

UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS  
INSTITUTO DE FÍSICA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Francisco Manoel Bezerra e Rocha

**O Método do Grupo de Renormalização de Teoria de Campos  
Aplicado ao Modelo de Anderson de uma Impureza**

GOIÂNIA

20 de Julho de 2012

*Francisco Manoel Bezerra e Rocha*

**O Método do Grupo de Renormalização de Teoria de Campos  
Aplicado ao Modelo de Anderson de uma Impureza**

*Dissertação submetida ao Instituto de Física da Universidade Federal de Goiás como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Física.*

**ORIENTADOR:** *Prof. Dr. Hermann Freire Ferreira Lima e Silva*

**GOIÂNIA-GO**

20 de Julho de 2012

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)  
GPT/BC/UFG**

R672m Rocha, Francisco Manoel Bezerra e.  
O método do grupo de renormalização de teoria de campos aplicado ao modelo de Anderson de uma impureza [manuscrito] / Francisco Manoel Bezerra e Rocha. - 2012.  
75 f. : il., figs.

Orientador: Prof. Dr. Hermann Freire Ferreira Lima e Silva

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Goiás, Instituto de Física, 2012.

Bibliografia.

Inclui lista de figuras.

Apêndices.

1. Grupo de Renormalização. 2. Modelo de Anderson.  
I. Título.

CDU: 530.145

*A Deus, Anna e Mateus.*

# Agradecimentos

Agradeço à minha esposa Anna Carime, por ser o sustentáculo de amor e carinho em minha vida.

Agradeço ao meu filho Mateus, porque sua mera existência representa para mim o futuro certo.

Sou também grato à toda minha família, por estar constantemente presente em minha vida, sendo por isso, a base do que sou hoje.

Agradeço enfaticamente ao meu orientador, o professor doutor Hermann Freire Ferreira Lima e Silva pela firmeza, disponibilidade e dedicação durante todo este trabalho.

Agradeço a todos os meus colegas de pós-graduação na pessoa de Vanuildo Silva de Carvalho, por seu espírito de coletividade.

Expresso meu agradecimento à Secretaria de Estado de Educação por apostar em mim como educador.

Por fim, agradeço ao apoio financeiro fornecido pela CAPES ao longo de meu mestrado.

# Conteúdo

<b>Lista de Figuras</b>	<b>3</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>7</b>
<b>2 O Modelo de Anderson de uma Impureza</b>	<b>13</b>
2.1 Hamiltoniano do modelo . . . . .	14
2.2 Representação do modelo via integral funcional . . . . .	16
2.2.1 Estados coerentes e integral de caminho . . . . .	16
2.2.2 Estados coerentes: férmions . . . . .	17
2.2.3 Integral de caminho para a função de partição . . . . .	20
2.2.4 Modelo efetivo de Anderson em termos de uma integral funcional . . . . .	23
<b>3 Método Diagramático</b>	<b>25</b>
3.1 Função de Green para o modelo de Anderson . . . . .	25
3.2 Teorema de Wick . . . . .	29
3.3 Regras de Feynman . . . . .	31
3.4 Teoria de perturbação convencional . . . . .	35
<b>4 O Grupo de Renormalização</b>	<b>39</b>
4.1 Introdução ao grupo de renormalização . . . . .	39
4.2 Sistemática do grupo de renormalização . . . . .	41
4.3 O grupo de renormalização até um <i>loop</i> . . . . .	42
4.4 Cálculo da auto-energia no modelo de Anderson . . . . .	45
4.5 Equações do grupo de renormalização com efeitos da auto-energia . . . . .	48
4.6 Susceptibilidade uniforme de spin . . . . .	49
<b>5 Resultados: Cálculos Numéricos</b>	<b>53</b>
5.1 O método numérico . . . . .	53
5.2 O fluxo do GR dos acoplamentos . . . . .	54

5.3	O fluxo do peso da quasipartícula . . . . .	55
5.4	Inverso do peso da quasipartícula em função dos acoplamentos . . . . .	56
5.5	Resultados para a função resposta e a susceptibilidade de spin . . . . .	59
<b>6</b>	<b>Conclusão</b>	<b>63</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>66</b>

# Lista de Figuras

2.1	Modelo de Anderson simétrico de uma impureza. A matriz metálica é representada por uma banda de condução de largura $2W$ com estados de energia $\epsilon_{\mathbf{k}}$ e o nível de Fermi representado pelo potencial químico $\mu$ . A impureza corresponde a um nível de energia localizado caracterizado pela energia $E_d$ . A hibridização ocorre via as amplitudes de probabilidades $V_{\mathbf{k}}$ e $V_{\mathbf{k}}^*$ . . . . .	16
3.1	Propagador livre de $t$ até $t'$ . . . . .	29
3.2	Propagador livre $G_{\sigma}^{(0)}(i\omega)$ . . . . .	31
3.3	Processo de interação. . . . .	31
3.4	Representação em termos de diagramas de Feynman dos quatro tipos de canais no modelo de Anderson de uma impureza. . . . .	32
3.5	Função de Green dada em termos dos propagadores livres e da auto-energia. . .	33
3.6	Auto-energia dada em função dos diagramas irreduzíveis de primeira e segunda ordem. . . . .	33
3.7	(a) Representação esquemática da função de Green de duas partículas em termos dos diagramas de Feynman. (b) Função vértice irreduzível de quatro pontos em função de alguns diagramas de Feynman de interação entre duas partículas. . . .	36
3.8	Bolhas do tipo partícula-partícula e partícula-buraco. . . . .	37
3.9	Os diagramas de Feynman correspondentes ao canal de partículas com spins iguais até um <i>loop</i> . . . . .	38
3.10	Os diagramas de Feynman correspondentes ao canal de partículas com spins opostos até um <i>loop</i> . . . . .	38
4.1	Diagramas de Feynman para auto-energia até dois <i>loops</i> . O último diagrama do contratermo da auto-energia corresponde a correção do peso da quasipartícula. .	45

4.2	Os diagramas de Feynman do canal de partícula de mesmo spin correspondentes ao cálculo da função resposta uniforme do sistema até um <i>loop</i> . A função resposta renormalizada é representada, na figura, por círculos cinzas e os seu contratermo pelo círculo cinza com uma cruz. . . . .	50
4.3	Os diagramas de Feynman do canal de partícula de spin contrários correspondetes ao cálculo da função resposta uniforme do sistema até um <i>loop</i> . A função resposta renormalizada é representada, na figura, por círculos cinzas e os seu contratermo pelo círculo cinza com uma cruz. . . . .	51
4.4	O diagrama de Feynman associado à susceptibilidade uniforme de spin. . . . .	52
5.1	Fluxo de renormalização até um <i>loop</i> dos acoplamentos efetivos do modelo de Anderson de uma impureza. Como condição inicial utilizamos $l = 0$ , $U_{\uparrow\uparrow} = 0$ e $U_{\uparrow\downarrow} = U$ onde $U$ é o parâmetro de interação local do modelo de Anderson. . . .	55
5.2	Fluxo para o peso da quasipartícula para quatro valores de acoplamentos. . . . .	56
5.3	O inverso do peso da quasipartícula como função de $U/(\pi\Delta)$ utilizando o grupo de renormalização de teoria de campos (GRTC). Como comparação colocamos os resultados da teoria de perturbação até segunda ordem (TP) [3] e do grupo de renormalização numérico (GRN) extraído da Ref. [26]. . . . .	57
5.4	O inverso do peso da quasipartícula como função de $U/(\pi\Delta)$ utilizando o grupo de renormalização de teoria de campos (GRTC) para $\Lambda_0 = 0,1\Delta$ . Comparamos este resultado com o dado pelo método Bethe ansatz [39] e pelo método do grupo de renormalização numérico (GRN) extraído da Ref. [26]. . . . .	58
5.5	Função resposta linear de spin em função do passo do grupo de renormalização utilizando o método do grupo de renormalização de teoria de campos. . . . .	60
5.6	A razão $\chi_{spin}/\chi_0$ como função de $U_0/(\pi\Delta)$ utilizando o grupo de renormalização de teoria de campos (GRTC). Para comparação colocamos o resultado dado pelo grupo de renormalização numérico [25]. . . . .	61

