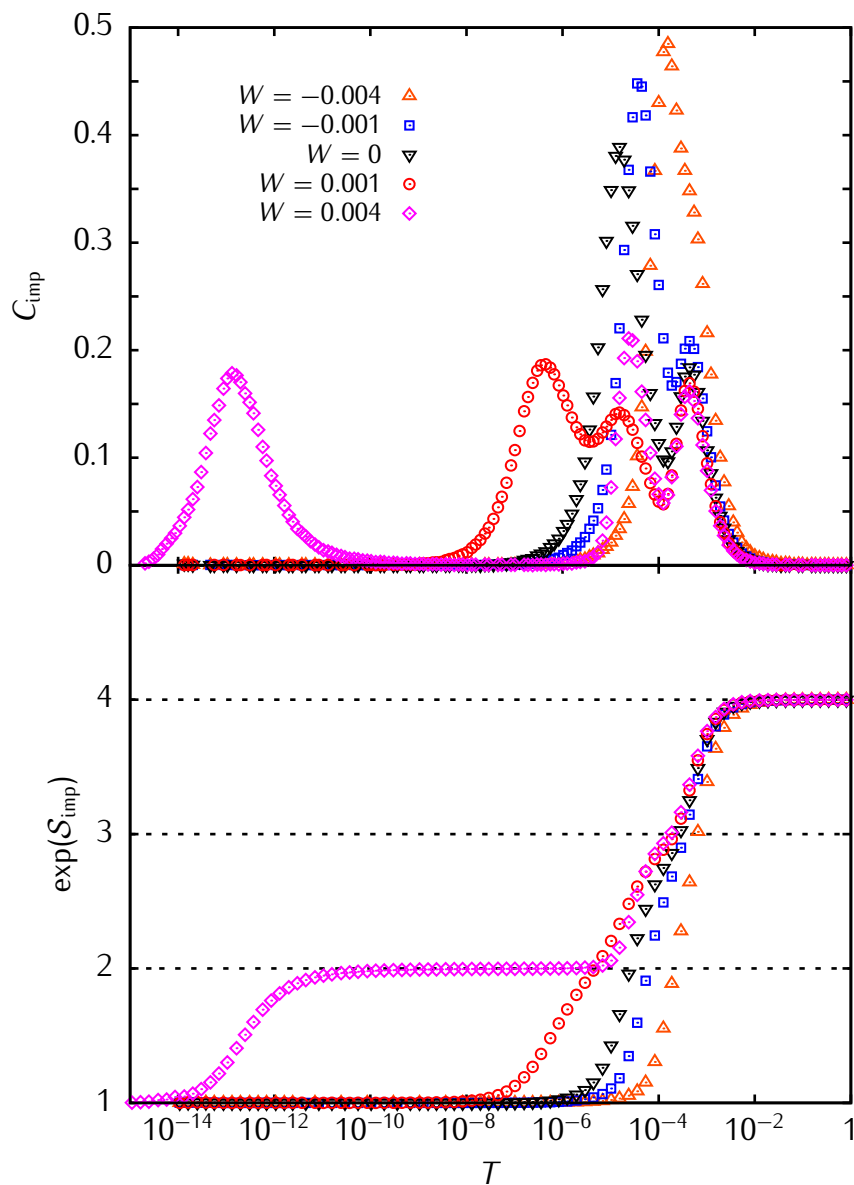


Figura 4.6 – Contribuição da impureza a propriedades termodinâmicas do modelo: C_{imp} e $\exp(S_{\text{imp}})$ em função da temperatura T . Parâmetros do modelo: $V = 0.003$, $U = 0.001$, $\varepsilon_f = -0.001$. Parâmetros do grupo de renormalização numérico: $\Lambda = 3.5$; procedimento intercalado com $z = 1$ e $z = 1/2$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, em unidades da semilargura de banda D .

nível da impureza isolado são degenerados. Novamente, apresentamos um diagrama dos estados acessíveis do nível da impureza isolado relativo à presente escolha de parâmetros. Tal diagrama é exposto na Fig.4.7.

Na Fig.4.8 voltamos a expor $T\chi_{\text{imp}}$ e $\exp(S_{\text{imp}})$ em função da temperatura T para cinco valores diversos de W .

Em reflexão a algumas asserções da seção 4.1, principiamos a presente discussão, alicerçada na Fig.4.8, com o ponto fixo de valência flutuante. Mesmo com a escolha inicial

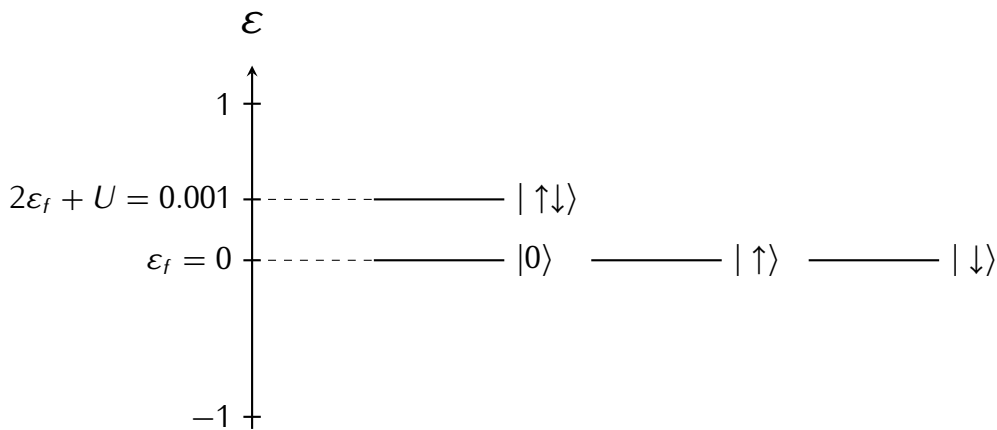


Figura 4.7 – Representação esquemática dos estados acessíveis da impureza isolada para o particular espaço de parâmetros do modelo, cujos valores referentes a impureza são $\varepsilon_f = 0$ e $U = 0.001$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, definido como o zero de energia, em unidades da semilargura de banda D , assim como na Fig.2.1.

de $\varepsilon_f = 0$, ele não aparece em praticamente todos os conjuntos de dados; com a exceção de uma sutil tendência daquele com $W = 0$, representado por losangos roxos, à $T\chi_{\text{imp}} = 1/6$ e à $\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}}) \rightarrow 3$. Tal ausência sustenta o enunciado da seção 4.1, que afirmava que $\varepsilon_f = 0$ não privilegia necessariamente o comportamento de valência flutuante, pois, efetivamente, no problema de muitos corpos, os níveis unicamente ocupados apresentam energia ε_f^* - dependente de T e dos parâmetros do modelo - diversa de ε_f .

Mais especificamente com relação à variação do valor de W , novamente o termo adicional privilegia o ponto fixo de momento local. Contudo, em oposição ao observado nas duas seções precedentes, tanto valores positivos quanto negativos promovem as tendências de momento local $T\chi_{\text{imp}} \rightarrow 1/4$ e $\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}}) = 2$, isto é, amplificam os efeitos de correlação.

Outro ponto curioso que emerge na Fig.4.8 é a dependência $|V - W|$ da hibridização. Assim como nos casos anteriores, quanto maior o valor deste módulo, mais rapidamente o sistema atinge o ponto fixo de baixas temperaturas, com exceção da curva relativa à $W = 0$. Esta, surpreendentemente, é a que tem o menor valor para $|V - W|$, no entanto é a que apresenta $T\chi_{\text{imp}} \rightarrow 0$ - comportamento característico de forte acoplamento entre banda de condução e impureza - em escalas mais altas de temperatura.

Semelhantemente às Figs.4.2 e 4.5, as linhas contínuas na Fig.4.8 representam a curva universal transladada por T_K , obtido pela condição $T_K\chi_{\text{imp}} = 0.071$ em cada conjunto

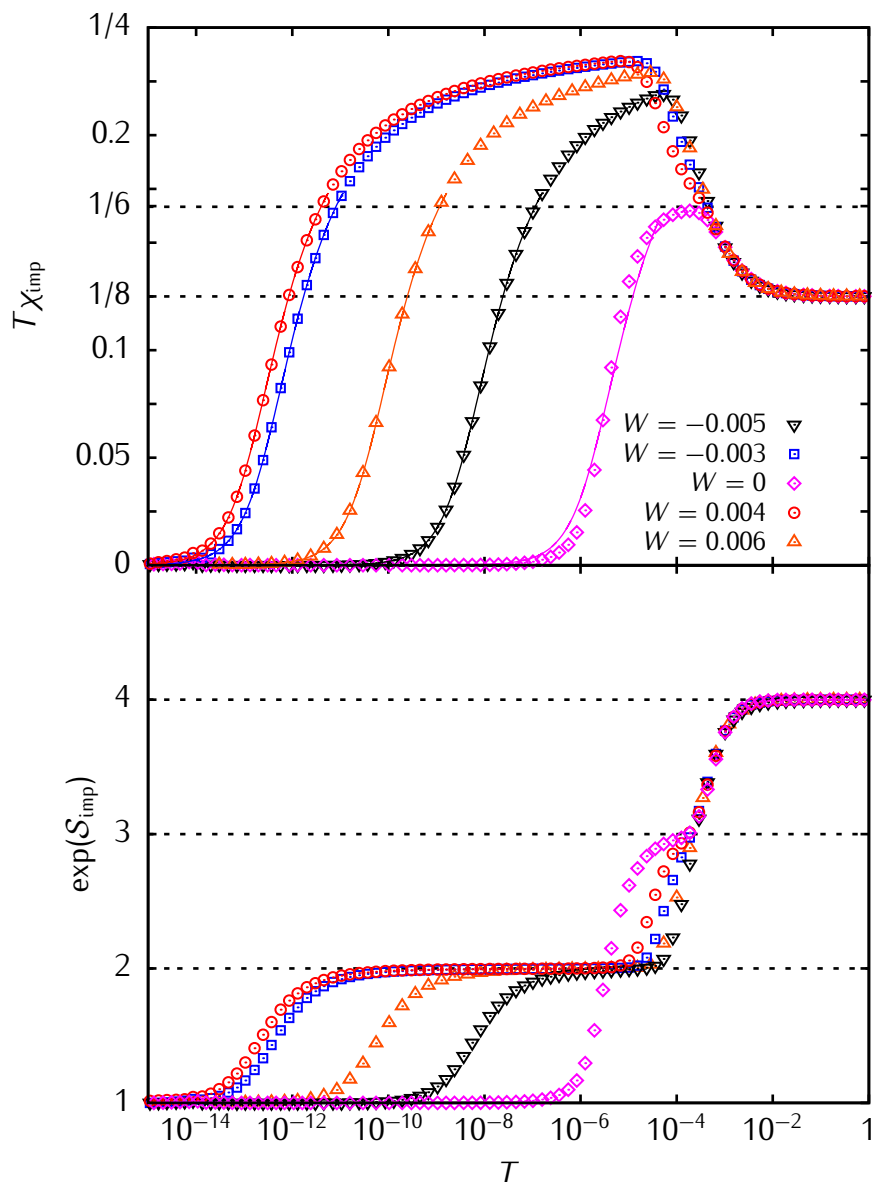


Figura 4.8 – Contribuição da impureza a propriedades termodinâmicas do modelo: $T\chi_{\text{imp}}$ e $\exp(S_{\text{imp}})$ em função da temperatura T . Parâmetros do modelo: $V = 0.001$, $U = 0.001$, $\varepsilon_f = 0$. Parâmetros do grupo de renormalização numérico: $\Lambda = 3.5$; procedimento intercalado com $z = 1$ e $z = 1/2$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, em unidades da semilargura de banda D .

de dados. Assim como observamos para o espaço de parâmetros da seção 4.2, o termo de hibridização correlacionada permite que o sistema tenha comportamento universal em baixas temperaturas, o que não ocorria quando $W = 0$.

