(Revisado pelo orientador)

O Método Diagramático de Feynman Aplicado ao Modelo de Anderson de

Uma Impureza

Rafael Peixoto de AMORIM¹ ¹Instituto de Física – Universidade Federal de Goiás – e-mail: peixoto_fisica@hotmail.com Prof. Dr. Hermann Freire Ferreira Lima e SILVA² ²Instituto de Física – Universidade Federal de Goiás – e-mail: hermann@if.ufg.br (Goiânia, 15 de Junho de 2011)

<u>1. OBJETIVOS</u>

O objetivo deste trabalho consistiu em descrever aspectos do modelo de Anderson de uma impureza utilizando o método diagramático de Feynman em teoria quântica de sistemas de muitos corpos.

Palavras-chave: Sistemas fortemente correlacionados, diagramas de Feynman e modelo de Anderson de uma impureza.

2. INTRODUÇÃO

Para que nós possamos ter um problema de muitos corpos, duas coisas são necessárias. A primeira delas é, obviamente, que nós tenhamos muitos corpos no sistema, ou seja, muitos elétrons, muitos átomos, muitas moléculas, etc. A segunda é que todos esses corpos interajam entre si. Caso estes corpos não estejam interagindo um com o outro, ao invés de termos um problema de muitos corpos, teríamos muitos problemas de um só corpo. Portanto, podemos definir um problema de muitos corpos como o estudo dos efeitos de interação no comportamento de um sistema de muitos corpos [1]-[4].

A importância do estudo dos problemas de muitos corpos deriva do fato de que quase todos os sistemas físicos reais que se possa imaginar são compostos por um grande conjunto de partículas interagentes. Surpreendentemente, alguns sistemas físicos nos fornecem resultados bastante significantes quando este fato é desprezado, entretanto para vários outros casos devemos tratar o problema completo de muitas partículas interagindo entre si.

Em vários sistemas de muitos corpos é bastante útil descrevermos as propriedades físicas que se originam dessas partículas reais interagentes a partir de uma representação em termos de partículas efetivas que são aproximadamente não interagentes, também chamadas de quasipartículas. Esse tratamento produz resultados em excelente concordância com os

experimentos. Isto decorre do fato de que quando uma partícula real se move através de um sistema, ela puxa ou empurra sua vizinhança e assim torna-se cercada por uma espécie de nuvem de partículas ao seu redor. Fisicamente, a quasipartícula corresponderia à partícula real junto com essa nuvem de partículas ao seu redor.

O fato de a partícula real estar cercada por uma nuvem cria uma espécie de blindagem na mesma e ela acaba interagindo apenas fracamente com as outras. A presença desta perturbação muda as propriedades da partícula real, que pode ter uma massa efetiva diferente da massa real e a quasipartícula passa a possuir um tempo de vida característico.

Em uma terminologia mais apropriada, proveniente da teoria quântica de campos, a definição de quasipartícula como: (partícula real) + (nuvem de outras partículas), pode ser escrita como: (partícula nua) + (nuvem) = (partícula vestida) ou (partícula renormalizada). Desta forma, nos referimos à interação nua para interações ocorrendo entre partículas reais e interação efetiva ou renormalizada quando ela ocorre entre quasipartículas.

Uma quasipartícula com um momento **p** pode se propagar através de um sistema de muitos corpos durante um tempo τ_p antes de interagir com outra quasipartícula. Este intervalo de tempo τ_p é o tempo de vida da quasipartícula.

A energia de uma quasipartícula livre é dada por:

$$\varepsilon' = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m^*} \tag{1}$$

onde m^* é a massa efetiva. E a auto-energia da quasipartícula é definida como a seguinte diferença:

$$\varepsilon'_{\substack{\text{quase}\\partícula}} - \varepsilon_{\substack{\text{partícula}\\nua}} = \Sigma \tag{2}$$

Isto decorre do fato de que uma partícula nua interage com o sistema de muitos corpos criando uma nuvem, e a nuvem por sua vez reage de volta sobre a partícula, perturbando seu movimento. Deste modo a partícula interage consigo mesma e muda sua própria energia.

2.1 MODELO DE ANDERSON

O modelo de Anderson de uma impureza [5] foi originalmente proposto para descrever microscopicamente os efeitos causados por uma impureza localizada nos elétrons de condução de um metal. Entretanto, posteriormente diversas outras aplicações foram descobertas e, como exemplo, podemos citar a descrição do comportamento de pontos quânticos num material semicondutor, cuja compreensão mais profunda poderia implicar no possível desenvolvimento de novos computadores quânticos.