# Resumo

Nesta dissertação, aplicamos o método do grupo de renormalização (GR) perturbativo construído a partir de uma abordagem mista que mescla um cálculo até um *loop* para os acoplamentos efetivos e um cálculo até dois *loops* para a auto-energia do modelo de Anderson de uma impureza com simetria partícula-buraco. Para isso, utilizamos o método diagramático de Feynman aplicado ao modelo e iniciamos nossa análise calculando todos os chamados diagramas de correção ao vértice até um *loop*. Os efeitos de correlação nas excitações de uma partícula são vistos mais claramente por meio do cálculo da auto-energia e de uma quantidade física diretamente relacionada que é o peso da quasipartícula. Além disso, para determinarmos a natureza do estado fundamental desse modelo, efetuamos também o cálculo de GR da chamada susceptibilidade uniforme de spin. Desenvolveremos, em seguida, a técnica do GR, adaptando-a convenientemente ao nosso problema de interesse. O próximo passo consistiu em derivar analiticamente e então resolver numericamente as equações diferenciais acopladas para os acoplamentos efetivos, o peso da quasipartícula e a susceptibilidade uniforme de spin. Mostramos que os nossos resultados concordam qualitativamente com outros trabalhos analíticos disponíveis na literatura como, por exemplo, o método do grupo de renormalização funcional. Procuramos também comparar nossos resultados com o chamado método do GR numérico de Wilson. Esse último método fornece resultados numéricos altamente precisos para as grandezas aqui calculadas em nosso modelo, de modo que essa técnica servirá como uma referência-padrão para nossa abordagem analítica. Nesse sentido, como o método do GR de teoria de campos se revela uma técnica flexível e mais simples de ser utilizada em cálculos perturbativos de ordens superiores se comparada com algumas implementações do método do grupo de renormalização funcional, vamos argumentar que a presente metodologia do GR pode oferecer uma abordagem analítica alternativa para descrever as correlações eletrônicas contidas no modelo de Anderson de uma impureza.

# Abstract

We apply the perturbative field-theoretical renormalization group (RG) implemented within an approach which considers the calculation for the effective couplings up to one loop and the computation of the self-energy up to two loops of the single-impurity Anderson model with particle-hole symmetry. To this end, we follow Feynman's diagrammatic method applied to the model and we begin our analysis by calculating the so-called vertex corrections up to one loop. The effect of correlations on the single-particle excitations is viewed most clearly by means of the computation of the self-energy and its closely-related quantity: the quasiparticle weight. Moreover, to determine the nature of the ground state of the model, we also perform the RG calculation of the so-called uniform spin susceptibility. Then we apply the RG technique, adapting it conveniently to our problem at hand. The next step consists of deriving analytically and solving numerically the coupled differential RG flow equations for the effective couplings, the quasiparticle weight and the uniform spin susceptibility. We show that our results agree qualitatively with other analytical works available in the literature, such as, e.g., the functional RG. To benchmark our method, we compare our results with Wilson's numerical RG data. This latter method provides highly accurate numerical results for the quantities analyzed here and, for this reason, it will be an important check for our analytical method. Since the field-theoretical RG turns out to be a flexible technique and also simpler to be implemented at higher orders if compared to some versions of the functional RG method, we argue here that the present methodology could potentially offer a possible alternative to other analytic RG methods to describe electronic correlations within the single-impurity Anderson model.

# Capítulo 1

## Introdução

Atualmente, vários métodos teóricos vêm sendo desenvolvidos na área da física da matéria condensada com o objetivo de descrever propriedades eletrônicas e magnéticas de materiais chamados de sistemas fortemente correlacionados que envolvem um grande número de partículas (da ordem de  $10^{23}$ ) interagindo fortemente entre si. A importância desses sistemas está relacionada com o fato de que muitos desses materiais exibem fenômenos físicos interessantes (e que têm um grande potencial tecnológico) como, por exemplo, supercondutividade em altas temperaturas, transição metal-isolante, efeito Kondo, entre vários outros. Tecnicamente falando, um sistema eletrônico é dito fortemente correlacionado quando a dinâmica de uma partícula desse sistema influencia de modo fundamental a dinâmica de todas as outras partículas. Nesses casos, qualquer abordagem teórica baseada na chamada aproximação de elétrons independentes pode, a priori, falhar em descrever corretamente as propriedades desses sistemas. Dentro desse cenário, uma estratégia crucial para atacar esse problema consiste normalmente em definir modelos eletrônicos (em um certo sentido, simplificados) que incluam as correlações fortes entre as partículas e que capturem, dessa forma, a essência da física que se pretende descrever em cada tipo de sistema.

Um modelo eletrônico fortemente correlacionado que até hoje ocupa uma posição de destaque neste tipo de problema é o chamado modelo de Anderson de uma impureza [1], [2] e [3]. Esse modelo foi, originalmente, proposto para descrever o efeito de uma impureza localizada que deriva de um íon como Fe ou Co com camada  $d$  parcialmente preenchida inserida em um

metal não-magnético. Esse modelo contém um nível de energia eletrônico associado ao estado localizado da impureza que acopla com a banda de condução (que representa a matriz metálica na qual a impureza está inserida) descrita efetivamente por um gás de elétrons livres. Os elétrons da matriz metálica podem migrar para o nível da impureza (e vice-versa) de modo que quando o estado localizado estiver duplamente ocupado, estes elétrons ficarão sob a influência de uma repulsão coulombiana.

Para que tenhamos uma ideia da importância atual do modelo de Anderson para a área de nanotecnologia, podemos citar, por exemplo, uma aplicação recente desse modelo que consiste nos chamados pontos quânticos acoplados a contatos metálicos [4]. Esses pontos quânticos são definidos como estruturas nanoscópicas que se comportam como regiões localizadas em um semicondutor, onde os elétrons são capazes de interagir somente em uma região de confinamento aproximadamente zero-dimensional. De um ponto de vista teórico, uma outra aplicação desse modelo consiste na construção da chamada Teoria Dinâmica de Campo Médio (no inglês, DMFT), que essencialmente mapeia um sistema fortemente correlacionado no limite de dimensão alta ou número de coordenação alta da rede cristalina [5] em um modelo de Anderson de uma impureza efetivo com uma condição adicional de auto-consistência [6]. O método de DMFT, combinado com métodos de cálculo de estrutura de bandas como a teoria de densidade funcional [7], vem sendo aplicada com êxito para explicar o comportamento de alguns materiais fortemente correlacionados.

Tendo em vista toda esta potencialidade do modelo de Anderson, vários métodos teóricos foram desenvolvidos com a finalidade de descrevê-lo ao longo de sua história. Dentre esses métodos, podemos citar: ansatz de Bethe [8], método do grupo de renormalização numérico (GRN) de Wilson [9], diagonalização exata [10], teoria de perturbação iterativa [11], algoritmo de Hirsch-Fye [12], métodos de Monte-Carlo quântico diagramáticos com tempo contínuo [13], entre outros. Muitos desses métodos são extremamente úteis, mas também apresentam do ponto de vista prático algumas limitações como, por exemplo, instabilidades numéricas em alguns casos, problemas de sinal em rotinas de Monte-Carlo quântico, efeitos

de tamanho finito, que restringem um pouco suas aplicações no contexto de algumas situações físicas importantes. Vale a pena mencionar que o método altamente preciso do GRN desenvolvido por Wilson [14] e a técnica do ansatz de Bethe resolvem corretamente o modelo de Anderson de uma impureza no limite de baixas energias (ou baixas temperaturas). Essas duas abordagens sem dúvida servem hoje como referências-padrão para qualquer abordagem teórica alternativa que se propõe a descrever o modelo de Anderson de uma impureza. Nesse sentido, um resultado fundamental obtido para o modelo de Anderson de uma impureza é que este modelo é bem descrito em baixas energias (e/ou baixas temperaturas) pela chamada teoria do líquido de Fermi de Landau [15], [16] para todos os parâmetros de interação. A teoria do líquido de Fermi, que foi proposta por Landau na década de 50, se baseia no conceito de excitações de quasipartícula bem-definidas no limite de baixa energia e que têm uma correspondência unívoca com as partículas não-interagentes de um gás de elétrons livres. Outro resultado importante para esse modelo é o aparecimento no problema de uma escala de energia gerada dinamicamente no limite de acoplamentos fortes, a chamada escala de Kondo. Nesse limite, todas as grandezas físicas do modelo passam a depender explicitamente dessa escala. Vamos discutir mais sobre a escala de Kondo mais adiante nesta dissertação de mestrado.

Por outro lado, do ponto de vista técnico, o custo computacional do método do GRN de Wilson é relativamente alto, o que limita, por exemplo, aplicações dessa abordagem a problemas com muitas impurezas que são relevantes em várias situações de interesse físico. Além disso, a técnica do ansatz de Bethe também só pode ser aplicada em situações muito especiais em que o modelo é dito integrável e não permite uma aplicação direta para algumas generalizações um pouco mais complicadas do mesmo modelo. Isso tem motivado muitos pesquisadores no mundo a desenvolver métodos teóricos alternativos que possam descrever corretamente aspectos importantes desse modelo para todos os limites de interação, mas que tenham também a vantagem adicional de serem um pouco mais flexíveis do ponto de vista computacional. Dentre os vários métodos disponíveis na literatura, o esquema do grupo de renormalização (GR) analítico (ou o método semi-analítico do GR funcional [17] - [29]) vem dando alguns resultados promissores para

esse e outros modelos. A filosofia geral do GR consiste em derivar um modelo efetivo de baixa energia para o problema, de tal forma a incluir exatamente a mesma física do modelo original. Essa ideia pode ser implementada analiticamente de muitas maneiras. Nesta dissertação, vamos nos focar na chamada estratégia do método do GR de teoria de campos que consiste em reescrever o problema original (redefinindo os campos do modelo e os seus acoplamentos) em termos das grandezas físicas correspondentes renormalizadas ou efetivas, apropriadas para a escala de observação de interesse. Vamos detalhar esse método ao longo deste trabalho de dissertação.