Na Fig.4.9 expomos, para os mesmos parâmetros da Fig.4.8, a contribuição da impureza ao calor específico, em função da temperatura, juntamente com $\exp(S_{\text{imp}})$ compartilhando o eixo das abscissas.

Com relação ao calor específico, as constatações anteriores permanecem válidas. Picos

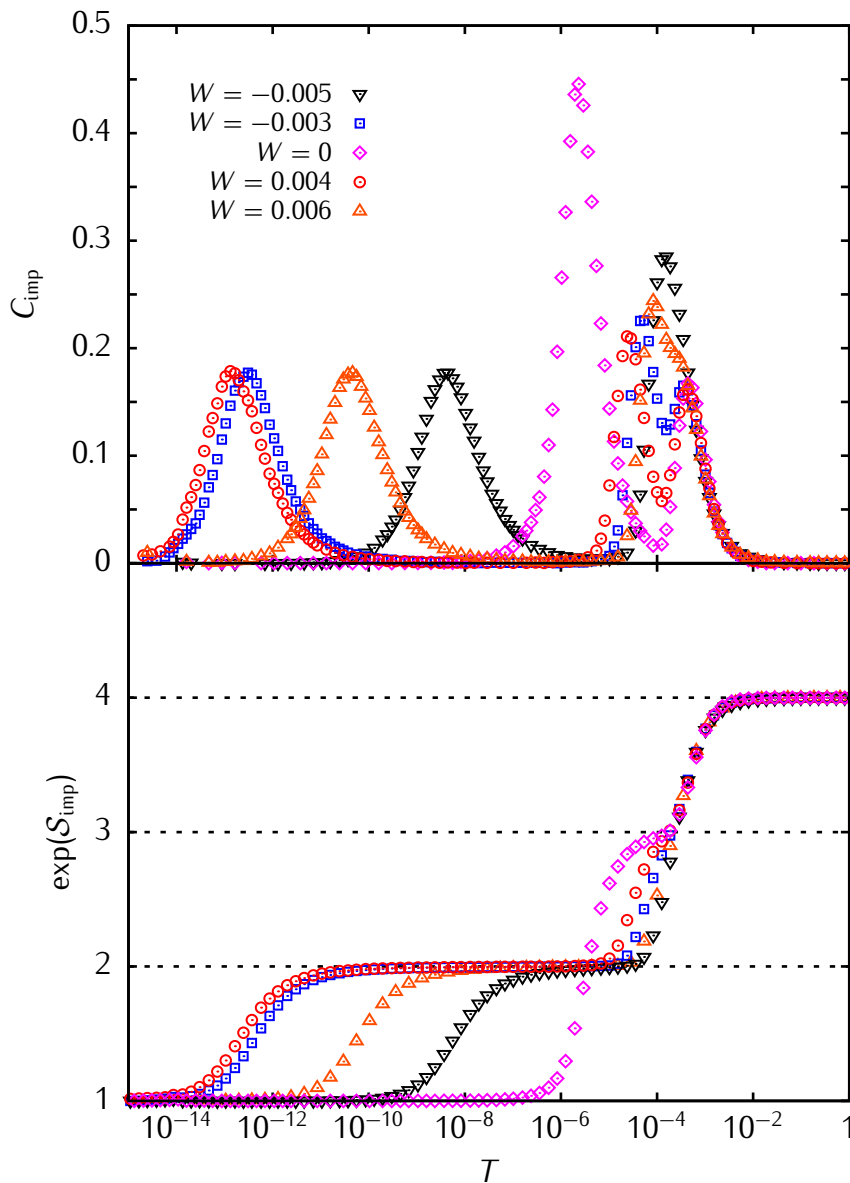


Figura 4.9 – Contribuição da impureza a propriedades termodinâmicas do modelo: C_{imp} e $\exp(S_{\text{imp}})$ em função da temperatura T . Parâmetros do modelo: $V = 0.001$, $U = 0.001$, $\varepsilon_f = 0$. Parâmetros do grupo de renormalização numérico: $\Lambda = 3.5$; procedimento intercalado com $z = 1$ e $z = 1/2$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, em unidades da semilargura de banda D .

em que $C_{\text{imp}} \approx 0.2$ caracterizam uma transição do tipo $\exp(S_{\text{imp}}) = i \rightarrow i - 1$. Picos mais altos são simplesmente superposições dos mais baixos, devidos a transições em que numa escala pequena de temperatura mais de um grau de liberdade da impureza torna-se energeticamente desprezível.

4.4 Parâmetros: $V = 0.0006$, $U = 0.02$ e $\varepsilon_f = -10^{-5}$

Por fim, examinamos os efeitos de hibridização correlacionada sobre as curvas mostradas anteriormente na Fig.3.8. Naquele estágio da dissertação, elas auxiliaram na introdução dos quatro pontos fixos, os quais se tornaram a base da atual análise. Relembrando o espaço de parâmetros de então: $V = 0.0006$, $U = 0.02$ e $\varepsilon_f = -10^{-5}$, juntamente com o diagrama da Fig.3.9, expomos na Fig.4.10 as dependências de $T_{\chi_{\text{imp}}}$ e $\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}})$ com a temperatura T para cinco valores diversos de W .

Na Fig.4.10, nos dados para $W = 0$, é visível o ponto fixo de valência flutuante, o que corrobora nossas afirmações anteriores sobre a possibilidade do sistema permanecer por algumas escalas de temperatura no regime caracterizado por $T_{\chi_{\text{imp}}} = 1/6$ e $\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}}) \rightarrow 3$ sem a escolha inicial de $\varepsilon_f = 0$. Além disso, notamos que a hibridização correlacionada introduz uma flutuação de carga capaz de retirar o sistema do comportamento de valência flutuante e beneficiar o de momento local, assim como em casos anteriores. Em outras palavras, o enfraquecimento do ponto fixo de valência flutuante se deve à flutuação de carga introduzida pela hibridização correlacionada.

Diferentemente das seções anteriores, na Fig.4.10 trabalhamos apenas com valores positivos de W . Ademais, nota-se que eles são da ordem de grandeza de U e não de V (nos casos anteriores V , W e U eram da mesma ordem). Essas duas constatações estão intimamente relacionadas. A escolha de $W \sim U$ é feita porque os efeitos sobre a curva tradicional ($W = 0$) usando-se valores de W da mesma ordem de grandeza de V eram visualmente imperceptíveis, sobrepujados por U , ao menos uma ordem de grandeza acima de V e W . Optando por trabalhar com $W \sim U$ garantimos uma boa visualização dos efeitos de hibridização correlacionada. Por conseguinte, visto que W é, em módulo, consideravelmente maior que V , é praticamente indiferente escolher W positivo ou negativo, já que a Fig.4.10 confirma a tendência das seções 4.1 e 4.2, segundo as quais a hibridização depende essencialmente de $|V - W|$. O sistema apresenta magnetização nula em temperaturas mais altas quanto maior o valor desse módulo. Valores mais baixos favorecem o ponto fixo de momento local ou, eventualmente, o de valência flutuante.

Com relação à universalidade, neste exemplo em particular nenhum valor escolhido para W alterou o regime universal de $W = 0$.

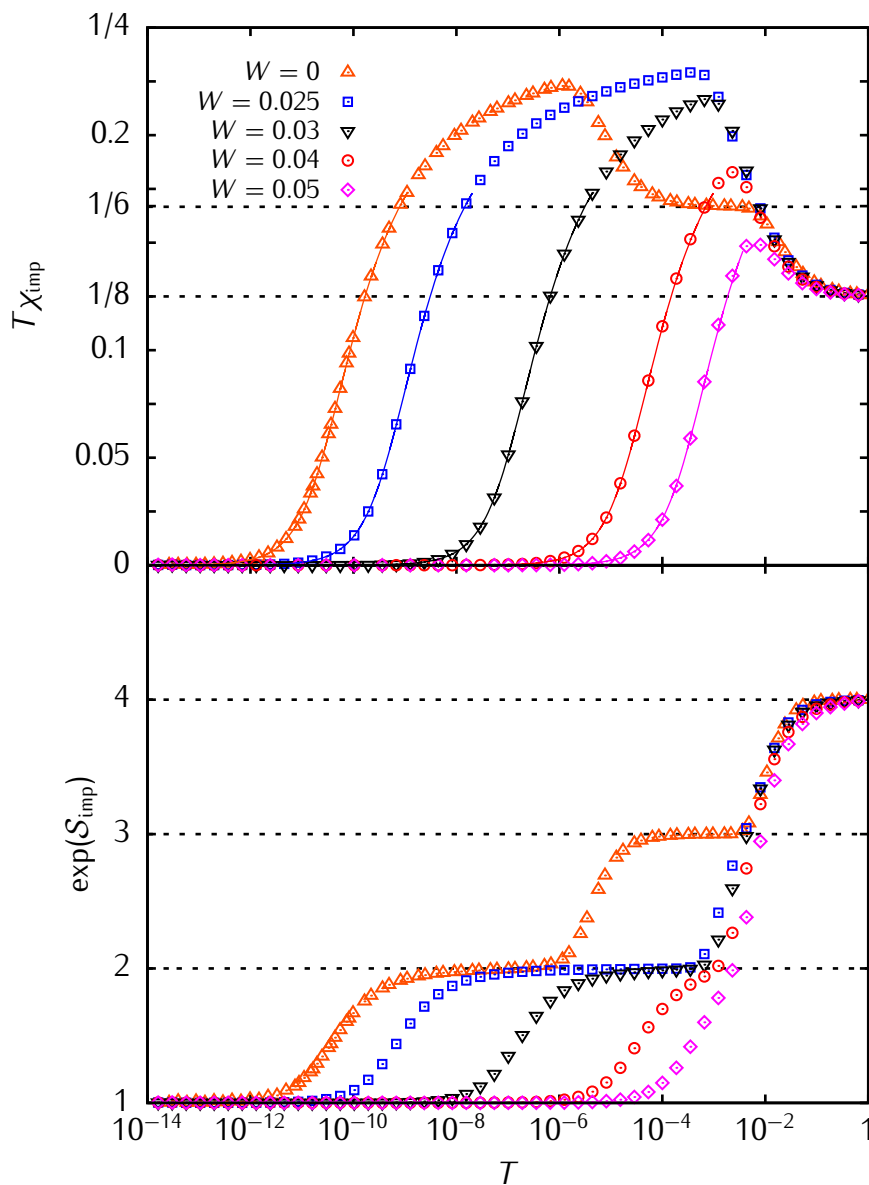


Figura 4.10 – Contribuição da impureza a propriedades termodinâmicas do modelo: $T\chi_{\text{imp}}$ e $\exp(S_{\text{imp}})$ em função da temperatura T . Parâmetros do modelo: $V = 0.0006$, $U = 0.02$, $\varepsilon_f = -10^{-5}$. Parâmetros do grupo de renormalização numérico: $\Lambda = 3.5$; procedimento intercalado com $z = 1$ e $z = 1/2$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, em unidades da semilargura de banda D .

