

O grupo de renormalização de teoria de campos aplicado ao modelo de Anderson de uma impureza

Francisco Manoel Bezerra e **ROCHA***

*Instituto de Física, Universidade Federal de Goiás - *franciscoxfis@gmail.com*

Prof.Dr. Hermann Freire Ferreira Lima e **SILVA****

*Instituto de Física, Universidade Federal de Goiás - **hermann@if.ufg.br*

Palavras-chave: *Modelo de Anderson, Grupo de renormalização, Sistemas fortemente correlacionados.*

I. Introdução

Para o estudo de sistemas eletrônicos fortemente correlacionados, o modelo de Anderson de uma impureza [1] sempre desempenhou um papel importante. Ele encontra aplicação, por exemplo, em situações experimentais de sistemas nanoscópicos constituídos por objetos conhecidos como pontos quânticos. Do ponto de vista tecnológico, um entendimento mais profundo do comportamento dos pontos quânticos estaria associado ao desenvolvimento de possíveis computadores quânticos no futuro. Outra aplicação importante do modelo de Anderson consiste em descrever o efeito de impurezas magnéticas localizadas dissolvidas em metais não magnéticos numa concentração muito baixa (ligas magnéticas diluídas). Dessa forma, a matriz metálica é representada por um gás de elétrons itinerantes livres, enquanto que a impureza está associada a um nível de energia adicional separado da banda de condução. Esse nível extra de energia representa tipicamente um orbital localizado, o qual possui uma degenerescência associada ao spin.

Como uma forma alternativa de abordar este modelo, vamos aplicar neste trabalho, como um teste inicial, a técnica do grupo de renormalização de teoria de campos até dois loops ao modelo de Anderson de uma impureza. Nesse sentido, o nosso objetivo consistirá em comparar esse método com os resultados altamente precisos obtidos a partir do método do grupo de renormalização numérico de Wilson.

II. Modelo

O Hamiltoniano que descreve o modelo de Anderson de uma impureza no formalismo de segunda quantização é dado por

$$H = \sum_k \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_\sigma E_d d_\sigma^\dagger d_\sigma + \sum_{k\sigma} (V_k^* d_\sigma^\dagger c_{k\sigma} + V_k c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma) + U d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow, \quad (2.1)$$

onde $c_{k\sigma}$ destrói um elétron de condução não interagente de momentum \vec{k} , energia de dispersão ε_k , spin $\sigma = \pm \frac{1}{2}$, enquanto que d_σ destrói um elétron localizado com energia E_d e repulsão coulombiana local U . A amplitude de probabilidade de transição de um elétron da matriz metálica para a impureza e vice-versa é representada pela hibridização entre os estados dos elétrons de condução e o estado da impureza por meio das amplitudes de probabilidade V_k e V_k^* .

Alternativamente, usando uma representação desse modelo escrita em termos de uma integral funcional de campos de Grassmann, podemos integrar os graus de liberdade associados aos elétrons de condução [3, 8] e derivar o seguinte hamiltoniano efetivo:

$$H_{ef} = \sum_\sigma d_\sigma^\dagger(t) [i\partial_t - E_d] d_\sigma(t) + \sum_\sigma \int_{-\infty}^{\infty} dt' d_\sigma^\dagger(t) \times \\ \times \Delta(t-t') d_\sigma(t') + U d_\uparrow^\dagger(t) d_\uparrow(t) d_\downarrow^\dagger(t) d_\downarrow(t). \quad (2.2)$$

Esse modelo efetivo é que iremos discutir neste trabalho.

O método de ansatz de Bethe [10] bem como o grupo de renormalização numérico de Wilson [2] são capazes de reproduzir exatamente a escala de Kondo em regime de forte acoplamento. Para o ansatz de Bethe, por exemplo, obtém-se que o peso da quasi-partícula, em regime de forte acoplamento, é proporcional a escala $\omega_K \propto e^{-\frac{\pi U}{8\Delta}}$ conforme a expressão abaixo:

$$Z_{Bethe\ Ansatz} \sim \sqrt{\frac{8U}{\pi^2 \Delta}} e^{-\frac{\pi U}{8\Delta}}. \quad (2.3)$$

Neste trabalho, utilizando o grupo de renormalização de teoria de campos até dois loops, procuraremos obter esta escala e comparar com os métodos já citados.