Recentemente, foi implementado na Ref. [25] um estudo teórico utilizando o grupo de renormalização funcional de um *loop* para descrever várias quantidades do modelo como, por exemplo, a massa efetiva, a susceptibilidade de spin estática e a função espectral. Com esse trabalho, esses autores atingiram bons resultados para o regime de fraco acoplamento, embora não tenha sido possível reproduzir a escala Kondo para acoplamentos fortes. Outro estudo que devemos mencionar foi realizado na Ref. [26] que utilizou um desacoplamento do tipo Hubbard-Stratonovich [27] da equação exata incluindo tanto férmions quanto bósons no esquema do grupo de renormalização para a descrição da função espectral do modelo. Dessa maneira, uma estrutura de três picos na função espectral para temperaturas finitas foi obtida. Esse resultado concorda qualitativamente com dados altamente precisos do GRN para acoplamentos intermediários. Além desses trabalhos, podemos citar ainda o estudo recente realizado na Ref. [29] em que uma generalização funcional do GR de teoria de campos foi desenvolvida para implementar um cálculo de dois *loops* na auto-energia junto com cálculos das funções de acoplamento do modelo de Anderson de uma impureza em  $T = 0$ . Essa última abordagem do GR reproduz, de forma bem sucedida, alguns aspectos importantes como, por exemplo, o peso da quasipartícula do modelo para acoplamentos fracos e moderados do modelo.

Por essa razão, nosso objetivo nesta dissertação será o de implementar o método analítico do GR de teoria de campos até um *loop* para os acoplamentos e dois *loops* para a auto-energia para o modelo de Anderson de uma impureza. Além disso, sempre que possível,

compararemos nossos resultados com dados na literatura do GRN de Wilson e do ansatz de Bethe, que serão utilizados como referências-padrão para o nosso método. Outra meta deste trabalho consistirá em verificar se essa abordagem do GR de teoria de campos reproduz corretamente o resultado de que o modelo é bem-descrito pela teoria do líquido de Fermi de Landau no limite de baixas energias para todos os acoplamentos.

Com a finalidade de tornar nossa discussão a mais didática possível, estruturamos esta dissertação como se segue.

No capítulo 2, definimos o modelo de Anderson de uma impureza descrevendo sua hamiltoniana em linguagem de segunda quantização. Além disso, escreveremos também essa hamiltoniana na conveniente linguagem de integral funcional. Esse tratamento será importante para que, em seguida, possamos derivar para o modelo de Anderson um modelo efetivo que será o objeto de estudo desta dissertação.

No capítulo 3, exporemos o método diagramático que tem por objetivo calcular os diagramas de Feynman do modelo. Para isso, deduziremos inicialmente a expressão do propagador livre do modelo de Anderson para, em seguida, apresentarmos o teorema de Wick que nos permitirá construir os diagramas de Feynman. Apresentamos ainda neste capítulo os importantes conceitos de auto-energia e peso da quasi-partícula, que serão discutidos posteriormente para esse modelo.

No capítulo 4, descreveremos o método do GR começando por sua filosofia e ideia geral. Na seção seguinte, vamos partir para nosso modelo e calcular as equações do GR para várias grandezas físicas que, como veremos, resultarão em equações diferenciais acopladas entre si e que precisam ser atacadas do ponto de vista numérico. Efetuaremos também o cálculo da auto-energia, bem como da susceptibilidade uniforme de spin.

No capítulo 5, discutiremos a implementação de nossa abordagem numérica para a resolução das equações diferenciais acima mencionadas, além do peso da quasipartícula e da susceptibilidade uniforme de spin. Mostraremos, em seguida, os resultados que emergem desta abordagem.

Por fim, no capítulo 6, vamos apresentar nossas conclusões a respeito da discussão apresentada ao longo desta dissertação.

## Capítulo 2

# O Modelo de Anderson de uma Impureza

Vamos, neste capítulo, definir e analisar o modelo que discutiremos nesta dissertação: o modelo de Anderson de uma impureza. Esse modelo foi introduzido originalmente em 1961 por P. W. Anderson e é o paradigma para o entendimento do efeito de impurezas magnéticas localizadas dissolvidas em metais não-magnéticos numa concentração muito baixa (ligas magnéticas diluídas) e, de forma geral, para a descrição da física de alguns sistemas fortemente correlacionados. Nesse modelo, como foi explicado anteriormente, a matriz metálica é representada por um gás de elétrons 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. Dessa forma, o orbital associado à impureza pode assumir apenas quatro configurações possíveis: vazio (ou seja, sem nenhum elétron ocupado), ocupado com um elétron de spin para cima, ocupado com um elétron de spin para baixo e duplamente ocupado com elétrons de spin para baixo e para cima. À primeira vista, um modelo como este com apenas um orbital localizado acoplado com um gás de elétrons livres, aparenta ser conceitualmente muito simples. No entanto, ele, na verdade, contém uma variedade de propriedades físicas importantes, além de possuir todas as características de um sistema quântico de muitos corpos.

## 2.1 Hamiltoniano do modelo

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

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\sigma} E_d d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left( V_{\mathbf{k}}^* d_{\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + V_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{\sigma} \right) + U d_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow} d_{\downarrow}^\dagger d_{\downarrow} \quad (2.1)$$

onde  $c_{\mathbf{k}\sigma}$  destrói um elétron de condução não-interagente e  $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$  cria um elétron de condução com momento  $\mathbf{k}$ , energia de dispersão  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ , spin  $\sigma = \pm \frac{1}{2}$ , enquanto que  $d_{\sigma}$  destrói um elétron localizado e  $d_{\sigma}^\dagger$  cria um elétron localizado com energia  $E_d$  e que interage repulsivamente com uma interação coulombiana local  $U$ . Os operadores de segunda quantização são definidos de tal forma que agem sobre os estados do espaço de Fock [30]. 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  $V_{\mathbf{k}}$  e  $V_{\mathbf{k}}^*$ .

Os operadores de criação e destruição dos elétrons da banda de condução obedecem as seguintes regras de anticomutação:

$$\{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \quad (2.2)$$

$$\{c_i, c_j\} = 0, \quad (2.3)$$

$$\{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0, \quad (2.4)$$

e os elétrons de criação e destruição da impureza obedecem as regras de anticomutação semelhantes:

$$\{d_i, d_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \quad (2.5)$$

$$\{d_i, d_j\} = 0, \quad (2.6)$$

$$\{d_i^\dagger, d_j^\dagger\} = 0, \quad (2.7)$$

onde  $\{A, B\} = AB + BA$  é o chamado anticomutador dos operadores  $A$  e  $B$ .

Para fins de notação, podemos separar a hamiltoniana do modelo em uma parte de ressonância ( $H_R$ ) e em outra parte atômica ( $H_A$ ), que descreve o limite atômico de um íon magnético isolado. Assim teremos

$$H_R = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left[ V_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_\sigma + V_{\mathbf{k}}^* d_\sigma^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \right], \quad (2.8)$$

enquanto que,

$$H_A = \sum_{\sigma} E_d n_{d,\sigma} + U n_{d,\uparrow} n_{d,\downarrow}, \quad (2.9)$$

onde definimos os operadores número  $n_{\mathbf{k},\sigma} = c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}$  e  $n_{d,\sigma} = d_\sigma^\dagger d_\sigma$ .

Para entendermos melhor a física desse modelo devemos discutir os vários regimes que aparecem, dependendo da relação entre os parâmetros da sua hamiltoniana. Veja que o termo de interação colombiana  $U$  contribui quando o nível de energia do estado localizado está duplamente ocupado e, portanto, tendo uma energia  $2E_d + U$ .

O primeiro caso corresponde ao regime de momento local que ocorre quando  $E_d \ll \mu \ll 2E_d + U$ , onde  $\mu$  é o potencial químico. Nessa situação, o nível de energia associado ao estado localizado está muito abaixo do nível de Fermi e o estado de dupla ocupação é punido severamente pelas interações fortes presentes. Apenas flutuações de spin são importantes nesse regime e, em baixas energias, o modelo de Anderson de uma impureza é equivalente ao modelo de Kondo que ignora flutuações de carga [31].