O Hamiltoniano que descreve este modelo é dado por:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k},\sigma} \mathcal{E}_{\vec{k}} c^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\sigma} E_d d^{\dagger}_{\sigma} d_{\sigma} + \sum_{\vec{k},\sigma} \left(V^*_{\vec{k}} d^{\dagger}_{\sigma} c_{\vec{k}\sigma} + V_{\vec{k}} c^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} d_{\sigma} \right) + U d^{\dagger}_{\uparrow} d_{\uparrow} d^{\dagger}_{\downarrow} d_{\downarrow}$$
(3)

onde o primeiro termo diz respeito ao termo de energia cinética dos elétrons de condução não interagentes do metal, o segundo termo se refere à energia do estado localizado da impureza, o terceiro termo é o termo de hibridização entre estados itinerantes do metal e o estado localizado da impureza e o último termo se refere à interação coulombiana entre dois elétrons quando estes ocupam o mesmo estado localizado. Os índices $\vec{k} e \sigma$ são para indicar que o somatório é feito sobre os momentos e os spins. Nesta notação, $c_{\vec{k}\sigma}$ destrói e $c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger}$ cria um elétron de condução não interagente de momentum \vec{k} , spin $\sigma = \frac{1}{2}$, energia de dispersão $\varepsilon_{\vec{k}}$, enquanto que d_{σ} destrói e d_{σ}^{\dagger} cria um elétron localizado com energia E_d (nível de energia da impureza) e o parâmetro de repulsão coulombiana local é dado por U. O termo de hibridização, que representa a amplitude probabilidade de troca de elétron de condução com elétrons da impureza localizada, é caracterizado pelas amplitudes $V_{\vec{k}}$ e $V_{\vec{k}}^{*}$.

Uma das grandes dificuldades da utilização deste modelo é que, geralmente, ele não pode ser resolvido na sua forma mais geral. Mas em casos simplificados podemos resolvê-lo com a ajuda do chamado ansatz de Bethe [6] ou também do grupo de renormalização numérico de Wilson [7]. O problema que vamos considerar neste trabalho é o chamado modelo de Anderson de uma impureza simétrico, ou seja, que satisfaz a seguinte condição $2E_d + U = 0$. Nesse caso, o Hamiltoniano do modelo possui simetria partícula-buraco, isto é, permanece invariante sob as transformações $c_{\bar{k}\sigma} \rightarrow c^{\dagger}_{-\bar{k}\sigma}$ e $d_{\sigma} \rightarrow -d^{\dagger}_{\sigma}$. Vamos atacar esse modelo utilizando o método diagramático de Feynman aplicado à teoria quântica de sistemas de muitos corpos. O conceito central do teorema de Wick [1]-[4] está no produto normal ordenado, que tem a propriedade de ordenar todos os operadores de tal forma que os operadores de destruição se situem à direita e os de criação à esquerda. Ele é definido como:

$$N \Big[ABC^{\dagger}DF^{\dagger}G^{\dagger}... \Big] = \Big(-1\Big)^{p} \Big[C^{\dagger}F^{\dagger}G^{\dagger}...ABD... \Big]$$

$$\tag{4}$$

onde P é o número de permutações feitas com os operadores da vizinhança para obter a ordem mostrada acima. A importância do produto normal se dá pelo fato de que o valor esperado tomado no estado fundamental do Hamiltoniano não-interagente do modelo $|0\rangle$ é nulo, ou seja:

$$\left\langle 0 \left| N[ABC^{\dagger}D...] \right| 0 \right\rangle = 0 \tag{5}$$

Também é necessário introduzir o conceito de contração de dois operadores, que é a diferença entre o operador de ordenamento temporal e o produto normal:

$$\overrightarrow{AB} = T[AB] - N[AB] \tag{6}$$

O operador ordenamento temporal T ordena os operadores da direita para a esquerda de acordo com o tempo, ou seja

$$T \left[d_{\sigma}(t) d_{\sigma}^{\dagger}(t') \right] = \begin{cases} d_{\sigma}(t) d_{\sigma}^{\dagger}(t'), & se \quad (t' < t), \\ -d_{\sigma}^{\dagger}(t') d_{\sigma}(t), & se \quad (t' > t). \end{cases}$$