Antes de finalizar este capítulo, exibimos na Fig.4.11, para os mesmos parâmetros anteriores, a contribuição da impureza ao calor específico, em função da temperatura, juntamente com $\exp(S_{\text{imp}})$ compartilhando o eixo das abscissas.

A dependência do calor específico com a temperatura segue mais uma vez as conclusões apontadas em seções precedentes, em que cada pico no domínio de escalas de energia do sistema indica o descarte, no sentido de contribuição energética, de um ou mais graus de liberdade – a altura do pico está relacionada com essa quantidade – da impureza acoplados

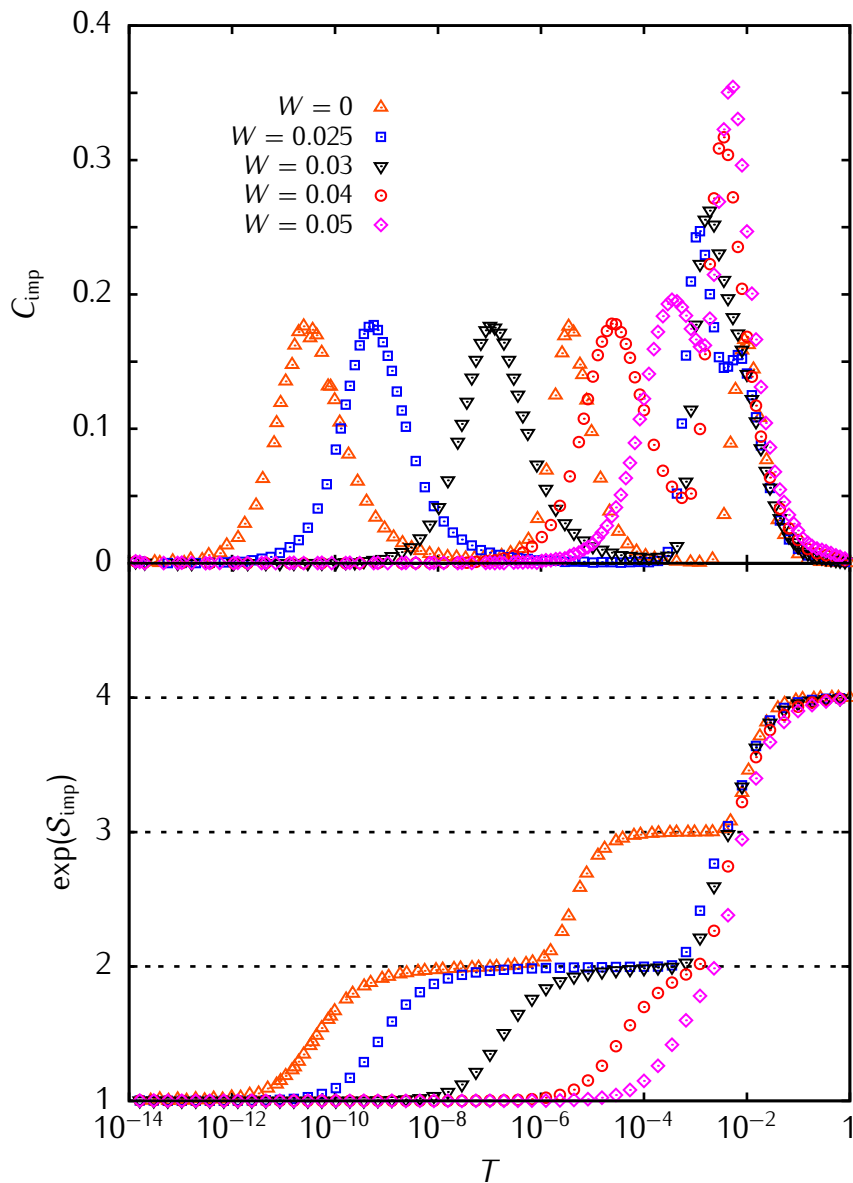


Figura 4.11 – Contribuição da impureza a propriedades termodinâmicas do modelo: C_{imp} e $\exp(S_{\text{imp}})$ em função da temperatura T . Parâmetros do modelo: $V = 0.0006$, $U = 0.02$, $\varepsilon_f = -10^{-5}$. Parâmetros do grupo de renormalização numérico: $\Lambda = 3.5$; procedimento intercalado com $z = 1$ e $z = 1/2$. Todas as medidas de energia são feitas a partir do nível de Fermi, em unidades da semilargura de banda D .

ao banho. Por sua vez, a largura do pico indica o decréscimo de energia necessário para que um ou mais desses graus de liberdade sejam irrelevantes.

Em especial, a curva referente a $W = 0$ é notável. Manifesta claramente três picos, relativos às transições: $\exp(S_{\text{imp}}) = 4 \rightarrow 3$, $3 \rightarrow 2$, $2 \rightarrow 1$, as quais dizem respeito ao descarte de graus de liberdade da impureza efetivamente acoplados ao banho..

As constatações dos parágrafos precedentes indicam que os efeitos de W dependem fortemente da escolha dos parâmetros do modelo. Fizemos diversas observações interes-

santes sobre a ação do termo de hibridização correlacionada e, embora elas careçam de generalidade, um dos grandes méritos do trabalho é escancarar a relevância dos efeitos de correlação na hibridização, os quais não são comumente contabilizados no Hamiltoniano de Anderson tradicional.

CAPÍTULO 5

OBSERVAÇÕES FINAIS E PERSPECTIVAS

Iniciamos este trabalho, cujo derradeiro objetivo era o estudo de efeitos de hibridização correlacionada no modelo de Anderson de uma impureza, com uma introdução de cunho histórico sobre o magnetismo, remontando brevemente desde às explicações metafísicas para o fenômeno até o advento da mecânica quântica, pela qual o magnetismo pôde ser explicado e estudado consistentemente. Em seguida apresentamos o tradicional modelo de Anderson de uma impureza, referência clássica no estudo de impurezas magnéticas em substratos não magnéticos, no qual incluímos um termo adicional – termo de hibridização correlacionada – que leva em conta efeitos de correlação diretamente no Hamiltoniano de interação entre o substrato e a impureza.

Continuamente, visando a diagonalização do modelo, desenvolvemos o formalismo do Grupo de Renormalização Numérico (GRN). Ele estabelece uma transformação no Hamiltoniano, que a cada passo acrescenta uma escala de energia ao problema e constrói um método iterativo, no qual um Hamiltoniano é diagonalizado numericamente a cada iteração. Apresentamos detalhadamente diversos pontos e reflexões vitais para a estruturação do procedimento ao longo do terceiro capítulo, o mais extenso do trabalho. Ademais, alocamos certas minúcias – de caráter mais técnico – nos apêndices. Acreditamos que toda esta exposição constitua a transmissão de um conjunto relevante de informações, ao menos para um leitor iniciante na técnica do GRN, o que já nos geraria enorme satisfação.

Posteriormente, apresentamos resultados numéricos, obtidos via GRN, para a contribuição da impureza à suscetibilidade magnética, ao calor específico e à entropia do modelo, todos em função de temperatura, escalada pela semilargura de banda D - uma escala de energia característica do sistema. A partir deles, no Capítulo 4, analisamos os efeitos do termo adicional por meio da variação de W sobre quatro escolhas específicas do conjunto de parâmetros (V, U, ε_f) que compõe o modelo de Anderson. Estudamos essencialmente a influência de $W \neq 0$ sobre as transições entre os pontos fixos - discutidos e nomeados nas seções 3.9 e 3.11, respectivamente - visualizadas nas curvas $W = 0$. Apontamos diversas tendências, como a hibridização dada por $|V - W|$, a flutuação de carga introduzida pelo termo adicional e sua consequente influência sobre o aparecimento dos pontos fixos de valência flutuante ($\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}}) \rightarrow 3$) e momento local ($\exp(\mathcal{S}_{\text{imp}}) \rightarrow 2$), a capacidade de W de alterar o comportamento do sistema em baixas temperaturas, retirando-o do regime universal ou colocando-o nele, dentre outras observações; discutidas ao longo do Capítulo 4. Todas elas indicaram que os efeitos de W dependem fortemente da escolha dos parâmetros do modelo e, embora elas careçam de generalidade, um dos grandes méritos do trabalho é escancarar a importância e complexidade dos efeitos de correlação na hibridização, os quais não são comumente contabilizados no Hamiltoniano de Anderson tradicional.

Como perspectivas, apontamos duas possibilidades futuras. Primeiramente, um trabalho sobre a dependência com W da largura de linha dos estados unicamente ocupados, o que levaria a um conhecimento quantitativo do efeito de W na energia efetiva ε_f^* desses níveis; permitindo um entendimento mais completo das curvas que apresentamos nesta dissertação. Isso poderia, em princípio, ser feito através da determinação da densidade espectral do operador f_σ . Além disso, seria interessante um estudo quantitativo da "contaminação", mencionada na seção 3.11.4, do singleto de Kondo pelos estados vazio e duplamente ocupado. De forma mais geral, uma análise a respeito da contribuição e da hierarquia dos estados da impureza sobre os autoestados do modelo; o que poderia ser realizado calculando-se a projeção dos estados da impureza em cada um dos autoestados do modelo, como função do número N de iteração. Em baixas temperaturas, esperaríamos que tais projeções, ou talvez o módulo delas ao quadrado, nos fornecessem um dado quantitativo sobre o estado remanescente de magnetização nula quando $T \rightarrow 0$.

REFERÊNCIAS

- 1 DARTORA, C. A. *Magnetismo e spintrônica*. 2010. Disponível em: <http://www.eletrica.ufpr.br/cadartora/Documentos/TE824/Magnetismo_Spintronica.pdf>. Acesso em: 28 mar. 2012.
- 2 NOVAK, M. A. *Introdução ao magnetismo*. 1999. Disponível em: <<http://www.cbpf.br/~labmag/miguel.pdf>>. Acesso em: 30 mar. 2012.
- 3 CAMPO, V. L. *O grupo de renormalização numérico e o problema de duas impurezas*. 2004. 107 p. Tese (Doutorado) — Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2004.
- 4 KONDO, J. Theory of dilute magnetic alloys. In: SEITZ, F.; TURNBULL, D.; EHRENREICH, H. *Solid state physics*. New York: Academic Press, Inc., 1969. v. 23, p. 183–282.
- 5 KONDO, J. g-shift and anomalous hall effect in gadolinium metals. *Progress of Theoretical Physics*, v. 28, n. 5, p. 846–856, 1962.
- 6 KONDO, J. Resistance minimum in dilute magnetic alloys. *Progress of Theoretical Physics*, v. 32, n. 1, p. 37–49, 1964.
- 7 WILSON, K. G. The renormalization group: critical phenomena and the Kondo problem. *Review of Modern Physics*, v. 47, n. 4, p. 773–840, 1975.
- 8 SCHRIEFFER, J. R.; WOLFF, P. A. Relation between the Anderson and Kondo hamil-

tonians. *Physical Review*, v. 149, n. 2, p. 491–492, 1966.

9 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, 1980.

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

11 ANDERSON, P. W. Localized magnetic states in metals. *Physical Review*, v. 124, n. 1, p. 41–53, 1961.

12 TSVELICK, A. M.; WIEGMANN, P. Exact results in the theory of magnetic alloys. *Advances in Physics*, v. 32, n. 4, p. 453–713, 1983.

13 MACEDO JÚNIOR, L. A. *Modelo de Anderson de uma impureza: um caso elementar de sistema eletrônico correlacionado*. 1998. 87 p. Dissertação (Mestrado) — Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 1998.