O outro caso consiste no regime de orbital vazio em que  $\mu \ll E_d \leq 2E_d + U$ . Nessa situação, como o nível de Fermi está muito abaixo do nível localizado, o estado da impureza fica vazio uma vez que está muito fracamente acoplado com os elétrons de condução. Já no caso do regime de ocupação dupla  $E_d \leq 2E_d + U \ll \mu$ , temos a situação oposta e o orbital localizado ficará duplamente ocupado. Esses casos são provavelmente de interesse menor uma vez que o nível de energia do estado localizado não está próximo do nível de Fermi para que flutuações de carga sejam importantes. Dessa forma, uma teoria de perturbação convencional no parâmetro de hibridização  $V_{\mathbf{k}}$  pode ser aplicada sem problemas.

O último regime a ser considerado é o de valência mista. Aqui teremos  $E_d \approx \mu \ll$

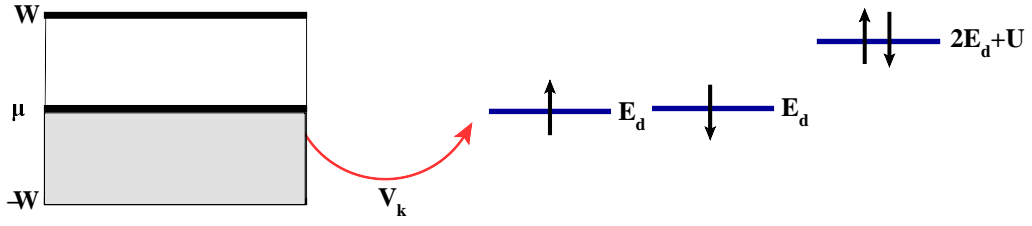


Figura 2.1: Modelo de Anderson simétrico de uma impureza. A matriz metálica é representada por uma banda de condução de largura  $2W$  com estados de energia  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  e o nível de Fermi representado pelo potencial químico  $\mu$ . A impureza corresponde a um nível de energia localizado caracterizado pela energia  $E_d$ . A hibridização ocorre via as amplitudes de probabilidades  $V_{\mathbf{k}}$  e  $V_{\mathbf{k}}^*$ .

$2E_d + U$  ou  $E_d \ll \mu \approx 2E_d + U$ . Veja que neste caso tanto as flutuações de carga quanto de spin da impureza tornam-se importantes, uma vez que o nível do estado localizado está próximo ao nível de Fermi. Vamos nos concentrar nesse regime nesta dissertação. Mais especificamente, analisaremos o chamado modelo de Anderson de uma impureza simétrico, em que  $\mu = E_d$ . Nesse caso, o hamiltoniano do modelo possui simetria partícula-buraco, isto é, permanece invariante sob as transformações  $c_{\mathbf{k}\sigma} \rightarrow c_{-\mathbf{k}\sigma}^\dagger$  e  $d_\sigma \rightarrow -d_\sigma^\dagger$ . Uma representação esquemática do modelo é apresentada na figura 2.1.

Ao longo deste trabalho, utilizaremos o formalismo de segunda quantização para desenvolvermos nossa discussão. No entanto, para encontrarmos uma ação efetiva desse modelo, é interessante mudar momentaneamente para a conveniente linguagem de integral de caminho [32]. Historicamente, a derivação da ação efetiva para esse modelo foi feita pela primeira vez por Feynman e Vernon [33]. Com esta finalidade, explicaremos brevemente essa abordagem na seção que se segue.

## 2.2 Representação do modelo via integral funcional

### 2.2.1 Estados coerentes e integral de caminho

Nesta seção, apresentaremos um formalismo que é totalmente equivalente à formulação mais tradicional da mecânica quântica, que é baseada no formalismo canônico de operadores

hermitianos que atuam no espaço de Hilbert. Esse formalismo, que se deve originalmente a Feynman, é chamado de formulação de integral de caminho da mecânica quântica [32], [34] e [35]. Conforme mencionamos, nosso interesse nessa abordagem do problema será o de encontrar uma forma mais conveniente de obter uma ação efetiva para o modelo de Anderson de uma impureza.

A ideia central por trás da integral de caminho de Feynman é a de descrever a amplitude de probabilidade na mecânica quântica como a soma das contribuições de todos os caminhos possíveis, nos quais a ação clássica assume o papel da fase  $\phi = \frac{S_{\text{caminho}}}{\hbar}$ . A amplitude para que uma partícula vá de um estado  $|i\rangle$  para um estado  $|f\rangle$  é dada por

$$\langle f | \exp(-i\frac{Ht}{\hbar}) | i \rangle = \sum_{\text{todos os caminhos}(i \rightarrow f)} \exp \left\{ i \frac{S_{\text{caminho}}}{\hbar} \right\}, \quad (2.10)$$

com,

$$S_{\text{caminho}} = \int_0^t dt' (p\dot{q} - H[p, q]). \quad (2.11)$$

O conceito de integral de caminho pode ser estendido para englobar a mecânica estatística tratando a matriz densidade como um operador evolução temporal em um tempo imaginário. O traço sobre matriz densidade é então a soma das amplitudes dos possíveis caminhos que retornam à configuração inicial depois de um tempo imaginário  $t = -i\hbar\beta$ :

$$Z = \text{Tr} [\exp(-\beta\bar{H})] = \sum_{\lambda} \langle \lambda | \exp(-i\frac{\bar{H}t}{\hbar}) | \lambda \rangle |_{t=-i\hbar\beta}, \quad (2.12)$$

onde fizemos  $\bar{H} = H - \mu N$ . Mudando as variáveis para  $\frac{it}{\hbar} \rightarrow \tau$ , de modo que  $\frac{idt}{\hbar} \rightarrow d\tau$  e  $p\frac{\partial q}{\partial t} dt \rightarrow p\frac{\partial q}{\partial \tau} d\tau$ , obtemos

$$Z = \sum_{\text{todos os caminhos}(i \rightarrow f)} \exp \left[ - \int_0^{\beta} d\tau \left( -\frac{i}{\hbar} p \partial_{\tau} q + \bar{H}[p, q] \right) \right]. \quad (2.13)$$

A seguir, iremos discutir uma generalização desse conceito para sistemas de muitos corpos. Para isso, definiremos os chamados estados coerentes para férmions.

## 2.2.2 Estados coerentes: férmions

Geralmente, a hamiltoniana em sistemas de muitos corpos é dada em termos dos operadores de criação e destruição. Uma ideia lógica seria a de procurar auto-estados e os auto-valores para estes operadores. Os auto-estados desses operadores são chamados de estados

coerentes. Nosso objetivo nessa seção será, portanto, o de encontrar os auto-estados dos operadores fermiônicos  $\hat{c}^\dagger$  e  $\hat{c}$  de criação e destruição.

Consideremos um campo fermiônico  $\hat{c}^\dagger$ . O estado coerente deste campo é dado por

$$|c\rangle = \exp(-c\hat{c}^\dagger)|0\rangle \quad (2.14)$$

e seu conjugado é

$$\langle\bar{c}| = \langle 0| \exp(-\hat{c}\bar{c}), \quad (2.15)$$

Pode-se mostrar que o vetor de estado  $|c\rangle$  é um autoestado do operador de aniquilação, ou seja,

$$\hat{c}|c\rangle = c|c\rangle. \quad (2.16)$$

Veja que estamos utilizando o acento circunflexo para os operadores de criação e destruição ( $\hat{c}^\dagger$  e  $\hat{c}$ ) de modo a separá-los de seus respectivos autovalores  $\bar{c}$  e  $c$ . Aqui estes autovalores são “números de Grassmann” que anticomutam, ou seja

$$c\bar{c} + \bar{c}c = 0. \quad (2.17)$$

Mas  $c$  deve anticomutar consigo mesmo o que significa que,

$$\bar{c}^2 = c^2 = 0. \quad (2.18)$$

Os efeitos práticos dessas propriedades de anticomutação é que uma expansão em série de Taylor de uma função de Grassmann será sempre truncada no termo de primeira ordem dessa série se considerarmos apenas uma função de um número de Grassmann. Assim, para uma função com dois números de Grassmann teremos a expansão

$$f[\bar{c}, c] = f_0 + \bar{c}f_1 + \bar{f}_1c + f_{12}\bar{c}c, \quad (2.19)$$

que possui apenas quatro termos.