O teorema de Wick pode ser decomposto em uma soma sobre produtos normais puros, produtos normais com uma ou mais contrações, e produtos completamente contraídos:

$$T[UVW...XYZ] = N[UVW...XYZ] + N[UVW...XYZ] + N[UVW...XYZ] + N[UVW...XYZ] + N[UVW...XYZ] + (7)$$

$$N[UVW...XYZ] + N[UVW...XYZ] + ...$$

Tomando o valor esperado no estado fundamental do Hamiltoniano não-interagente do modelo em (7) e utilizando a propriedade de (5), percebemos que:

$$\langle 0 | T \{UVW...XYZ\} | 0 \rangle = UVW...XYZ + UVW...XYZ + ...$$

= soma sobre todos os produtos
totalmente contraídos possíveis. (8)

A partir da definição acima, temos que a contração de dois operadores, $a(t_2)$ e $a^{\dagger}(t_1)$, para $t_2 > t_1$, é:

$$a(t_2)a^{\dagger}(t_1) = \left< 0 | T\{a(t_2)a^{\dagger}(t_1)\} | 0 \right>$$
(9)

onde $\langle 0 | T\{a(t_2)a^{\dagger}(t_1)\} | 0 \rangle$ é a unidade imaginária *i* multiplicada pela função de Green:

$$iG^{(0)}(t_2 - t_1) = \left\langle 0 | T\{a(t_2)a^{\dagger}(t_1)\} | 0 \right\rangle$$
(10)

<u>3. METODOLOGIA</u>

3.1 MÉTODO DIAGRAMÁTICO

A técnica diagramática desenvolvida por Feynman nos fornece uma interpretação pictórica do processo físico envolvido. A técnica usada neste trabalho utiliza estes diagramas para calcular as amplitudes de probabilidades de que determinadas interações aconteçam, resultando numa soma infinita. Geralmente estas somas, em algumas aproximações, se tornam uma série geométrica, que por sua vez pode ser facilmente determinada.

Utilizando o teorema de Wick e definindo como propagador de uma partícula:

$$iG_{\sigma}^{(0)}(t_2 - t_1) = \langle 0 | T \{ \hat{a}_{\sigma}(t_2) \hat{a}_{\sigma}^{\dagger}(t_1) \} | 0 \rangle$$

onde $\hat{a}^{\dagger}(t_1)$ cria uma partícula num tempo t_1 , $\hat{a}(t_2)$ destrói uma partícula num tempo t_1 e $T\{...\}$ é operador de ordenamento temporal. Desta forma a partícula se propaga livremente de um tempo t_1 até um tempo t_2 . Comparando a equação (9) com a (6), percebemos que cada contração corresponde a $i \times propagador$.

Na representação de Feynman desenhamos uma linha reta, que vai de t_1 à t_2 , para representar uma partícula se propagando livremente, onde desenhamos uma seta para indicar o sentido de propagação.

$$\mathbf{G}^{(0)}(t_2 - t_1) \wedge t_1$$

Figura 1. Diagrama de Feynman de um férmion não interagente.

Nesta convenção, temos uma partícula se propagando para $t_2 > t_1$ e um buraco se propagando para $t_2 < t_1$. Se houver um potencial atuando sobre o férmion não interagente, a representação é feita com um ponto na linha reta. Se houver outra partícula se propagando e estas duas se interagirem por meio de um potencial qualquer, desenhamos uma linha ondulada que liga as duas partículas que se propagam.



Figura 2. Diagrama de Feynman de dois férmions interagentes.

onde as funções de Green correspondente à figura 2 é o propagador de duas partículas, que é definido como:

$$iG_4(t_2 - t_1) = \left\langle \Psi_0 \left| T\{\hat{a}_{\sigma_4}(t_4)\hat{a}_{\sigma_3}(t_3)\hat{a}^{\dagger}_{\sigma_2}(t_2)\hat{a}^{\dagger}_{\sigma_1}(t_1)\} \right| \Psi_0 \right\rangle$$
(11)

onde $\hat{a}^{\dagger}(t)$ cria partículas no tempo t e $\hat{a}(t)$ destrói partículas no tempo t e $\langle \Psi_0 | ... | \Psi_0 \rangle$ é o estado fundamental da Hamiltoniana com interação.

Usualmente, faz-se a transformada de Fourier dos propagadores temporais para obtermos um propagador que dependa da frequência, $G^{(0)}(\omega)$:

$$G^{(0)}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d(t_2 - t_1) G^{(0)}(t_2 - t_1) e^{i\omega(t_2 - t_1)} .$$
(12)

Quando trabalhamos no espaço de frequência, em cada vértice do diagrama (interação entre dois férmions) a frequência deve ser conservada.