14 BULLA, R.; TONG, N.-H.; VOJTA, M. Numerical renormalization group for bosonic systems and application to the sub-ohmic spin-boson model. *Physical Review Letters*, v. 91, n. 17, p. 170601, 2005.

15 BULLA, R. et al. Numerical renormalization group for quantum impurities in a bosonic bath. *Physical Review B*, v. 71, n. 4, p. 45122, 2005.

16 BULLA, R.; COSTI, T. A.; PRUSCHKE, T. Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. *Review of Modern Physics*, v. 80, n. 2, p. 395–450, 2008.

17 BULLA, R.; PRUSCHKE, T.; HEWSON, A. C. Anderson impurity in pseudo-gap Fermi systems. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 9, n. 47, p. 10463–10474, 1997.

18 WITHOFF, D.; FRADKIN, E. Phase transitions in gapless Fermi systems with magnetic impurities. *Physical Review Letters*, v. 64, n. 15, p. 1835–1838, 1990.

- 19 VOJTA, M.; BULLA, R. A fractional-spin phase in the power-law Kondo model. *The European Physical Journal B*, v. 28, n. 3, p. 283–287, 2002.
- 20 CHEN, K.; JAYAPRAKASH, C. The Kondo effect in pseudo-gap Fermi systems: a renormalization group study. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 7, n. 37, p. L491–L498, 1995.
- 21 JONES, B. A.; VARMA, C. M.; WILKINS, J. W. Low-temperature properties of the two-impurity Kondo hamiltonian. *Physical Review Letters*, v. 61, n. 1, p. 125–128, 1988.
- 22 COHEN-TANNOUJI, C.; DIU, B.; LALOË, F. *Quantum mechanics*. New York: Wiley, 1977. ISBN 0471164348.
- 23 FETTER, A. L.; WALECKA, J. D. *Quantum theory of many-particle systems*. San Francisco: McGraw-Hill, 1971. 601 p.
- 24 TINKHAM, M. *Group theory and quantum mechanics*. New York: McGraw-Hill, 1964. 340 p.
- 25 MEUNIER, J.-L. A simple demonstration of the Wigner-Eckart theorem. *European Journal of Physics*, v. 8, n. 2, p. 114–116, 1987.
- 26 SACHDEV, S. *Quantum phase transitions*. New York: Cambridge University Press, 2001. 353 p.
- 27 COSTA, S. C. *Calor específico do modelo de Anderson de uma impureza por grupo de renormalização numérico*. 1995. 68 p. Dissertação (Mestrado) — Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 1995.
- 28 COSTA, S. C. et al. Numerical renormalization-group computation of specific heats. *Physical Review B*, v. 55, n. 1, p. 30–33, 1997.
- 29 OLIVEIRA, W. C. *Método generalizado do grupo de renormalização numérico para o cálculo de propriedades termodinâmicas de impurezas em metais*. 1994. 147 p. Tese (Doutorado) — Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 1994.

- 30 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, 1994.
- 31 FERREIRA, J. V. B. *Modelo de Anderson de dois canais*. 2000. 120 p. Tese (Doutorado) — Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2000.
- 32 FROTA, H. O.; OLIVEIRA, L. N. Photoemission spectroscopy for the spin-degenerate Anderson model. *Physical Review B*, v. 33, n. 11, p. 7871–7874, 1986.
- 33 YOSHIDA, M.; WHITAKER, M. A.; OLIVEIRA, L. N. Renormalization-group calculation of excitation properties for impurity models. *Physical Review B*, v. 41, n. 13, p. 9403–9414, 1990.
- 34 LÍBERO, V. L.; OLIVEIRA, L. N. Generalized renormalization-group calculation of x-ray photoemission spectra for a simple metal. *Physical Review B*, v. 42, n. 5, p. 3167–3170, 1990.
- 35 LÍBERO, V. L.; OLIVEIRA, L. N. Spectral density for fermion tunneling between two centers in a metallic environment. *Physical Review Letters*, v. 65, n. 16, p. 2042–2045, 1990.
- 36 SILVA, J. B. et al. Particle-hole asymmetry in the two-impurity Kondo model. *Physical Review Letters*, v. 76, n. 2, p. 275–278, 1996.
- 37 ALASCIO, B.; ALLUB, R.; BASEIRO, C. A. Effect of Coulomb repulsion between localized and extended states in the Anderson model. *Physical Review B*, v. 34, n. 7, p. 4786–4789, 1986.
- 38 OLIVEIRA, L. N. The numerical renormalization group and the problem of impurities in metals. *Brazilian Journal of Physics*, v. 22, n. 3, p. 155–79, 1992.
- 39 SAKURAI. *Advanced quantum mechanics*. 4st. ed. Menlo Park, Calif.: Benjamin/Cummings Pub. Co, 1967. ISBN 0201067102.

APÊNDICES

APÊNDICE A

DEMONSTRAÇÃO DO TEOREMA DE WIGNER-ECKART

Neste apêndice, embasado no trabalho de J.-L. Meunier²⁵, apresentamos uma demonstração, que obviamente não é a única, do teorema de Wigner-Eckart para um operador tensorial de ordem L , cuja M -ésima componente é dada por \mathcal{T}_M^L , definido através das relações:

$$[J_z, \mathcal{T}_M^L] = M\mathcal{T}_M^L, \quad (\text{A.1a})$$

$$[J_{\pm}, \mathcal{T}_M^L] = \sqrt{L(L+1) - M(M \pm 1)}\mathcal{T}_{M \pm 1}^L, \quad (\text{A.1b})$$

em que J_z e J_{\pm} são componentes de um operador vetorial \mathbf{J} que satisfaz a álgebra tradicional de momento angular, com $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ e $J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$.

Primeiramente, lembremos que os estados resultantes do acoplamento entre dois subespaços caracterizados por valores distintos de momento angular, $j_1 \otimes j_2 \rightarrow j$, podem ser escritos como:

$$|j, m\rangle = \sum_{m_1=-(2j_1+1)}^{2j_1+1} \sum_{m_2=-(2j_2+1)}^{2j_2+1} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \rangle |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle, \quad (\text{A.2})$$

em que $\{|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle\}$ é uma base completa do espaço $j_1 \otimes j_2$; além disso $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$, com $m = -(2j+1), -2j, \dots, 2j, 2j+1$. Os números $\langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \rangle$ são os

chamados coeficientes de Clebsh-Gordan.

Segundo o teorema de Wigner-Eckart, o elemento de matriz $\langle j, m | \mathcal{T}_M^L | j', m' \rangle$, para o acoplamento $L \otimes j' \rightarrow j$, pode ser escrito como

$$\langle j, m | \mathcal{T}_M^L | j', m' \rangle = \langle L, M; j', m' | j, m \rangle \langle j || \mathcal{T}^L || j' \rangle, \quad (\text{A.3})$$

em que o segundo objeto do lado direito independe de m ou m' e é denominado elemento de matriz invariante - em inglês *reduced matrix element*.

Com o objetivo de demonstrar a Eq.(A.3), recordamos como são calculados explicitamente os coeficientes de Clebsh-Gordan para um dado acoplamento $j_1 \otimes j_2 \rightarrow j$. Nesta linha de raciocínio, utilizaremos os resultados da atuação do operador \mathbf{J} no espaço caracterizado por j^{22} :

$$J_z |j, m\rangle = m |j, m\rangle, \quad (\text{A.4a})$$

$$J_{\pm} |j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle, \quad (\text{A.4b})$$

$$J^2 |j, m\rangle = j(j+1) |j, m\rangle, \quad (\text{A.4c})$$

e no por $j_1 \otimes j_2^{22}$:

$$J_z |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = (m_1 + m_2) |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle, \quad (\text{A.5a})$$

$$J_{\pm} |j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1 \pm 1)} |j_1, m_1 \pm 1; j_2, m_2\rangle \\ + \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2 \pm 1)} |j_1, m_1; j_2, m_2 \pm 1\rangle. \quad (\text{A.5b})$$

Agora, inserimos os operadores J_z e J_{\pm} entre $\langle j_1, m_1; j_2, m_2 |$ e $|j, m\rangle$, promovendo a

atuação à direita e à esquerda. Inicialmente, J_z :

$$\langle j_1, m_1; j_2, m_2 | J_z | j, m \rangle = m \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \rangle , \quad (\text{A.6a})$$

$$\langle j_1, m_1; j_2, m_2 | J_z | j, m \rangle = (m_1 + m_2) \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \rangle , \quad (\text{A.6b})$$

o que fornece necessariamente a famigerada condição

$$m = m_1 + m_2 , \quad (\text{A.7})$$

para $\langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \rangle \neq 0$. Por sua vez, se a Eq.(A.7) não é satisfeita, o coeficiente de Clebsh-Gordan é obrigatoriamente nulo.

Ulteriormente, os elementos de matriz de J_{\pm} fornecem o conjunto de equações:

$$\langle j_1, m_1; j_2, m_2 | J_{\mp} | j, m \rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m \mp 1)} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j, m \mp 1 \rangle , \quad (\text{A.8a})$$

$$\begin{aligned} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | J_{\mp} | j, m \rangle = & \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1 \pm 1)} \langle j_1, m_1 \pm 1; j_2, m_2 | j, m \rangle \\ & + \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2 \pm 1)} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 \pm 1 | j, m \rangle , \end{aligned} \quad (\text{A.8b})$$

em que escrevemos, convenientemente, J_{\mp} ao invés de J_{\pm} .

Agora, voltamos aos elementos de matriz

$$\langle j, m | \mathcal{T}_M^L | j', m' \rangle , \quad |j' - L| \leq j \leq j' + L . \quad (\text{A.9})$$

Visando calculá-los, construímos relações similares às obtidas para os coeficientes de Clebsh-Gordan. Inserindo $J_z \mathcal{T}_M^L$ entre $\langle j, m |$ e $|j', m' \rangle$ e utilizando a Eq.(A.1a) temos

$$\langle j, m | J_z \mathcal{T}_M^L | j', m' \rangle = m \langle j, m | \mathcal{T}_M^L | j', m' \rangle , \quad (\text{A.10a})$$

$$\langle j, m | J_z \mathcal{T}_M^L | j', m' \rangle = (m' + M) \langle j, m | \mathcal{T}_M^L | j', m' \rangle , \quad (\text{A.10b})$$

o que, similarmente à Eq.(A.7), fornece:

$$m = m' + M, \quad (\text{A.11})$$

para $\langle j, m | \mathcal{T}_M^L | j', m' \rangle \neq 0$. Naturalmente, o elemento de matriz é nulo se $m \neq m' + M$.

De forma semelhante:

$$\langle j, m | \mathcal{T}_M^L J_{\mp} | j', m' \rangle = \sqrt{j'(j' + 1) - m'(m' \mp 1)} \langle j, m | \mathcal{T}_M^L | j', m' \mp 1 \rangle, \quad (\text{A.12a})$$

$$\begin{aligned} \langle j, m | \mathcal{T}_M^L J_{\mp} | j', m' \rangle = & \sqrt{L(L + 1) - M(M \pm 1)} \langle j, m | \mathcal{T}_{M \pm 1}^L | j', m' \rangle \\ & + \sqrt{j(j + 1) - m(m \pm 1)} \langle j, m \pm 1 | \mathcal{T}_M^L | j', m' \rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.12b})$$

O teorema de Wigner-Eckart está praticamente demonstrado ao se notar que as Eqs.(A.8) e (A.12) apresentam exatamente a mesma estrutura.