Para desenvolvermos uma representação em termos de integrais de caminho devemos saber como lidar com as propriedades da álgebra de Grassmann. A demonstração de tais

propriedades é simples, mas não será feita em detalhes nesta dissertação de mestrado (ver, p. ex, livro-texto [34]), de modo que nos limitaremos a apenas apresentar e comentar as mesmas. No que diz respeito à álgebra, a anticomutação dos operadores fermiônicos se traduz nas seguintes propriedades para os números de Grassmann

$$c_1 c_2 = -c_2 c_1, \quad (2.20)$$

$$c \hat{\psi} = -\hat{\psi} c, \quad (2.21)$$

onde  $\hat{\psi}$  é um operador fermiônico. Podemos também definir uma derivada para uma função cuja variável independente obedece à álgebra de Grassmann. Assim, temos as equações

$$\partial f = \bar{f}_1 - \bar{f}_{12} \bar{c}, \quad (2.22)$$

$$\bar{\partial} f = f_1 + f_{12} c, \quad (2.23)$$

de modo que as derivadas parciais  $\partial$  e  $\bar{\partial}$  são realizadas, respectivamente, em relação a  $c$  e  $\bar{c}$ . Iremos, ainda, introduzir o conceito de integração para funções cujas variáveis são números de Grassmann. Estas se estendem a apenas dois tipos de integrando

$$\int dc = 0, \quad (2.24)$$

$$\int dc c = 1. \quad (2.25)$$

A próxima propriedade diz respeito ao valor do produto interno de dois vetores  $|\bar{c}\rangle$  e  $|c\rangle$

$$\langle \bar{c} | c \rangle = \langle 0 | (1 - \bar{c} \bar{c}) (1 - c \hat{c}^\dagger) | 0 \rangle = 1 + \bar{c} c = \exp(\bar{c} c). \quad (2.26)$$

Os estados coerentes  $|c\rangle$  formam um conjunto completo de estados no espaço de Fock. Dessa forma, utilizando a equação acima, podemos demonstrar a relação de fechamento:

$$\int d\bar{c} dc \exp(-\bar{c} c) |c\rangle \langle \bar{c}| = \mathbf{1}. \quad (2.27)$$

onde  $\mathbf{1}$  é o operador identidade. O próximo resultado de que precisaremos é o traço de um operador  $\hat{A}$ . Se um operador  $A[\hat{c}^\dagger, \hat{c}]$  possui ordenamento normal, ou seja, os operadores de

criação ficam à esquerda dos operadores de destruição. Dessa forma, podemos fazer:

$$\langle \bar{c} | \hat{A} | c \rangle = \langle \bar{c} | c \rangle A[\bar{c}, c] = \exp(\bar{c}c) A[\bar{c}, c]. \quad (2.28)$$

Expandindo este elemento de matriz ficamos com

$$\langle \bar{c} | \hat{A} | c \rangle = \langle 0 | \hat{A} | 0 \rangle - \bar{c} \langle 1 | \hat{A} | 0 \rangle - c \langle 0 | \hat{A} | 1 \rangle + \bar{c}c \langle 1 | \hat{A} | 1 \rangle. \quad (2.29)$$

Finalmente integrando esta equação com  $\exp(\bar{c}c)$  encontramos:

$$\text{Tr}[\hat{A}] = \langle 0 | \hat{A} | 0 \rangle + \langle 1 | \hat{A} | 1 \rangle = - \int d\bar{c}dc \exp(\bar{c}c) \langle \bar{c} | \hat{A} | c \rangle. \quad (2.30)$$

Além das propriedades acima listadas, um resultado que nos interessa é a integral funcional Gaussiana, uma vez que ela se trata da única integral funcional que somos capazes de resolver exatamente. A integral Gaussiana para variáveis de Grassmann de que trataremos é do tipo:

$$\int \prod_j d\bar{\xi}_j d\xi_j \exp[-\bar{\xi} \cdot A \cdot \xi + \bar{j} \cdot \xi + \bar{\xi} \cdot j] = \det(A) \times \exp[\bar{j} \cdot A^{-1} \cdot j], \quad (2.31)$$

onde  $A$  é uma matriz bem definida,  $A^{-1}$  é a matriz inversa,  $j$  e  $\bar{j}$  são vetores arbitrários e  $\xi$  e  $\bar{\xi}$  são campos de Grassmann.

É importante notar que, as expressões acima podem ser generalizadas para o caso de muitos campos fermiônicos  $c_j$  substituindo na exponencial  $\bar{c}c$  pela soma

$$\bar{c}c = \sum_j \bar{c}_j c_j, \quad (2.32)$$

e ainda fazendo a mudança

$$d\bar{c}dc = \prod_j d\bar{c}_j dc_j. \quad (2.33)$$

Utilizaremos as propriedades acima elencadas para desenvolvermos na próxima seção nossa argumentação com integrais de caminho.

### 2.2.3 Integral de caminho para a função de partição

Vamos considerar, por exemplo, a hamiltoniana associada a férmions não-interagentes

$$H = \epsilon c^\dagger c = \sum_i \epsilon c_i^\dagger c_i \quad (2.34)$$

Usando a propriedade do traço na equação (2.30), a função de partição pode ser reescrita em termos dos estados coerentes como

$$Z = - \int dc_N dc_1 \exp(\bar{c}_N c_1) \langle \bar{c}_N | \exp(-\beta H) | c_1 \rangle. \quad (2.35)$$

Podemos expandir a exponencial em uma sequência de intervalos de tempo com  $\Delta\tau = \frac{\beta}{N}$  e ainda entre cada intervalo de tempo podemos introduzir a relação de fechamento

$$\int d\bar{c}_j dc_{j+1} |c_{j+1}\rangle \langle \bar{c}_j| \exp(-\bar{c}_j c_{j+1}) = \mathbf{1}, \quad (2.36)$$

de modo que teremos

$$Z = - \int d\bar{c}_N dc_1 \exp(\bar{c}_N c_1) \prod_{j=1}^{N-1} d\bar{c}_j dc_{j+1} \exp(-\bar{c}_j c_{j+1}) \prod_{j=1}^N \langle \bar{c}_j | \exp(-H\Delta\tau) | c_j \rangle, \quad (2.37)$$

onde a primeira integral está relacionada ao traço e as demais com a relação de fechamento (2.27). Para resolvermos o sinal negativo que aparece no traço da equação (2.35) definimos as condições de contorno  $c_1 = -c_{N+1}$  e  $\bar{c}_1 = -\bar{c}_{N+1}$  e chegamos ao resultado

$$Z = \int \prod_{j=1}^N d\bar{c}_j dc_{j+1} \exp(-\bar{c}_j c_{j+1}) \langle \bar{c}_j | \exp(-H\Delta\tau) | c_j \rangle. \quad (2.38)$$

Substituindo  $\exp(-\Delta\tau H)$  por seu ordenamento normal de modo que,

$$\langle \bar{c}_j | \exp(-H\Delta\tau) | c_j \rangle = \exp(\bar{c}_j \bar{c}_j) \exp[-H(\bar{c}_j c_j)\Delta\tau] + O(\Delta\tau^2), \quad (2.39)$$

onde  $H[\bar{c}, c] = \epsilon \bar{c} c$  é a Hamiltoniana com ordenamento normal, e os números de Grassmann substituindo os operadores. Combinando (2.35) com (2.37) podemos escrever

$$Z = \lim_{N \rightarrow \infty} Z_N, \quad (2.40)$$

com,

$$Z_N = \int \prod_{j=1}^N d\bar{c}_j dc_j \exp(-S), \quad (2.41)$$

e

$$S = \sum_{j=1}^N \left[ \bar{c}_j \left( \frac{c_{j+1} - c_j}{\Delta\tau} \right) + \epsilon \bar{c}_j c_j \right] \Delta\tau. \quad (2.42)$$

Esta integral de caminho é representada sobre todos os valores possíveis dos campos  $c(\tau_j) \equiv \{c_1, c_2, \dots, c_N\}$  e  $\bar{c}(\tau_j) \equiv \{\bar{c}_1, \bar{c}_2, \dots, \bar{c}_N\}$ . Este tipo de integral é também chamada de integral funcional, uma vez que envolve integrações sobre todos os valores das funções  $c(\tau_j)$  e  $\bar{c}(\tau_j)$ . As condições de contorno anteriormente definidas implicam que o conjunto completo de funções que foram somadas devem satisfazer as chamadas condições de contorno antiperiódicas

$$c(\tau + \beta) = -c(\tau) \quad (2.43)$$

e

$$\bar{c}(\tau + \beta) = -\bar{c}(\tau). \quad (2.44)$$

No limite contínuo  $N \rightarrow \infty$  podemos substituir

$$\bar{c}_j \left( \frac{c_{j+1} - c_j}{\Delta\tau} \right) \rightarrow \bar{c} \partial_\tau c, \quad (2.45)$$

$$\sum_j \Delta\tau \rightarrow \int_0^\beta d\tau. \quad (2.46)$$

Desse modo, a ação e a integral de caminho ficam

$$S = \int_0^\infty d\tau [\bar{c}(\partial_\tau + \epsilon)c] \quad (2.47)$$

$$Z = \int D[\bar{c}, c] \exp(-S), \quad (2.48)$$

onde definimos a medida de integração como sendo  $D[\bar{c}, c] = \prod_{\tau_j} d\bar{c}(\tau_j) dc(\tau_j)$ . Efetuando uma transformada de Fourier nos campos de Grassmann do tipo

$$c(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_n c_n \exp(-i\omega_n \tau), \quad (2.49)$$

podemos reescrever todos os campos  $c(\tau)$  em termos de  $c_n$  e transformar para essa representação fazendo  $\partial_\tau \rightarrow -i\omega_n$ . Dessa forma a ação fica

$$S = \sum_n \bar{c}_n (-i\omega_n + \epsilon) c_n. \quad (2.50)$$

Assim, a integral de caminho se torna apenas uma integral Gaussiana discreta

$$Z = \int \prod_n d\bar{c}_n dc_n \exp \left[ \sum_n \bar{c}_n (-i\omega_n + \epsilon) c_n \right] = \prod_n (-i\omega_n + \epsilon). \quad (2.51)$$

Nosso próximo passo será o de determinar uma ação efetiva em termos de integral de caminho para desenvolvermos nosso modelo.