III. Método Diagramático

O propagador livre para o modelo de Anderson de uma impureza para o caso do modelo simétrico no limite de banda ampla em que a função de hibridização é

definida como $\Delta(\omega) = \sum_k \frac{|V_k|^2}{\omega - \varepsilon_k}$ e aproximando $\Delta(\omega) = -i\Delta \text{sgn}(\omega)$, é dado por:

$$G_{\sigma}^0(\omega) = \frac{1}{\omega + i\Delta \text{sgn}(\omega)}, \quad (3.1)$$

Neste trabalho utilizamos os chamados diagramas de Feynman. Esses diagramas são um método gráfico para representar os processos de interação em um sistema de muitos corpos. A interação, em nosso caso, aparece em um diagrama de Feynman como um vértice, ou seja, uma junção de quatro linhas. Desta forma, a interação entre duas partículas, por exemplo, é representado como duas linhas retas conectadas a uma ondulação que, por sua vez, se conecta a outras duas linhas retas conforme mostrado na figura abaixo.

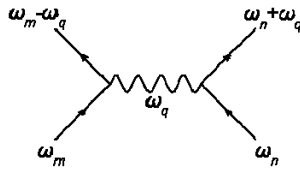


Figura 3.1: Diagrama de Feynman de primeira ordem onde é mostrada a conservação da energia.

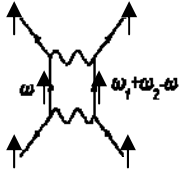
Utilizaremos esses diagramas para calcular algumas grandezas físicas do modelo de Anderson de uma impureza.

IV. Resultados Parciais Obtidos

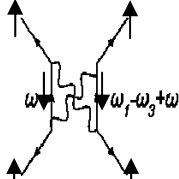
Utilizando o Hamiltoniano (2.2) e aplicando à função de Green até segunda ordem encontraremos o termo:

$$i\tilde{G}_{\sigma}(t, t') = \langle \phi_0 | T [d_{\uparrow}^{\dagger}(t_2) d_{\downarrow}^{\dagger}(t_2) d_{\uparrow}^{\dagger}(t_1) d_{\downarrow}^{\dagger}(t_1) d_{\uparrow}(t_2) d_{\downarrow}(t_2) d_{\uparrow}(t_1) d_{\downarrow}(t_1) \times \\ \times d_{\uparrow}(t) d_{\downarrow}(t) d_{\uparrow}^{\dagger}(t') d_{\downarrow}^{\dagger}(t')] | \phi_0 \rangle. \quad (4.1)$$

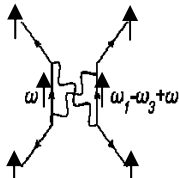
Com o auxílio do teorema de Wick, e aplicando as regras de Feynman, pode-se calcular o bracket acima de modo a obter os diagramas do modelo. O cálculo desses diagramas será importante para derivarmos as equações do grupo de renormalização e posteriormente aplicar a teoria de campos até dois loops ao nosso problema. De acordo com orientação de spin os diagramas calculados podem ter interações U_{\uparrow} , $U_{\uparrow\downarrow}$ ou U_{\downarrow} . Como exemplo, mostramos abaixo os resultados para os diagramas de canal “up”:



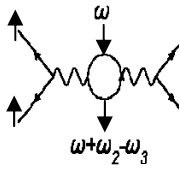
$$= \Pi_{pb}(\alpha) = U_{\uparrow}^2 \frac{(2i\Delta)}{\pi\alpha(\alpha+2i\Delta)} \left\{ \ln \left[\frac{i\Delta}{(\alpha+i\Delta)} \right] \right\}, \text{com } \alpha = \omega_1 + \omega_2 \quad (4.2)$$



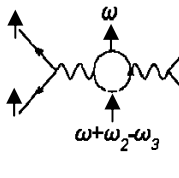
$$= \Pi_{pb}(\alpha) = U_{\uparrow\downarrow}^2 \frac{(-2i\Delta)}{\pi\alpha(\alpha+2i\Delta)} \left\{ \ln \left[\frac{i\Delta}{(\alpha+i\Delta)} \right] \right\}, \text{com } \alpha = \omega_1 - \omega_3 \quad (4.3)$$



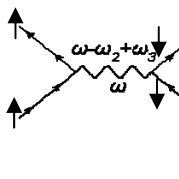
$$= \Pi_{pb}(\alpha) = U_{\uparrow}^2 \frac{(-2i\Delta)}{\pi\alpha(\alpha+2i\Delta)} \left\{ \ln \left[\frac{i\Delta}{(\alpha+i\Delta)} \right] \right\}, \text{com } \alpha = \omega_1 - \omega_3 \quad (4.4)$$