Similarmente aos coeficientes de Clebsh-Gordan, as Eqs.(A.12), juntamente com a Eq.(A.11), determinam todo o conjunto de elementos de matriz $\langle j, m | \mathcal{T}_M^L | j', m' \rangle$ para j, L e j' fixos, a menos de uma fator multiplicativo. Portanto, os coeficientes de Clebsh-Gordan e os elementos de matriz são proporcionais e, então, o elemento de matriz invariante é definido pela razão:

$$\langle j || \mathcal{T}^L || j' \rangle \equiv \frac{\langle j, m | \mathcal{T}_M^L | j', m' \rangle}{\langle L, M; j', m' | j, m \rangle}; \quad (\text{A.13})$$

como queríamos demonstrar.

APÊNDICE B

TENSORES $C_{N\sigma}^\dagger$ E $-2\sigma C_{N\sigma}$

No Apêndice A apresentamos uma demonstração do teorema de Wigner-Eckart para um operador tensorial de ordem L , cuja M -ésima componente é dada por \mathcal{T}_M^L , definido através das relações:

$$[J_z, \mathcal{T}_M^L] = M\mathcal{T}_M^L, \quad (\text{B.1a})$$

$$[J_\pm, \mathcal{T}_M^L] = \sqrt{L(L+1) - M(M \pm 1)}\mathcal{T}_{M \pm 1}^L, \quad (\text{B.1b})$$

em que J_z e J_\pm são componentes de um operador vetorial \mathbf{J} que satisfaz a álgebra tradicional de momento angular, com $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ e $J_\pm = J_x \pm iJ_y$. Segundo o teorema, o elemento de matriz $\langle j, m | \mathcal{T}_M^L | j', m' \rangle$, para o acoplamento $L \otimes j' \rightarrow j$, pode ser escrito como

$$\langle j, m | \mathcal{T}_M^L | j', m' \rangle = \langle L, M; j', m' | j, m \rangle \langle j || \mathcal{T}^L || j' \rangle, \quad (\text{B.2})$$

em que o segundo objeto do lado direito independe de m ou m' e é denominado elemento de matriz invariante - em inglês *reduced matrix element*.

Neste segundo complemento pretendemos demonstrar que as duplas de operadores $(c_{N\uparrow}^\dagger, c_{N\downarrow}^\dagger)$ e $(-c_{N\uparrow}, c_{N\downarrow})$ formam, cada uma delas, um tensor de ordem $L = 1/2$ que satisfaz

as Eq.(B.1) para \mathbf{J} representado pelo operador *spin* total $\hat{\mathbf{S}}$:

$$\hat{S}_+ = \sum_{n=0}^N c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\downarrow} + f_\uparrow^\dagger f_\downarrow, \quad (\text{B.3a})$$

$$\hat{S}_- = \sum_{n=0}^N c_{n\downarrow}^\dagger c_{n\uparrow} + f_\downarrow^\dagger f_\uparrow, \quad (\text{B.3b})$$

$$\hat{S}_z = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N \left(c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} - c_{n\downarrow}^\dagger c_{n\downarrow} \right) + \frac{1}{2} \left(f_\uparrow^\dagger f_\uparrow - f_\downarrow^\dagger f_\downarrow \right), \quad (\text{B.3c})$$

em que $\hat{\mathbf{S}}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$ e $\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$. Na verdade a afirmação acima também é válida para o operador carga axial, cujas componentes \mathcal{J}_x , \mathcal{J}_y e \mathcal{J}_z são completamente definidas por:

$$\mathcal{J}_+ = \sum_{n=0}^N (-1)^n c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\downarrow}^\dagger - f_\uparrow^\dagger f_\downarrow^\dagger, \quad (\text{B.4a})$$

$$\mathcal{J}_- = \sum_{n=0}^N (-1)^n c_{n\downarrow} c_{n\uparrow} - f_\downarrow f_\uparrow, \quad (\text{B.4b})$$

$$\mathcal{J}_z = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N \left(c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} - c_{n\downarrow} c_{n\downarrow}^\dagger \right) + \frac{1}{2} \left(f_\uparrow^\dagger f_\uparrow - f_\downarrow f_\downarrow^\dagger \right), \quad (\text{B.4c})$$

em que $\mathcal{J}^2 = \mathcal{J}_x^2 + \mathcal{J}_y^2 + \mathcal{J}_z^2$ e $\mathcal{J}_\pm = \mathcal{J}_x \pm i\mathcal{J}_y$. Todavia, como a demonstração é completamente análoga e ele não foi utilizado neste trabalho, deixamos o cálculo com o operador carga axial a cargo do leitor interessado.

Iniciando, para $\mathbf{J} = \hat{\mathbf{S}}$, é conveniente calcular separadamente

$$\begin{aligned} [c_{n\nu}^\dagger c_{n\mu}, c_{N\sigma}^\dagger] &= c_{n\nu}^\dagger c_{n\mu} c_{N\sigma}^\dagger - c_{N\sigma}^\dagger c_{n\nu}^\dagger c_{n\mu} \\ &= c_{n\nu}^\dagger c_{n\mu} c_{N\sigma}^\dagger + c_{n\nu}^\dagger c_{N\sigma}^\dagger c_{n\mu} \\ &= c_{n\nu}^\dagger \{c_{N\sigma}^\dagger, c_{n\mu}\} \\ &= c_{n\nu}^\dagger \delta_{Nn} \delta_{\sigma\mu}, \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

com $\{A, B\} \equiv AB + BA$, em que utilizamos as relações de anticomutação fermiônicas

usuais, as quais, expressas genericamente, são dadas por:

$$\{a_p, a_q\} = \{a_p^\dagger, a_q^\dagger\} = 0, \quad (\text{B.6a})$$

$$\{a_p^\dagger, a_q\} = \delta_{pq}. \quad (\text{B.6b})$$

De forma similar:

$$\begin{aligned} [c_{n\nu}^\dagger c_{n\mu}, c_{N\sigma}] &= c_{n\nu}^\dagger c_{n\mu} c_{N\sigma} - c_{N\sigma} c_{n\nu}^\dagger c_{n\mu} \\ &= -c_{n\nu}^\dagger c_{N\sigma} c_{n\mu} - c_{N\sigma} c_{n\nu}^\dagger c_{n\mu} \\ &= -\{c_{n\nu}^\dagger, c_{N\sigma}\} c_{n\mu} \\ &= -c_{n\mu} \delta_{Nn} \delta_{\sigma\nu}; \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

ademais, utilizando novamente as Eqs.(B.6):

$$[f_\nu^\dagger f_\mu, c_{N\sigma}^\dagger] = [f_\nu^\dagger f_\mu, c_{N\sigma}] = 0. \quad (\text{B.8})$$

Primeiramente, nos concentramos no operador $c_{N\sigma}^\dagger$. Utilizando as Eqs.(B.5) e (B.8) é imediato obter

$$[\hat{S}_z, c_{N\sigma}^\dagger] = \sigma c_{N\sigma}^\dagger, \quad (\text{B.9a})$$

$$[\hat{S}_+, c_{N\sigma}^\dagger] = \delta_{\sigma\downarrow} c_{N\uparrow}^\dagger, \quad (\text{B.9b})$$

$$[\hat{S}_-, c_{N\sigma}^\dagger] = \delta_{\sigma\uparrow} c_{N\downarrow}^\dagger, \quad (\text{B.9c})$$

em que convencionamos que σ fora de índices apresenta valor $1/2$ para *spin up* e $-1/2$ para *spin down*.

A partir das Eqs.(B.9) fica claro que os operadores $c_{N\uparrow}^\dagger$ e $c_{N\downarrow}^\dagger$ são as componentes $M = 1/2$ e $M = -1/2$, respectivamente, de um tensor de ordem $L = 1/2$ que satisfaz as Eqs.(B.1) para $\mathbf{J} = \hat{\mathbf{S}}$:

$$c_N^\dagger \rightarrow \begin{pmatrix} c_{N\uparrow}^\dagger \\ c_{N\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (\text{B.10})$$

Agora, por meio das Eqs.(B.7) e (B.8), seguimos igual procedimento para $c_{N\sigma}$:

$$[\hat{S}_z, c_{N\sigma}] = -\sigma c_{N\sigma}, \quad (\text{B.11a})$$

$$[\hat{S}_+, c_{N\sigma}] = -\delta_{\sigma\uparrow} c_{N\downarrow}, \quad (\text{B.11b})$$

$$[\hat{S}_-, c_{N\sigma}] = -\delta_{\sigma\downarrow} c_{N\uparrow}. \quad (\text{B.11c})$$

Notemos que o cálculo acima não satisfaz completamente a definição prévia do tensor \mathcal{T}_M^L , pois a Eq.(B.1b) não admite que o coeficiente do lado direito seja negativo. Trata-se de um pequeno empecilho, rapidamente resolvido se trabalharmos com as componentes $-2\sigma c_{N\sigma}$ ao invés de $c_{N\sigma}$, o que fornece

$$[\hat{S}_z, -2\sigma c_{N\sigma}] = -\sigma(-2\sigma c_{N\sigma}), \quad (\text{B.12a})$$

$$[\hat{S}_+, -2\sigma c_{N\sigma}] = \delta_{\sigma\uparrow} c_{N\downarrow}, \quad (\text{B.12b})$$

$$[\hat{S}_-, -2\sigma c_{N\sigma}] = -\delta_{\sigma\downarrow} c_{N\uparrow}. \quad (\text{B.12c})$$

Semelhantemente ao caso de c_N^\dagger , pelas Eqs.(B.12) nota-se que os operadores $c_{N\downarrow}$ e $-c_{N\uparrow}$ são as componentes $M = 1/2$ e $M = -1/2$, respectivamente, de um tensor de ordem $L = 1/2$ que satisfaz as Eqs.(B.1) para $\mathbf{J} = \hat{\mathbf{S}}$:

$$c_N \rightarrow \begin{pmatrix} c_{N\downarrow} \\ -c_{N\uparrow} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.13})$$

APÊNDICE C

CÁLCULO DOS ELEMENTOS DE MATRIZ DE \mathcal{H}_{N+1}

No corpo principal da dissertação, ao tratarmos dos elementos de matriz de \mathcal{H}_{N+1} , apresentamos apenas os resultados. Por outro lado, este apêndice tem a incumbência de exibir os pormenores relativos aos cálculos.

Em primeiro lugar, recordamos a construção da base de estados utilizada para escrever a matriz de \mathcal{H}_{N+1} . Seja $|Q, S, S_z, r\rangle_N$ o r -ésimo autoestado de \mathcal{H}_N , com carga Q , *spin* S e componente S_z - números quânticos referentes aos respectivos operadores apresentados no texto principal - Eqs.(3.52), (3.53) e (3.54c). Definimos o seguinte conjunto de estados:

$$|Q, S, S_z, r; 0\rangle_N \equiv |Q, S, S_z, r\rangle_N , \quad (\text{C.1a})$$

$$|Q, S, S_z, r; \uparrow\rangle_N \equiv c_{(N+1)\uparrow}^\dagger |Q, S, S_z, r\rangle_N , \quad (\text{C.1b})$$

$$|Q, S, S_z, r; \downarrow\rangle_N \equiv c_{(N+1)\downarrow}^\dagger |Q, S, S_z, r\rangle_N , \quad (\text{C.1c})$$

$$|Q, S, S_z, r; \uparrow\downarrow\rangle_N \equiv c_{(N+1)\uparrow}^\dagger c_{(N+1)\downarrow}^\dagger |Q, S, S_z, r\rangle_N , \quad (\text{C.1d})$$

em que mesmo nos estados da esquerda Q , S e S_z dizem respeito a cadeia de N sítios - após o ";" há a informação sobre o sítio adicionado. Salientamos que as definições acima

assumem automaticamente uma convenção de sinais que, juntamente com a estatística de Fermi-Dirac, deve ser respeitada. De fato, devido a esta há fatores de fase diferentes nos cálculos se trabalhamos com $|\uparrow\downarrow\rangle = c_{\uparrow}^{\dagger}c_{\downarrow}^{\dagger}|0\rangle$ ou $|\uparrow\downarrow\rangle = c_{\downarrow}^{\dagger}c_{\uparrow}^{\dagger}|0\rangle$, em que $|0\rangle$ é o estado com $c_{\sigma}^{\dagger}c_{\sigma} = 0$, denominado, de forma livre, estado de vácuo.