## 2.2.4 Modelo efetivo de Anderson em termos de uma integral funcional

Nesta seção, mostraremos uma formulação do modelo de Anderson em termos de integral funcional de modo a determinar uma ação efetiva ao modelo. Como ponto de partida, vamos escrever a função de partição

$$Z = \int D[d, \bar{d}, c, \bar{c}] \exp[-S], \quad (2.52)$$

onde  $D[d, \bar{d}, c, \bar{c}] = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^N d(d, \bar{d}, c, \bar{c})$  e a ação  $S = S_A + S_R$  é a soma de dois termos, o termo atômico

$$S_A = \int_0^\beta d\tau \left[ \sum_{\sigma} \bar{d}_{\sigma} (\partial_{\tau} + \bar{E}_d) d_{\sigma} + U n_{d,\uparrow} n_{d,\downarrow} \right] \quad (2.53)$$

e o termo da parte de ressonância

$$S_R = \int_0^\beta d\tau \left\{ \sum_{\mathbf{k}\sigma} \bar{c}_{\mathbf{k}\sigma} (\partial_{\tau} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}\sigma}) c_{\mathbf{k}\sigma} + [V_{\mathbf{k}} \bar{d}_{\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} + V_{\mathbf{k}}^* \bar{c}_{\mathbf{k}\sigma} d_{\sigma}] \right\}, \quad (2.54)$$

onde fizemos  $\bar{E}_d = E_d - \mu$  e  $\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}\sigma} = \epsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \mu$ . Rearranjando a integral de caminho ficamos com,

$$Z = \int D[d, \bar{d}] \exp(-S_A) \int D[c, \bar{c}] \exp(-S_R), \quad (2.55)$$

de modo que o termo  $Z_R[d, \bar{d}] = \int D[c, \bar{c}] \exp(-S_R)$  representa a troca do elétron no estado localizado para a banda de condução ou vice-versa. A ação  $S_R$  não possui interação e pode ser escrita esquematicamente na forma quadrática  $S_R = \bar{c}.A.c - \bar{j}.c + \bar{c}.j$ , com  $A = (\partial\tau + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}})\delta(\tau - \tau')$  sendo a matriz que age entre os campos  $c \equiv c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau)$  e  $\bar{c} \equiv \bar{c}_{\mathbf{k}\sigma}(\tau)$ , enquanto que  $j_{\mathbf{k}}(\tau) = V_{\mathbf{k}} d_{\sigma}(\tau)$  e  $\bar{j}_{\mathbf{k}}(\tau) = V_{\mathbf{k}}^* \bar{d}_{\sigma}(\tau)$  são termos de fonte. Utilizando o resultado para integrais Gaussianas fermiônicas teremos:

$$Z_R = \int D[c, \bar{c}] \exp(-\bar{c}.A.c + \bar{j}.c + \bar{c}.j) = \det(A) \times \exp[\bar{j}.A^{-1}.j], \quad (2.56)$$

ou explicitamente,

$$Z_R[d, \bar{d}] = \det[\partial_{\tau} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}] \exp \left[ \int_0^\beta d\tau \bar{d}_{\sigma} \left( \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}}|^2}{\partial_{\tau} + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \right) d_{\sigma} \right]. \quad (2.57)$$

Substituindo o valor de  $Z_R$  na integral de caminho e combinando os termos quadráticos ficamos com:

$$Z = \det [\partial_\tau + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}] \times \int D[d, \bar{d}] \exp \left\{ - \int d\tau \left[ \bar{d}_\sigma \left( \partial_\tau + \bar{E}_d - \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}}|^2}{\partial_\tau + \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \right) d_\sigma + U n_\uparrow n_\downarrow \right] \right\}. \quad (2.58)$$

Passando o primeiro termo para o espaço de Fourier, substituindo  $d_\sigma = \beta^{-\frac{1}{2}} \sum_n d_{\sigma n} \exp[-i\omega_n \tau]$ ,  $\bar{d}_\sigma = \beta^{-\frac{1}{2}} \sum_n \bar{d}_{\sigma n} \exp[i\omega_n \tau]$  de modo que  $\partial_\tau \rightarrow -i\omega_n$ , a ação pode ser escrita

$$S = \sum_{\sigma, i\omega_n} \bar{d}_{\sigma n} \left[ -i\omega_n + \bar{E}_d + \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}}|^2}{i\omega_n - \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \right] d_\sigma + U \int_{\omega_1, \omega_2, \omega_3} \bar{d}_\uparrow(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3) \bar{d}_\downarrow(\omega_3) d_\downarrow(\omega_2) d_\uparrow(\omega_1), \quad (2.59)$$

onde  $\int_{\omega_1, \omega_2, \omega_3} = \int \frac{d\omega_1}{2\pi} \frac{d\omega_2}{2\pi} \frac{d\omega_3}{2\pi}$ . Identificamos o coeficiente do termo quadrático da ação como o inverso do propagador não-interagente  $-G_d^{-1}(i\omega_n)$  e ainda reconhecemos o termo relacionado à hibridização como sendo  $\Delta(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}}|^2}{i\omega_n - \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}}$  que, na aproximação de banda ampla, resulta em  $\Delta(i\omega) = -i\Delta \text{sgn}(\omega)$ , com a função sinal definida como

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

A equação (2.59) define nossa teoria quântica de campos nua (do inglês, bare) que será estudada ao longo desta dissertação.

# Capítulo 3

## Método Diagramático

Neste capítulo, descreveremos a técnica diagramática originalmente desenvolvida por Feynman no contexto da chamada eletrodinâmica quântica, e que será utilizada para a formulação posterior do método do grupo de renormalização perturbativo aplicado ao modelo de Anderson de uma impureza. O método diagramático de Feynman nos fornece uma interpretação pictórica dos processos físicos envolvidos, permitindo que efetuemos cálculos perturbativos em nosso modelo. Mais precisamente, esse método nos permite calcular as amplitudes de probabilidades de que determinados processos de interações aconteçam. A partir deste ponto, desenvolveremos todo o método diagramático voltando para a formulação canônica da mecânica quântica de operadores. Antes de efetuarmos estes cálculos, definiremos o propagador para o modelo e, ainda, discutiremos o chamado teorema de Wick que permite a construção desses diagramas.

### 3.1 Função de Green para o modelo de Anderson

As funções de Green permitem o cálculo dos valores esperados dos observáveis de um sistema físico. Na prática, muitos sistemas físicos de interesse constituídos de um grande número de partículas interagentes não têm solução exata, o que nos restringe a resolver o problema de maneira aproximada. É conveniente definirmos a função de Green de uma partícula em relação aos operadores de criação e destruição de partículas dependentes do tempo. A função de Green interagente de uma partícula, adequada ao modelo de Anderson de uma impureza definida pela

equação (2.59), pode ser escrita no formalismo de Matsubara, ou seja, em temperatura finita (veja, p. ex. Ref. [36]) como:

$$G_{dd}^{\sigma}(\tau, \tau') = -\langle T_{\tau} [d_{\sigma}(\tau)d_{\sigma}^{\dagger}(\tau')] \rangle, \quad (3.1)$$

onde  $T_{\tau}$  é o operador ordenamento temporal que é definido para os operadores acima como

$$T_{\tau} [d_{\sigma}(\tau)d_{\sigma}^{\dagger}(\tau')] = \theta(\tau - \tau')d_{\sigma}(\tau)d_{\sigma}^{\dagger}(\tau') - \theta(\tau' - \tau)d_{\sigma}^{\dagger}(\tau')d_{\sigma}(\tau), \quad (3.2)$$

de modo que  $\theta(\tau)$  representa a função degrau. Assim,  $T_{\tau}$  ordena os operadores dependentes do tempo de forma que, o operador com o menor tempo desse produto fique sempre à direita e o com o maior tempo à esquerda. Além disso, veja que a equação (3.1) quantifica a correlação de um elétron localizado criado no tempo  $\tau'$  e destruído no tempo  $\tau$ .