Quando calculamos as amplitudes de probabilidade da interação entre dois férmions, às vezes ela recai numa série geométrica. Calculando esta série podemos chegar à conhecida equação de Dyson, que no espaço de frequências, é dada por:

$$G(\omega) = \frac{G^{(0)}}{1 - G^{(0)}\Sigma(\omega)} = \frac{1}{\left(G^{(0)}\right)^{-1} - \Sigma(\omega)},$$
(13)

onde G_0 é o propagador livre e $\Sigma(\omega)$ corresponde à auto-energia do sistema envolvido. Esta última descreve a renormalização dos estados de uma única partícula devido à interação com o sistema de muitas partículas.

A auto-energia pode ser escrita como sendo composta de duas partes, uma parte real e uma imaginária, de forma que podemos escrevê-la da seguinte forma:

$$\Sigma(\omega) = \operatorname{Re}\Sigma(\omega) + i\operatorname{Im}\Sigma(\omega), \qquad (14)$$

onde a parte imaginária de $\Sigma(\omega)$ nos permite calcular o tempo de vida da quasipartícula, da seguinte forma:

$$\tau^{-1} = -\operatorname{Im}\Sigma(\omega) \tag{15}$$

e a parte real nos fornece o peso da quasipartícula:

$$Z = \frac{1}{\left(1 - \frac{d}{d\omega} \operatorname{Re}\Sigma(\omega)\Big|_{\omega=0}\right)}.$$
(16)

3.2 REGRAS DE FEYNMAN DO MODELO DE ANDERSON

Os propagadores são ferramentas extremamente úteis no tratamento de problemas de muitos corpos. Eles são essencialmente generalizações das familiares funções de Green e determinam as amplitudes de probabilidade de interação entre férmions de um sistema. Os propagadores são definidos para os diversos casos e modelos que desejamos estudar.

A descrição quântica detalhada de um sistema de muitos corpos requer uma função de onda dependente do tempo para o sistema inteiro. E até mesmo os computadores mais velozes demorariam muito tempo na resolução de problemas desta forma. Felizmente, verifica-se que, a fim de encontrar propriedades físicas importantes de um sistema, não é necessário conhecer detalhadamente o comportamento de cada partícula neste, mas apenas o comportamento médio de uma ou duas partículas típicas. As quantidades que descrevem este comportamento médio são os propagadores, e as propriedades físicas podem ser calculadas diretamente através deles.

O propagador livre de uma partícula para o modelo de Anderson, para o limite $T \rightarrow 0$, isto é para o limite de baixas temperaturas, é dado por:

$$G_{dd}^{\sigma}(t) = -i \left\langle \Psi_0 \left| T[d_{\sigma}(t), d_{\sigma}^{\dagger}(0)] \right| \Psi_0 \right\rangle, \tag{17}$$

onde $\langle \Psi_0 | ... | \Psi_0 \rangle \dot{e}$ o estado fundamental da Hamiltoniana com interação, ou seja $H = H_0 + V$.

Utilizando a transformada de Fourier para o propagador temporal,

$$G(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \ e^{i\omega t} G(t), \tag{18}$$

e ainda considerando o modelo de Anderson de uma impureza no limite de banda ampla, encontramos no formalismo de Matsubara a seguinte expressão para o propagador livre:

$$G^{(0)}(\omega) = \frac{-i}{\omega + \Delta \operatorname{sgn}(\omega)}$$
(19)

onde a função $sgn(\omega)$ é definida como:

$$\operatorname{sgn}(\omega) = \begin{cases} 1, & \operatorname{se} \ \omega > 0 \\ -1, & \operatorname{se} \ \omega < 0 \end{cases}$$
(20)

e a função de hibridização é definida como $\Delta(\omega) = \sum_{k} \frac{|V_k|^2}{\omega - \varepsilon_k}$ que no limite de banda ampla se

torna $\Delta(\omega) = -i\Delta \operatorname{sgn}(\omega)$.

Da definição acima do propagador para este modelo, podemos perceber que ele possui dependência apenas na frequência, desta forma, nos diagramas de Feynman integra-se apenas sobre as freqüência intermediárias. A partir desta definição também pode-se escrever uma tabela que nos servirá como um dicionário para calcularmos as interações a partir dos diagramas.



Tabela 1. Dicionário para os diagramas de Feynman

A função de Green para duas partículas é definida como segue na equação (11) e os diagramas de correções ao vértice apresentados nas figuras 3 e 4 são a soma das amplitudes de probabilidade de que duas partículas entrem no sistema, uma com frequência ω_1 e outra ω_2 , interajam entre si e saiam com frequência ω_3 e ω_4 . Em cada vértice a frequência e o spin devem ser conservados.