Respeitando a conservação da carga, do *spin* e de sua componente z , obtemos - segundo o procedimento apresentado no texto principal - uma base para escrever uma matriz de \mathcal{H}_{N+1} , com números quânticos Q , S e S_z bem definidos:

$$|Q, S, S_z, r, 1\rangle_{N+1} = |Q, S, S_z, r; 0\rangle_N, \quad (\text{C.2a})$$

$$|Q, S, S_z, r, 2\rangle_{N+1} = |Q - 2, S, S_z, r; \uparrow\downarrow\rangle_N, \quad (\text{C.2b})$$

$$|Q, S, S_z, r, 3\rangle_{N+1} = \sqrt{\frac{S + S_z}{2S}} \left| Q - 1, S - \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2}, r; \uparrow \right\rangle_N \\ + \sqrt{\frac{S - S_z}{2S}} \left| Q - 1, S - \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}, r; \downarrow \right\rangle_N, \quad (\text{C.2c})$$

$$|Q, S, S_z, r, 4\rangle_{N+1} = -\sqrt{\frac{S - S_z + 1}{2S + 2}} \left| Q - 1, S + \frac{1}{2}, S_z - \frac{1}{2}, r; \uparrow \right\rangle_N \\ + \sqrt{\frac{S + S_z + 1}{2S + 2}} \left| Q - 1, S + \frac{1}{2}, S_z + \frac{1}{2}, r; \downarrow \right\rangle_N, \quad (\text{C.2d})$$

em que todos os números quânticos dos estados da esquerda referem-se à cadeia de $N + 1$ sítios e os algarismos 1, 2, 3 e 4 são apenas índices que rotulam o “tipo” de estado da base, ou seja, como ele foi gerado. Por construção, os estados (C.2) são autoestados dos operadores carga, *spin* total ao quadrado e componente z do *spin* - referentes à iteração $N + 1$ - com autovalores Q , $S(S + 1)$ e S_z , respectivamente.

Apesar do título deste apêndice, aduzimos não exatamente aos elementos de matriz de \mathcal{H}_{N+1} , mas sim de $\sum_{\sigma} c_{N\sigma}^{\dagger}c_{(N+1)\sigma}$. Tendo estes em mãos, a construção daqueles é direta, porquanto exige somente - segundo a Eq.(3.37) do corpo principal da dissertação - um fator multiplicativo, já que o Hamiltoniano é hermitiano, além, é claro, dos autovalores provenientes da cadeia precedente.

Inspecionando os estados dados pelas Eqs.(C.2) nota-se que somente quatro classes de elementos de matriz de $\sum_{\sigma} c_{N\sigma}^{\dagger}c_{(N+1)\sigma}$ são não nulas, dado que os autoestados de \mathcal{H}_N

formam uma base ortonormal. Elas são caracterizadas por elementos de matriz formados pelo "tipo" 1 com "tipo 3", 1 com 4, 3 com 2 e 4 com 2.

Utilizando o teorema de Wigner-Eckart:

$${}_N \langle Q', S', r' \| c_N^\dagger \| Q, S, r \rangle_N = \frac{{}_N \langle Q', S', S'_z, r' | c_{N\sigma}^\dagger | Q, S, S_z, r \rangle_N}{\langle S, S_z; \frac{1}{2}, \sigma | S', S'_z \rangle}, \quad (\text{C.3})$$

com $\sigma = \pm 1/2$, em que o objeto do lado esquerdo da equação acima, que não depende de S_z e S'_z , é chamado de elemento de matriz invariante e os coeficientes de Clebsh-Gordan são fornecidos por

$$\langle S, S_z; \frac{1}{2}, \sigma | S', S'_z \rangle = \begin{cases} \sqrt{\frac{S \pm S'_z + 1/2}{2S+1}} & \text{para } S' = S + \frac{1}{2} \text{ e } \sigma = \pm \frac{1}{2} \\ \mp \sqrt{\frac{S \mp S'_z + 1/2}{2S+1}} & \text{para } S' = S - \frac{1}{2} \text{ e } \sigma = \pm \frac{1}{2} \end{cases}; \quad (\text{C.4})$$

iniciamos com o cálculo explícito da classe composta pelo "tipo" 1 com "tipo 3":

$$\begin{aligned} & \sum_{\sigma} {}_{N+1} \langle Q, S, S_z, r', 1 | c_{N\sigma}^\dagger c_{(N+1)\sigma} | Q, S, S_z, r, 3 \rangle_{N+1} = \\ & = \sum_{\sigma} \left[\sqrt{\frac{S+S_z}{2S}} {}_N \langle Q, S, S_z, r'; 0 | c_{N\sigma}^\dagger c_{(N+1)\sigma} | Q-1, S-\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2}, r; \uparrow \rangle_N \right. \\ & \quad \left. + \sqrt{\frac{S-S_z}{2S}} {}_N \langle Q, S, S_z, r'; 0 | c_{N\sigma}^\dagger c_{(N+1)\sigma} | Q-1, S-\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r; \downarrow \rangle_N \right] \quad (\text{C.5}) \\ & = \sqrt{\frac{S+S_z}{2S}} {}_N \langle Q, S, S_z, r'; 0 | c_{N\uparrow}^\dagger | Q-1, S-\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2}, r; 0 \rangle_N \\ & \quad + \sqrt{\frac{S-S_z}{2S}} {}_N \langle Q, S, S_z, r'; 0 | c_{N\downarrow}^\dagger | Q-1, S-\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r; 0 \rangle_N. \end{aligned}$$

Como os operadores $c_{N\sigma}^\dagger$ não atuam sobre a parte referente à cadeia de $N+1$ sítios, temos, suprimindo dos estados somente nesta passagem os números quânticos referentes à cadeia de N sítios:

$$\begin{aligned} {}_{N+1} \langle 0 | c_{N\sigma}^\dagger | 0 \rangle_{N+1} & = c_{N\sigma}^\dagger {}_{N+1} \langle 0 | 0 \rangle_{N+1} \\ & = c_{N\sigma}^\dagger, \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

o que resulta em

$$\begin{aligned}
& \sum_{\sigma} {}_{N+1} \langle Q, S, S_z, r', 1 | c_{N\sigma}^\dagger c_{(N+1)\sigma} | Q, S, S_z, r, 3 \rangle_{N+1} = \\
& = \sqrt{\frac{S+S_z}{2S}} {}_N \langle Q, S, S_z, r' | c_{N\uparrow}^\dagger | Q-1, S-\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2}, r \rangle_N \\
& + \sqrt{\frac{S-S_z}{2S}} {}_N \langle Q, S, S_z, r' | c_{N\downarrow}^\dagger | Q-1, S-\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r \rangle_N \\
& = \left[\sqrt{\frac{S+S_z}{2S}} \langle S-\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \uparrow | S, S_z \rangle \right. \\
& \quad \left. \sqrt{\frac{S-S_z}{2S}} \langle S-\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \downarrow | S, S_z \rangle \right] {}_N \langle Q, S, r' || c_N^\dagger || Q-1, S-\frac{1}{2}, r \rangle_N \\
& = \frac{S+S_z+S-S_z}{2S} {}_N \langle Q, S, r' || c_N^\dagger || Q-1, S-\frac{1}{2}, r \rangle_N \\
& = {}_N \langle Q, S, r' || c_N^\dagger || Q-1, S-\frac{1}{2}, r \rangle_N.
\end{aligned} \tag{C.7}$$

Agora, similarmente ao cálculo anterior, a classe obtida pela composição do “tipo” 1 com “tipo” 4:

$$\begin{aligned}
& \sum_{\sigma} \sum_{N+1} \left\langle Q, S, S_z, r', 1 \left| c_{N\sigma}^{\dagger} c_{(N+1)\sigma} \right| Q, S, S_z, r, 4 \right\rangle_{N+1} = \\
& = \sum_{\sigma} \left[-\sqrt{\frac{S-S_z+1}{2S+2}} \left\langle Q, S, S_z, r'; 0 \left| c_{N\sigma}^{\dagger} c_{(N+1)\sigma} \right| Q-1, S+\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2}, r; \uparrow \right\rangle_N \right. \\
& \quad \left. + \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+2}} \left\langle Q, S, S_z, r'; 0 \left| c_{N\sigma}^{\dagger} c_{(N+1)\sigma} \right| Q-1, S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r; \downarrow \right\rangle_N \right] \\
& = -\sqrt{\frac{S-S_z+1}{2S+2}} \left\langle Q, S, S_z, r'; 0 \left| c_{N\uparrow}^{\dagger} \right| Q-1, S+\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2}, r; 0 \right\rangle_N \\
& \quad + \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+2}} \left\langle Q, S, S_z, r'; 0 \left| c_{N\downarrow}^{\dagger} \right| Q-1, S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r; 0 \right\rangle_N \\
& = -\sqrt{\frac{S-S_z+1}{2S+2}} \left\langle Q, S, S_z, r' \left| c_{N\uparrow}^{\dagger} \right| Q-1, S+\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2}, r \right\rangle_N \\
& \quad + \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+2}} \left\langle Q, S, S_z, r' \left| c_{N\downarrow}^{\dagger} \right| Q-1, S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r \right\rangle_N \\
& = \left[-\sqrt{\frac{S-S_z+1}{2S+2}} \left\langle S+\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \uparrow \left| S, S_z \right\rangle \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+2}} \left\langle S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \downarrow \left| S, S_z \right\rangle \right] \left\langle Q, S, r' \left\| c_N^{\dagger} \right\| Q-1, S-\frac{1}{2}, r \right\rangle_N \right. \\
& = \frac{S-S_z+1+S+S_z+1}{2S+2} \left\langle Q, S, r' \left\| c_N^{\dagger} \right\| Q-1, S-\frac{1}{2}, r \right\rangle_N \\
& = \left\langle Q, S, r' \left\| c_N^{\dagger} \right\| Q-1, S-\frac{1}{2}, r \right\rangle_N.
\end{aligned} \tag{C.8}$$

Em seguida a composta pelo “tipo” 3 com “tipo” 2:

$$\begin{aligned}
& \sum_{\sigma} \sum_{N+1} \left\langle Q, S, S_z, r', 3 \left| c_{N\sigma}^{\dagger} c_{(N+1)\sigma} \right| Q, S, S_z, r, 2 \right\rangle_{N+1} = \\
& = \sum_{\sigma} \left[\sqrt{\frac{S+S_z}{2S}} \left\langle Q-1, S-\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2}, r'; \uparrow \left| c_{N\sigma}^{\dagger} c_{(N+1)\sigma} \right| Q-2, S, S_z, r; \uparrow \right\rangle_N \right. \\
& \quad \left. + \sqrt{\frac{S-S_z}{2S}} \left\langle Q-1, S-\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r'; \downarrow \left| c_{N\sigma}^{\dagger} c_{(N+1)\sigma} \right| Q-2, S, S_z, r; \uparrow \downarrow \right\rangle_N \right].
\end{aligned} \tag{C.9}$$