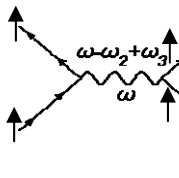
$$= \Pi_{pb}(\alpha) = -U_{\uparrow\downarrow}^2 \frac{(-2i\Delta)}{\pi\alpha(\alpha+2i\Delta)} \left\{ \ln \left[\frac{i\Delta}{(\alpha+i\Delta)} \right] \right\}, \text{com } \alpha = \omega_3 - \omega_2 \quad (4.5)$$



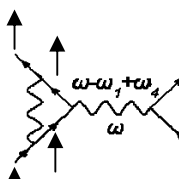
$$= \Pi_{pb}(\alpha) = U_{\uparrow}^2 \frac{(-2i\Delta)}{\pi\alpha(\alpha+2i\Delta)} \left\{ \ln \left[\frac{i\Delta}{(\alpha+i\Delta)} \right] \right\}, \text{com } \alpha = \omega_3 - \omega_2 \quad (4.6)$$



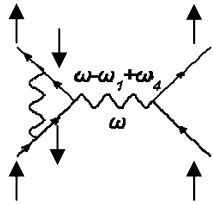
$$= \Pi_{pb}(\alpha) = U_{\uparrow\downarrow}^2 \frac{(2i\Delta)}{\pi\alpha(\alpha+2i\Delta)} \left\{ \ln \left[\frac{i\Delta}{(\alpha+i\Delta)} \right] \right\}, \text{com } \alpha = \omega_3 - \omega_2 \quad (4.7)$$



$$= \Pi_{pb}(\alpha) = U_{\uparrow}^2 \frac{(-2i\Delta)}{\pi\alpha(\alpha+2i\Delta)} \left\{ \ln \left[\frac{i\Delta}{(\alpha+i\Delta)} \right] \right\}, \text{com } \alpha = \omega_3 - \omega_2 \quad (4.8)$$



$$= \Pi_{pb}(\alpha) = U_{\uparrow}^2 \frac{(-2i\Delta)}{\pi\alpha(\alpha+2i\Delta)} \left\{ \ln \left[\frac{i\Delta}{(\alpha+i\Delta)} \right] \right\}, \text{com } \alpha = \omega_4 - \omega_1 \quad (4.9)$$



$$= \Pi_{pb}(\alpha) = U_{\uparrow\downarrow}^2 \frac{(-2i\Delta)}{\pi\alpha(\alpha+2i\Delta)} \left\{ \ln \left[\frac{i\Delta}{(\alpha+i\Delta)} \right] \right\}, \text{ com } \alpha = \omega_4 - \omega_1 \quad (4.10)$$

Procedemos da mesma forma para o cálculo dos diagramas de canal “up-down”.

IV. Resultados Esperados

Aplicando o método do grupo de renormalização de teoria de campos até dois loops ao modelo de Anderson de uma impureza, esperamos obter a chamada escala de Kondo que emerge naturalmente deste problema em forte acoplamento.

Partindo dos diagramas calculados derivaremos as equações de grupo de renormalização até dois loops para, em seguida, resolvê-las numericamente. Com esses dados e com o cálculo da auto-energia do sistema determinaremos o peso da quasi-partícula necessária para verificarmos se a escala de Kondo é reproduzida pela nossa abordagem do grupo de renormalização de teoria de campos até dois loops.

V. Referências Bibliográficas

- [1] P.W.Anderson, Phys.Rev. 124, 41 (1961).
- [2] K.G. Wilson, Rev. Mod. Phys. 47, 773 (1975).
- [3] H.R. Krishna-murthy, J.W. Wilkins e K.G. Wilson, Phys. Rev. B 21, 1003 (1980).
- [4] H. Freire e E. Corrêa, arXiv: 1009.4177v2 (2011).
- [5] R. D. Mattuck, *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem* (Dover Publications: New York, 1992).
- [6] A. Fetter e J. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (Dover Publications: New York, 2003).
- [7] H. Freire, E. Correa, A. Ferraz, Phys. Rev B 71, 165113 (2005).
- [8] L. Bartosch, H. Freire, J. J. R. Cárdenas e P. Kopietz, J. Phys.: Condens. Matter 21, 305602 (2009).
- [9] A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge University Press: New York, 1993).
- [10] A. M. Tsvelick e P. B. Wiegmann, Adv. Phys. 32, 453 (1983).