Na figura 3 estão representados todos os diagramas partícula-partícula e partículaburaco do modelo de Anderson de uma impureza até um loop para o canal *up*. Este canal é definido como a interação entre duas partículas onde ambas entram no sistema com spin *up* interage com a outra e saem com spin *up*, podendo ou não inverter o spin nos estados intermediários.

Na figura 4 fizemos a mesma expansão, porém agora para o canal *up-down*. Este canal é definido como a interação entre duas partículas onde aquela que entra no sistema com spin *up* interage com a outra e sai com spin *down* e aquela que entra com spin *down* interage e sai com spin *up*.



Figura 3. Expansão diagramática do modelo de Anderson de uma impureza para o canal up.



Figura 4. *Expansão diagramática do modelo de Anderson de uma impureza para o canal updown.*

Com base na tabela 1 podemos calcular os diagramas de segunda ordem, onde para o canal *up*, temos:

Esta integral pode ser dividida em três:

.

$$\Pi_{pp}(\alpha) = U_{\uparrow}^{2} \left[\int_{-\infty}^{0} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{(\omega - \Delta)} \frac{1}{(\alpha - \omega + \Delta)} + \int_{0}^{\alpha} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{(\omega + \Delta)} \frac{1}{(\alpha - \omega + \Delta)} + \int_{\alpha}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{(\omega + \Delta)} \frac{1}{(\alpha - \omega - \Delta)} \right]$$

Estas integrais podem ser facilmente resolvidas usando frações parciais, de onde se obtém:

$$\Pi_{pp}(\alpha) = U_{\uparrow}^{2} \frac{2\Delta}{\pi |\alpha| (2\Delta + |\alpha|)} \ln\left(\frac{\Delta + |\alpha|}{\Delta}\right)$$
(22)

onde o módulo em α se dá pelo fato de que este resultado é válido tanto para $\alpha > 0$ quanto para $\alpha < 0$. Procedendo de forma análoga para os outros diagramas obtemos:

$$\int_{\omega} \int_{\omega} \int_{$$

$$\int_{\alpha} \int_{\alpha} \int_{$$











De modo análogo, para o canal up-down temos:

Dessa maneira, constata-se que todos os diagramas de Feynman de correções ao vértice até um loop associados ao modelo de Anderson de uma impureza simétrico não apresentam nenhum tipo de divergência ou singularidade no limite de baixa energia e que, portanto, uma descrição em termos da teoria do líquido de Fermi de Landau com excitações de quasipartículas bem definidas é de fato apropriada para descrever esse modelo nesse regime.

5. CONCLUSÕES

Em suma, utilizando o método diagramático de Feynman aplicado ao modelo de Anderson de uma impureza simétrico no limite de ampla, foi calculado todos os diagramas de correção ao vértice do modelo até um loop. Constatou-se que nenhum desses diagramas apresentava nenhum tipo de singularidade ou divergência o que está de acordo com o fato de que esse sistema é bem descrito pela teoria do líquido de Fermi de Landau no limite de baixas energias.

Como perspectiva futura deste trabalho, o próximo passo consistirá na derivação das chamadas equações do grupo de renormalização até um loop para esse modelo, bem como o cálculo dos efeitos da auto-energia até dois loops. Isso resultará em um sistema de equações diferenciais acopladas que deverão ser resolvidas numericamente. Com isso, verificaremos se essa metodologia é capaz de reproduzir a chamada escala de Kondo que emerge naturalmente desse problema em um regime de forte acoplamento [8], [9].

6. BIBLIOGRAFIA

[1] R. D. Mattuck – *A guide to Feynman diagrams in the many-body problem*. (Dover Publications, Second Edition 1976).

[2] G. D. Mahan, Many-Particle Physics (Plenum Press: New York, 1993).

[3] H. Bruus e K. Flensberg, *Many-body Quantum Theory in Condensed Matter Physics* (Oxford Graduate Texts: New York, 2009).

[4] A. Fetter e J. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (Dover Publications: New York, 2003).

[5] P. W. Anderson, Phys.Rev. 124, 41 (1961).

[6] A. M. Tsvelick and P. B. Wiegmann, Adv. Phys. 32, 453 (1983)

[7] H. R. Krishnamurty, J. W. Wilkins, and K. G. Wilson, Phys. Rev. B 21, 1003 (1980).

[8] L. Bartosch, H. Freire, J. J. R. Cárdenas e P. Kopietz, J. Phys.: Condens. Matter 21, 305602 (2009).

[9] H. Freire and E. Corrêa, arXiv: 1009.4177v2 (2011) – Submetido para publicação.