Notemos que desta vez estados duplamente ocupados estão presentes, razão pela qual é necessário ter um pouco de precaução com os sinais. Abaixo, suprimindo todos os subíndices $N+1$ por mera limpeza notacional, analisamos separadamente a atuação de

$c_{(N+1)\sigma}$ sobre o estado de dupla ocupação, respeitando a definição precedente na Eq.(C.1d) e a estatística característica de férmios, $\{a_p, a_b\} = a_p a_b + a_b a_p = \delta_{pb}$:

$$\begin{aligned}
c_\sigma |\uparrow\downarrow\rangle &= c_\sigma c_\uparrow^\dagger c_\downarrow^\dagger |0\rangle \\
&= (\delta_{\sigma\uparrow} - c_\uparrow^\dagger c_\sigma) c_\downarrow^\dagger |0\rangle \\
&= \delta_{\sigma\uparrow} c_\downarrow^\dagger |0\rangle - c_\uparrow^\dagger (\delta_{\sigma\downarrow} - c_\downarrow^\dagger c_\sigma) |0\rangle \\
&= \delta_{\sigma\uparrow} c_\downarrow^\dagger |0\rangle - \delta_{\sigma\downarrow} c_\uparrow^\dagger |0\rangle \\
&= \delta_{\sigma\uparrow} |\downarrow\rangle - \delta_{\sigma\downarrow} |\uparrow\rangle,
\end{aligned} \tag{C.10}$$

o que reduz a Eq.(C.9) a

$$\begin{aligned}
&\sum_\sigma \langle Q, S, S_z, r', 3 | c_{N\sigma}^\dagger c_{(N+1)\sigma} | Q, S, S_z, r, 2 \rangle_{N+1} = \\
&= -\sqrt{\frac{S+S_z}{2S}} \langle Q-1, S-\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2}, r'; \uparrow | c_{N\downarrow}^\dagger | Q-2, S, S_z, r; \uparrow \rangle_N \\
&+ \sqrt{\frac{S-S_z}{2S}} \langle Q-1, S-\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r'; \downarrow | c_{N\uparrow}^\dagger | Q-2, S, S_z, r; \downarrow \rangle_N.
\end{aligned} \tag{C.11}$$

Ainda que os operadores $c_{N\sigma}^\dagger$ não atuem sobre a informação que vem após o “;”, há fatores de fase provenientes da superposição de estados do espaço referente à cadeia de $N+1$ sítios:

$$\begin{aligned}
\langle \uparrow | c_{N\downarrow}^\dagger | \uparrow \rangle &= \langle 0 | c_\uparrow c_{N\downarrow}^\dagger c_\uparrow^\dagger | 0 \rangle \\
&= -\langle 0 | c_{N\downarrow}^\dagger c_\downarrow c_\downarrow^\dagger | 0 \rangle \\
&= -\langle 0 | c_{N\downarrow}^\dagger (1 - c_\downarrow^\dagger c_\downarrow) | 0 \rangle \\
&= -c_{N\downarrow}^\dagger,
\end{aligned} \tag{C.12}$$

e

$$\begin{aligned}
\langle \downarrow | c_{N\uparrow}^\dagger | \downarrow \rangle &= \langle 0 | c_\downarrow c_{N\uparrow}^\dagger c_\downarrow^\dagger | 0 \rangle \\
&= -\langle 0 | c_{N\uparrow}^\dagger c_\uparrow c_\uparrow^\dagger | 0 \rangle \\
&= -\langle 0 | c_{N\uparrow}^\dagger (1 - c_\uparrow^\dagger c_\uparrow) | 0 \rangle \\
&= -c_{N\uparrow}^\dagger,
\end{aligned} \tag{C.13}$$

em que omitimos novamente, por conveniência de notação, os subíndices $N+1$. Finalmente,

após tamanho e necessário zero,

$$\begin{aligned}
& \sum_{\sigma} \langle Q, S, S_z, r', 3 | c_{N\sigma}^{\dagger} c_{(N+1)\sigma} | Q, S, S_z, r, 2 \rangle_{N+1} = \\
&= \sqrt{\frac{S+S_z}{2S}} \langle Q-1, S-\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2}, r' | c_{N\downarrow}^{\dagger} | Q-2, S, S_z, r \rangle_N \\
&\quad - \sqrt{\frac{S-S_z}{2S}} \langle Q-1, S-\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r' | c_{N\uparrow}^{\dagger} | Q-2, S, S_z, r \rangle_N \\
&= \left[\sqrt{\frac{S+S_z}{2S}} \langle S, S_z; \frac{1}{2}, \downarrow | S-\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2} \rangle \right. \\
&\quad \left. - \sqrt{\frac{S-S_z}{2S}} \langle S, S_z; \frac{1}{2}, \uparrow | S-\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2} \rangle \right] \langle Q-1, S-\frac{1}{2}, r' || c_N^{\dagger} || Q-2, S, r \rangle_N \\
&= \frac{S+S_z+S-S_z}{\sqrt{2S(2S+1)}} \langle Q-1, S-\frac{1}{2}, r' || c_N^{\dagger} || Q-2, S, r \rangle_N \\
&= \sqrt{\frac{2S}{2S+1}} \langle Q-1, S-\frac{1}{2}, r' || c_N^{\dagger} || Q-2, S, r \rangle_N .
\end{aligned} \tag{C.14}$$

Por fim, a classe obtida pela composição do “tipo” 4 com “tipo” 2:

$$\begin{aligned}
& \sum_{\sigma} \langle Q, S, S_z, r', 4 | c_{N\sigma}^{\dagger} c_{(N+1)\sigma} | Q, S, S_z, r, 2 \rangle_{N+1} = \\
&= \sum_{\sigma} \left[-\sqrt{\frac{S-S_z+1}{2S+2}} \langle Q-1, S+\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2}, r'; \uparrow | c_{N\sigma}^{\dagger} c_{(N+1)\sigma} | Q-2, S, S_z, r; \uparrow \downarrow \rangle_N \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+2}} \langle Q-1, S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r'; \downarrow | c_{N\sigma}^{\dagger} c_{(N+1)\sigma} | Q-2, S, S_z, r; \uparrow \downarrow \rangle_N \right] .
\end{aligned} \tag{C.15}$$

Utilizando a Eq.(C.10):

$$\begin{aligned}
& \sum_{\sigma} \langle Q, S, S_z, r', 4 | c_{N\sigma}^{\dagger} c_{(N+1)\sigma} | Q, S, S_z, r, 2 \rangle_{N+1} = \\
&= \sqrt{\frac{S-S_z+1}{2S+2}} \langle Q-1, S+\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2}, r'; \uparrow | c_{N\downarrow}^{\dagger} | Q-2, S, S_z, r; \uparrow \rangle_N \\
&\quad + \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+2}} \langle Q-1, S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r'; \downarrow | c_{N\uparrow}^{\dagger} | Q-2, S, S_z, r; \downarrow \rangle_N ,
\end{aligned} \tag{C.16}$$

e as Eqs.(C.12) e (C.13):

$$\begin{aligned}
& \sum_{\sigma} {}_{N+1} \langle Q, S, S_z, r', 4 \mid c_{N\sigma}^\dagger c_{(N+1)\sigma} \mid Q, S, S_z, r, 2 \rangle_{N+1} = \\
& = -\sqrt{\frac{S-S_z+1}{2S+2}} {}_N \langle Q-1, S+\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2}, r' \mid c_{N\downarrow}^\dagger \mid Q-2, S, S_z, r \rangle_N \\
& \quad -\sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+2}} {}_N \langle Q-1, S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r' \mid c_{N\uparrow}^\dagger \mid Q-2, S, S_z, r \rangle_N \\
& = -\left[\sqrt{\frac{S-S_z+1}{2S+2}} \left\langle S, S_z; \frac{1}{2}, \downarrow \mid S+\frac{1}{2}, S_z-\frac{1}{2} \right\rangle \right. \\
& \quad \left. + \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+2}} \left\langle S, S_z; \frac{1}{2}, \uparrow \mid S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2} \right\rangle \right] {}_N \langle Q-1, S+\frac{1}{2}, r' \parallel c_N^\dagger \parallel Q-2, S, r \rangle_N \\
& = -\frac{S-S_z+1+S+S_z+1}{\sqrt{(2S+2)(2S+1)}} {}_N \langle Q-1, S+\frac{1}{2}, r' \parallel c_N^\dagger \parallel Q-2, S, r \rangle_N \\
& = -\sqrt{\frac{2S+2}{2S+1}} {}_N \langle Q-1, S+\frac{1}{2}, r' \parallel c_N^\dagger \parallel Q-2, S, r \rangle_N .
\end{aligned} \tag{C.17}$$

Em suma, definindo, por conveniência,

$${}_{r',i} \langle c_{N\sigma}^\dagger c_{(N+1)\sigma} \rangle_{r,i} \equiv {}_{N+1} \langle Q, S, S_z, r', i \mid c_{N\sigma}^\dagger c_{(N+1)\sigma} \mid Q, S, S_z, r, i \rangle_{N+1} ; \tag{C.18}$$

as quatro classes de elementos de matriz não nulos de \mathcal{H}_{N+1} são determinadas por

$$\sum_{\sigma} {}_{r',1} \langle c_{N\sigma}^\dagger c_{(N+1)\sigma} \rangle_{r,3} = {}_N \langle Q, S, r' \parallel c_N^\dagger \parallel Q-1, S-\frac{1}{2}, r \rangle_N , \tag{C.19a}$$

$$\sum_{\sigma} {}_{r',1} \langle c_{N\sigma}^\dagger c_{(N+1)\sigma} \rangle_{r,4} = {}_N \langle Q, S, r' \parallel c_N^\dagger \parallel Q-1, S+\frac{1}{2}, r \rangle_N , \tag{C.19b}$$

$$\sum_{\sigma} {}_{r',3} \langle c_{N\sigma}^\dagger c_{(N+1)\sigma} \rangle_{r,2} = \sqrt{\frac{2S}{2S+1}} {}_N \langle Q-1, S-\frac{1}{2}, r' \parallel c_N^\dagger \parallel Q-2, S, r \rangle_N , \tag{C.19c}$$

$$\sum_{\sigma} {}_{r',4} \langle c_{N\sigma}^\dagger c_{(N+1)\sigma} \rangle_{r,2} = -\sqrt{\frac{2S+2}{2S+1}} {}_N \langle Q-1, S+\frac{1}{2}, r' \parallel c_N^\dagger \parallel Q-2, S, r \rangle_N . \tag{C.19d}$$

O próximo passo é o cálculo dos elementos de matriz invariantes, explicitado no Apêndice D.