A representação de Matsubara é também conhecida como representação de tempo imaginário, uma vez que se faz a chamada rotação de Wick  $it \rightarrow \tau$ . Dessa forma, se considerarmos um operador na representação de Heisenberg

$$d_{\sigma}(t) = \exp(iHt) d_{\sigma} \exp(-iHt), \quad (3.3)$$

com a Hamiltoniana  $H$  independente do tempo, na representação de tempo imaginário teremos,

$$d_{\sigma}(\tau) = \exp(\bar{H}\tau) d_{\sigma} \exp(-\bar{H}\tau). \quad (3.4)$$

de modo que,  $\bar{H} = \bar{H}_0 + V$ , onde  $\bar{H}_0 = H_0 - \mu N$  e  $V$  é o termo de interação.

De forma semelhante, se definirmos um operador na representação de interação (que será denotado pelo acento circunflexo acima do operador)

$$\hat{d}_{\sigma}(t) = \exp(iH_0t) d_{\sigma} \exp(-iH_0t), \quad (3.5)$$

com  $H_0$  independente do tempo. Na representação de temperatura finita, fazendo as substituições  $it \rightarrow \tau$  e  $H_0 \rightarrow \bar{H}_0$  ficamos com

$$\hat{d}_{\sigma}(\tau) = \exp(\bar{H}_0\tau) d_{\sigma} \exp(-\bar{H}_0\tau). \quad (3.6)$$

Podemos escrever, na representação de interação, o produto de operadores  $d(\tau)d^\dagger(\tau')$  em termos do chamado operador evolução temporal  $\hat{U}$

$$d_\sigma(\tau)d_\sigma^\dagger(\tau') = \hat{U}(0, \tau)\hat{d}_\sigma(\tau)\hat{U}(\tau, \tau')\hat{d}_\sigma^\dagger(\tau')\hat{U}(\tau', 0), \quad (3.7)$$

onde  $\hat{U}$  é definido por:

$$\hat{U}(\tau, \tau') = e^{\tau\bar{H}_0} e^{-(\tau-\tau')\bar{H}} e^{\tau'\bar{H}_0}. \quad (3.8)$$

Efetuando alguns cálculos, não é difícil ver que  $\hat{U}$  satisfaz a seguinte propriedade

$$U(\tau, \tau'')U(\tau'', \tau') = U(\tau, \tau'). \quad (3.9)$$

Com o intuito de desenvolvermos uma teoria de perturbação, vamos derivar o operador  $\hat{U}$  em relação a  $\tau$ , ou seja

$$\partial_\tau \hat{U}(\tau, \tau') = e^{\tau\bar{H}_0}(\bar{H}_0 - H)e^{-(\tau-\tau')\bar{H}} e^{-\tau'\bar{H}_0} = -\hat{V}(\tau)\hat{U}(\tau, \tau'). \quad (3.10)$$

Resolvendo essa equação seguindo um procedimento iterativo, encontramos a solução

$$\begin{aligned} \hat{U}(\tau, \tau') &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 \dots \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_n T_\tau [\hat{V}(\tau_1) \dots \hat{V}(\tau_n)] \\ &= T_\tau \exp \left( - \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 \hat{V}(\tau_1) \right). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Podemos utilizar o formalismo de Matsubara de modo a associá-lo com o operador densidade do ensemble grande canônico  $\rho_G = \frac{1}{Z} e^{-\beta\bar{H}}$ , onde  $Z = \text{Tr} \{ \rho_G \}$  é a função de partição e  $\beta = T^{-1}$ . Usando as equações (3.8) e (3.11), obtemos que:

$$\rho_G = Z^{-1} e^{-\beta\bar{H}_0} \hat{U}(\beta, 0) = Z^{-1} e^{-\beta\bar{H}_0} T_\tau \exp \left( - \int_0^\beta d\tau_1 \hat{V}(\tau_1) \right). \quad (3.12)$$

Logo mais, utilizaremos essa propriedade de  $\rho_G$  para escrevermos os valores esperados no ensemble grande canônico de uma forma mais conveniente.

Vamos considerar agora o valor esperado do ordenamento temporal dos operadores na equação (3.7), ou seja

$$\langle T_\tau [d_\sigma(\tau) d_\sigma^\dagger(\tau')] \rangle = \text{Tr} \{ \rho_G T_\tau [d_\sigma(\tau) d_\sigma^\dagger(\tau')] \}. \quad (3.13)$$

Utilizando a propriedade do operador evolução  $\hat{U}$ , podemos reescrever a equação anterior como

$$\begin{aligned} \langle T_\tau [d_\sigma(\tau) d_\sigma^\dagger(\tau')] \rangle &= Z^{-1} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \bar{H}_0} \hat{U}(\beta, 0) \hat{U}(0, \tau) \hat{d}_\sigma(\tau) \hat{U}(\tau, \tau') \hat{d}_\sigma^\dagger(\tau') \hat{U}(\tau', 0) \right\} \\ &= Z^{-1} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \bar{H}_0} \hat{U}(\beta, \tau) \hat{d}_\sigma(\tau) \hat{U}(\tau, \tau') \hat{d}_\sigma^\dagger(\tau') \hat{U}(\tau', 0) \right\}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Da definição de operador ordenamento temporal, podemos escrever:

$$\hat{U}(\beta, \tau) \hat{d}_\sigma(\tau) \hat{U}(\tau, \tau') \hat{d}_\sigma^\dagger(\tau') \hat{U}(\tau', 0) = T_\tau \left[ \hat{U}(\beta, 0) \hat{d}_\sigma(\tau) \hat{d}_\sigma^\dagger(\tau') \right]. \quad (3.15)$$

Sendo assim, a equação (3.14) fica

$$\langle T_\tau [d(\tau)_\sigma d_\sigma^\dagger(\tau')] \rangle = Z^{-1} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \bar{H}_0} T_\tau \left[ \hat{U}(\beta, 0) \hat{d}_\sigma(\tau) \hat{d}_\sigma^\dagger(\tau') \right] \right\}. \quad (3.16)$$

Usando  $Z = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \bar{H}_0} \hat{U}(\beta, 0) \right\}$  teremos,

$$\langle T_\tau [d(\tau)_\sigma d_\sigma^\dagger(\tau')] \rangle = \frac{\langle T_\tau \left[ \hat{U}(\beta, 0) \hat{d}_\sigma(\tau) \hat{d}_\sigma^\dagger(\tau') \right] \rangle_0}{\langle \hat{U}(\beta, 0) \rangle_0}, \quad (3.17)$$

onde a notação  $\langle \dots \rangle_0$  na equação acima indica que os valores esperados estão relacionados com o operador densidade do ensemble grande canônico.

Para prosseguirmos em nossos cálculos, utilizaremos três propriedades da função de Green de Matsubara (3.1). A primeira diz que a função de Green depende apenas da diferença de tempo ou seja,  $G_{dd}^\sigma(\tau - \tau') = G_{dd}^\sigma(\tau', \tau)$ . A segunda nos informa que para  $G_{dd}^\sigma(\tau, \tau')$  ser uma função convergente é necessário que  $-\beta < \tau - \tau' < \beta$ . Por fim, a terceira propriedade estabelece que, quando  $\tau < 0$ ,  $G_{dd}^\sigma(\tau) = -G_{dd}^\sigma(\tau + \beta)$ . Utilizando essas propriedades e ainda a função  $G_{dd}^\sigma(\tau)$  podemos encontrar a transformada de Fourier

$$G_{dd}^\sigma(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau \exp(i\omega_n \tau) G_{dd}^\sigma(\tau), \quad (3.18)$$

onde a frequência de Matsubara  $\omega_n$  para férmions é dada por  $\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$  (com  $n = 0, 1, 2, \dots$ ).

Podemos utilizar a transformada de Fourier e ainda aplicar a simplificação para o modelo de Anderson no limite de banda ampla, ou seja, fazendo a função de hibridização  $\Delta(i\omega) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}}|^2}{i\omega - \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}}$  de tal forma que  $\Delta(i\omega) = -i\Delta \text{sgn}(\omega)$ . Além disso, fazendo a escolha

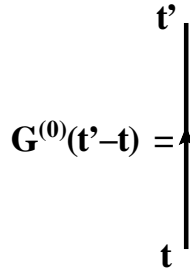


Figura 3.1: Propagador livre de  $t$  até  $t'$ .