APÊNDICE D

CÁLCULO DOS ELEMENTOS DE MATRIZ INVARIANTES

Após reduzirmos os elementos de matriz de \mathcal{H}_{N+1} - Eqs.(C.19) - a, essencialmente, elementos invariantes provindos da iteração N , resta, obviamente, determinar estes. Genericamente, o propósito é calcular o objeto

$${}_N \langle Q', S', w' \parallel c_N^\dagger \parallel Q, S, w \rangle_N, \quad (\text{D.1})$$

para o qual utilizamos a Eq.(C.3), além de expandir os autoestados de \mathcal{H}_N em termos dos estados da base utilizada antes da diagonalização:

$$|Q, S, S_z, w\rangle_N = \sum_{r,i} \mathcal{U}_{r,i}(Q, S, w) |Q, S, S_z, r, i\rangle_N, \quad (\text{D.2})$$

em que os elementos $\mathcal{U}_{r,i}(Q, S, w)$ pertencem a uma matriz \mathcal{U} ortogonal, formada pelos autovetores de \mathcal{H}_N . Com isso,

$$\begin{aligned} & {}_N \langle Q', S', w' \parallel c_N^\dagger \parallel Q, S, w \rangle_N = \\ & = \sum_{r',i'} \sum_{r,i} \mathcal{U}_{r',i'}(Q', S', w') \mathcal{U}_{r,i}(Q, S, w) \frac{{}_N \langle Q', S', S'_z, r', i' \mid c_{N\sigma}^\dagger \mid Q, S, S_z, r, i \rangle_N}{\langle S, S_z, \frac{1}{2}, \sigma \mid S', S'_z \rangle}, \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

em que os denominadores são os coeficientes de Clebsh-Gordan:

$$\left\langle S, S_z; \frac{1}{2}, \sigma \left| S', S'_z \right. \right\rangle = \begin{cases} \sqrt{\frac{S \pm S'_z + 1/2}{2S+1}} & \text{para } S' = S + \frac{1}{2} \text{ e } \sigma = \pm \frac{1}{2} \\ \mp \sqrt{\frac{S \pm S'_z + 1/2}{2S+1}} & \text{para } S' = S - \frac{1}{2} \text{ e } \sigma = \pm \frac{1}{2} \end{cases}. \quad (\text{D.4})$$

A base de estados de \mathcal{H}_N é, naturalmente, análoga a de \mathcal{H}_{N+1} , exibida nas Eqs.(C.2). A partir dela nota-se que o operador c_N^\dagger não altera r , de modo que as somatórias da Eq.(D.3) apresentam termo não nulo somente para $r = r'$. Também, devido à conservação da carga e do *spin*, é necessário que $Q' = Q + 1$ e $S' = S \pm 1/2$, respectivamente. Em vista disso, a Eq.(D.3) se reduz a

$$\begin{aligned} & {}_N \left\langle Q + 1, S', w' \left\| c_N^\dagger \right\| Q, S, w \right\rangle_N = \\ & = \sum_{i', i} \mathcal{U}_{r, i'}(Q + 1, S', w') \mathcal{U}_{r, i}(Q, S, w) {}_N \left\langle Q + 1, S', r, i' \left\| c_N^\dagger \right\| Q, S, r, i \right\rangle_N, \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

com $S' = S \pm 1/2$. Utilizamos novamente, para condensar a expressão, o teorema de Wigner-Eckart, Eq.(C.3), com o acréscimo dos índices i e i' . A matriz \mathcal{U} , proveniente da iteração N , é, por construção do método, conhecida. Quanto aos elementos invariantes da Eq.(D.5) há, similarmente ao apêndice anterior, quando trabalhávamos diretamente com os elementos de matriz, quatro deles não nulos: dois referentes a $S' = S + 1/2$ (formados pela composição de $i' = 3$ com $i = 1$ e $i' = 2$ com $i = 4$) e outra dupla com $S' = S - 1/2$ ($i' = 4$ com $i = 1$ e $i' = 2$ com $i = 3$).

Iniciamos com o cálculo do elemento composto por $i' = 3$ e $i = 1$, utilizando o teorema de Wigner-Eckart:

$${}_N \left\langle Q + 1, S + \frac{1}{2}, r, 3 \left\| c_N^\dagger \right\| Q, S, r, 1 \right\rangle_N = \frac{{}_N \left\langle Q + 1, S + \frac{1}{2}, S_z + \sigma, r, 3 \left| c_{N\sigma}^\dagger \right| Q, S, S_z, r, 1 \right\rangle_N}{\left\langle S, S_z; \frac{1}{2}, \sigma \left| S + \frac{1}{2}, S_z + \sigma \right. \right\rangle}, \quad (\text{D.6})$$

Escolhemos, arbitrariamente, $\sigma = \frac{1}{2}$. A opção por $\sigma = -\frac{1}{2}$, evidentemente, não muda o resultado, desde que sejam respeitadas as convenções de sinais que originam as Eqs.(C.10), (C.12) e (C.13) - comentadas minuciosamente no Apêndice C:

$$\begin{aligned}
& {}_N \left\langle Q+1, S+\frac{1}{2}, r, 3 \left\| c_N^\dagger \right\| Q, S, r, 1 \right\rangle_N = \\
& = \frac{{}_N \left\langle Q+1, S+\frac{1}{2}, S_z+\sigma, r, 3 \left| c_{N\sigma}^\dagger \right| Q, S, S_z, r, 1 \right\rangle_N}{\langle S, S_z; \frac{1}{2}, \sigma | S+\frac{1}{2}, S_z+\sigma \rangle} \\
& = \sqrt{\frac{(S+\frac{1}{2})+(S+\frac{1}{2})}{2(S+\frac{1}{2})}} \frac{{}_{N-1} \left\langle Q, S, S_z, r; \uparrow \left| c_{N\uparrow}^\dagger \right| Q-1, S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r; 0 \right\rangle_{N-1}}{\langle S, S_z; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2} \rangle} \quad (D.7) \\
& = \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+1}} \frac{{}_{N-1} \left\langle Q-1, S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r; \uparrow\downarrow \left| Q-1, S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r; \uparrow\downarrow \right\rangle_{N-1}}{\langle S, S_z; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2} \rangle} \\
& = \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+1}} \left(\frac{S+(S_z+\frac{1}{2})+\frac{1}{2}}{2S+1} \right)^{-1/2} \\
& = 1.
\end{aligned}$$

A seguir, calculamos o elemento composto por $i' = 2$ com $i = 4$, em que mais uma vez escolhemos $\sigma = \frac{1}{2}$:

$$\begin{aligned}
& {}_N \left\langle Q+1, S+\frac{1}{2}, r, 2 \left\| c_N^\dagger \right\| Q, S, r, 4 \right\rangle_N = \\
& = \frac{{}_N \left\langle Q+1, S+\frac{1}{2}, S_z+\sigma, r, 2 \left| c_{N\sigma}^\dagger \right| Q, S, S_z, r, 4 \right\rangle_N}{\langle S, S_z; \frac{1}{2}, \sigma | S+\frac{1}{2}, S_z+\sigma \rangle} \\
& = \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+2}} \frac{{}_{N-1} \left\langle Q-1, S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r; \uparrow\downarrow \left| c_{N\uparrow}^\dagger \right| Q-1, S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r; \downarrow \right\rangle_{N-1}}{\langle S, S_z; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2} \rangle} \\
& = \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+2}} \frac{{}_{N-1} \left\langle Q-1, S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r; \uparrow\downarrow \left| Q-1, S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r; \uparrow\downarrow \right\rangle_{N-1}}{\langle S, S_z; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | S+\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2} \rangle} \\
& = \sqrt{\frac{S+S_z+1}{2S+2}} \left(\frac{S+(S_z+\frac{1}{2})+\frac{1}{2}}{2S+1} \right)^{-1/2} \\
& = \sqrt{\frac{2S+1}{2S+2}}. \quad (D.8)
\end{aligned}$$

Agora $i' = 4$ com $i = 1$:

$$\begin{aligned}
& \left\langle Q+1, S-\frac{1}{2}, r, 4 \left\| c_N^\dagger \right\| Q, S, r, 1 \right\rangle_N = \\
& = \frac{\left\langle Q+1, S-\frac{1}{2}, S_z+\sigma, r, 4 \left| c_{N\sigma}^\dagger \right| Q, S, S_z, r, 1 \right\rangle_N}{\left\langle S, S_z; \frac{1}{2}, \sigma \left| S-\frac{1}{2}, S_z+\sigma \right\rangle} \\
& = -\sqrt{\frac{(S-\frac{1}{2})-(S_z+\frac{1}{2})+1}{2(S-\frac{1}{2})+2}} \frac{\left\langle Q, S, S_z, r; \uparrow \left| c_{N\uparrow}^\dagger \right| Q, S, S_z, r; 0 \right\rangle_{N-1}}{\left\langle S, S_z; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| S-\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2} \right\rangle} \quad (D.9) \\
& = -\sqrt{\frac{S-S_z}{2S+1}} \frac{\left\langle Q, S, S_z, r; \uparrow \left| Q, S, S_z, r; \uparrow \right\rangle_{N-1}}{\left\langle S, S_z; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| S-\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2} \right\rangle} \\
& = -\sqrt{\frac{S-S_z}{2S+1}} \left(-\sqrt{\frac{2S+1}{S-(S_z+\frac{1}{2})+\frac{1}{2}}} \right) \\
& = 1.
\end{aligned}$$

Por fim, $i' = 2$ com $i = 3$:

$$\begin{aligned}
& \left\langle Q+1, S-\frac{1}{2}, r, 2 \left\| c_N^\dagger \right\| Q, S, r, 3 \right\rangle_N = \\
& = \frac{\left\langle Q+1, S-\frac{1}{2}, S_z+\sigma, r, 2 \left| c_{N\sigma}^\dagger \right| Q, S, S_z, r, 3 \right\rangle_N}{\left\langle S, S_z; \frac{1}{2}, \sigma \left| S-\frac{1}{2}, S_z+\sigma \right\rangle} \\
& = \sqrt{\frac{S-S_z}{2S}} \frac{\left\langle Q-1, S-\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r; \uparrow\downarrow \left| c_{N\uparrow}^\dagger \right| Q-1, S-\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r; \downarrow \right\rangle_{N-1}}{\left\langle S, S_z; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| S-\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2} \right\rangle} \\
& = \sqrt{\frac{S-S_z}{2S}} \frac{\left\langle Q-1, S-\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r; \uparrow\downarrow \left| Q-1, S-\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2}, r; \uparrow\downarrow \right\rangle_{N-1}}{\left\langle S, S_z; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| S-\frac{1}{2}, S_z+\frac{1}{2} \right\rangle} \\
& = \sqrt{\frac{S-S_z}{2S}} \left(-\sqrt{\frac{2S+1}{S-(S_z+\frac{1}{2})+\frac{1}{2}}} \right) \\
& = -\sqrt{\frac{2S+1}{2S}}. \quad (D.10)
\end{aligned}$$

Em suma, os quatro elementos invariantes não nulos que compõem a somatória dada pela Eq.(D.5) são:

$${}_N \left\langle Q+1, S+\frac{1}{2}, r, 3 \left\| c_N^\dagger \right\| Q, S, r, 1 \right\rangle_N = 1, \quad (\text{D.11a})$$

$${}_N \left\langle Q+1, S+\frac{1}{2}, r, 2 \left\| c_N^\dagger \right\| Q, S, r, 4 \right\rangle_N = \sqrt{\frac{2S+1}{2S+2}}, \quad (\text{D.11b})$$

$${}_N \left\langle Q+1, S-\frac{1}{2}, r, 4 \left\| c_N^\dagger \right\| Q, S, r, 1 \right\rangle_N = 1, \quad (\text{D.11c})$$

$${}_N \left\langle Q+1, S-\frac{1}{2}, r, 2 \left\| c_N^\dagger \right\| Q, S, r, 3 \right\rangle_N = -\sqrt{\frac{2S+1}{2S}}. \quad (\text{D.11d})$$