$\mu = E_d$ , encontramos a função de Green não-interagente para o modelo simétrico:

$$G_{\sigma}^{(0)}(i\omega) = \frac{1}{i\omega + i\Delta \text{sgn}(\omega)}, \quad (3.19)$$

que é também chamada de propagador livre no formalismo de Matsubara. Esquemáticamente, podemos representar uma função de Green  $G_{\sigma}^0(t, t')$  por uma linha sólida indo de  $t$  a  $t'$ , direcionada por uma seta conforme mostrado na figura 3.1.

A seguir, mostraremos um importante teorema em teoria de muitos corpos o qual se pode determinar uma função de Green interagente em termos de funções de Green não-interagentes. Este teorema é conhecido como teorema de Wick.

## 3.2 Teorema de Wick

O teorema de Wick permite o reordenamento de um conjunto de  $N$  operadores de criação e destruição, os quais têm a propriedade de que o anticomutador, no caso de férmions, dos operadores deste conjunto escolhidos de forma arbitrária é um número.

O teorema é definido a partir do produto normal ordenado, segundo o qual todos os operadores de campo são ordenados de tal forma que os operadores de criação se situam à esquerda dos operadores de destruição. Este produto leva a um sinal positivo ou negativo a depender se o número de permutações dos operadores fermiônicos, necessário para passar da ordem inicial para a ordem final, for respectivamente par ou ímpar. Para esses operadores, o produto normal é definido como:

$$N[UV] = T_{\tau}[UV] - \dot{U}\dot{V}, \quad (3.20)$$

ou seja, trata-se da diferença entre o operador ordenamento temporal, aplicado em dois operadores, e a contração desses operadores. Essa contração é denotada por um ou mais pontos sobre os pares dos operadores contraídos.

Nesse sentido, o teorema de Wick assegura que a média no ensemble grande canônico  $\langle T_\tau [UVW \dots XYZ] \rangle_0$  é igual a soma de todos os possíveis termos contraídos dois a dois, então:

$$\langle T_\tau [UVW \dots XYZ] \rangle_0 = \left( \ddot{U} \ddot{V} \dot{W} \dots \dot{X} \ddot{Y} \ddot{Z} \right) + \left( \dot{U} \ddot{V} \ddot{W} \dots \dot{X} \ddot{Y} \ddot{Z} \right) \\ + \text{demais contrações dos operadores de criação e destruição}, \quad (3.21)$$

de modo que  $(UVW \dots XYZ)$  são operadores fermiônicos com tempos  $\tau_U, \tau_V, \tau_W \dots \tau_X, \tau_Y, \tau_Z$ . As contrações dos operadores geram as funções de Green não-interagentes como mostrado abaixo:

$$\dot{d}_\gamma d_\mu^\dagger = \langle d_\gamma(\tau) d_\mu^\dagger(\tau') \rangle = \delta_{\mu\delta} G_\mu^{(0)}(\tau - \tau'). \quad (3.22)$$

A função de Green definida na equação (3.1) pode ser calculada expandindo-se a equação (3.11). Assim, teremos,

$$G_{dd}^\sigma(\tau, \tau') = - \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_0^\beta d\tau_n \langle T_\tau \left[ \hat{V}(\tau_1) \dots \hat{V}(\tau_n) d_\sigma(\tau) d_\sigma^\dagger(\tau') \right] \rangle_0}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_0^\beta d\tau_n \langle T_\tau \left[ \hat{V}(\tau_1) \dots \hat{V}(\tau_n) \right] \rangle_0}, \quad (3.23)$$

de modo que operador de criação sempre deve permanecer à esquerda do operador de destruição. Pode-se, ainda, decompor o numerador da equação acima em dois termos de forma que um dos termos cancele com o denominador. Dessa forma, reescrevemos (3.23) como:

$$G_{dd}^\sigma(\tau, \tau') = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_0^\beta d\tau_n \\ \times \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \bar{H}_0} T_\tau \left[ \hat{V}(\tau_1) \dots \hat{V}(\tau_n) \hat{d}_\sigma(\tau) \hat{d}_\sigma^\dagger(\tau') \right] \right\} \Big|_{\text{conectado}}, \quad (3.24)$$

onde o termo conectado se refere aos termos de  $G_{dd}^\sigma(\tau, \tau')$  não contidos no denominador da equação (3.23). Utilizando o teorema de Wick e resolvendo a função de Green (3.24) veremos que apareceram várias integrais no seu cálculo perturbativo. Representaremos cada integral utilizando os diagramas de Feynman conforme discutiremos na próxima seção.

### 3.3 Regras de Feynman

Os diagramas de Feynman mostram-se bem úteis por fornecerem “insights” sobre os processos físicos os quais eles representam. Um diagrama pode ser desenhado para uma função de Green dependente do tempo  $G_\sigma(t)$ , bem como para uma função de Green dependente da frequência de Matsubara  $G_\sigma(i\omega)$ . Podemos resumir as principais regras de Feynman [37] no formalismo de Matsubara [38] apropriadas para o modelo de Anderson de uma impureza (ver equação (2.59) no capítulo anterior):

1. Cada linha cheia contribui com um termo  $G_\sigma^{(0)}(i\omega) = \frac{1}{i\omega + i\Delta \text{sgn}(\omega)}$  para as integrais conforme mostrado na figura 3.2;

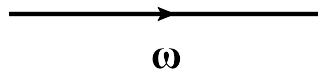


Figura 3.2: Propagador livre  $G_\sigma^{(0)}(i\omega)$ .

2. Cada linha de interação (linha ondulada), como na figura 3.3, contribui com um termo associado à interação do modelo  $-U$ ;

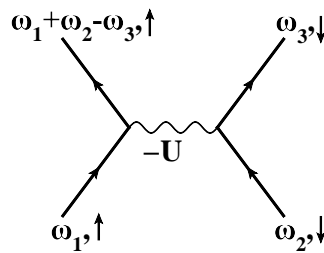


Figura 3.3: Processo de interação.

3. Desenhar todos os diagramas que sejam diferentes topologicamente;
4. Para cada diagrama, a distribuição das frequências deve ser conservada;
5. Cada “loop” interno, cujo spin deve ser somado, contribui com um sinal negativo (ou seja, um fator -1);

6. Cada frequência intermediária  $\omega_0$  contribui com uma integração independente do tipo  $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_0}{2\pi}$ . Com essas regras é sempre possível, a partir de uma série diagramática para

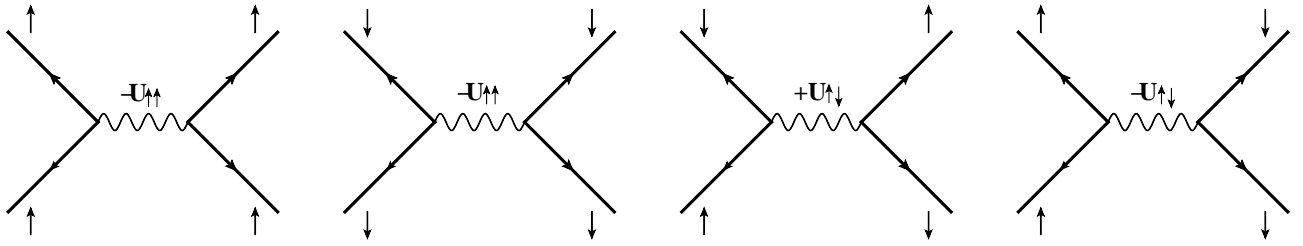


Figura 3.4: Representação em termos de diagramas de Feynman dos quatro tipos de canais no modelo de Anderson de uma impureza.

$G_\sigma(i\omega)$ , obter a sua expressão analítica e vice-versa.

Ao examinarmos os spins na interação descrita pela regra de Feynman 2, chamamos a atenção para o fato de que na ação efetiva microscópica descrita pela equação (2.59) existe apenas um termo de interação entre partículas localizadas com spins opostos, cuja intensidade vamos definir como sendo dada inicialmente pelo parâmetro  $U_{\uparrow\downarrow}$ . No entanto, na medida em que renormalizamos o modelo de Anderson efetivo no limite de baixa energia, uma interação efetiva entre partículas renormalizadas de mesmo spin (não presente inicialmente no modelo microscópico) emerge naturalmente no problema induzida por flutuações quânticas (correções ao vértice) no problema. Essa nova interação entre quasipartículas de mesmo spin será, por sua vez, parametrizada pela constante de acoplamento  $U_{\uparrow\uparrow}$  (em função da simetria  $SU(2)$  do modelo, temos que  $U_{\uparrow\uparrow} = U_{\downarrow\downarrow}$ ). Dessa forma, inicialmente temos que impor a seguinte condição de renormalização para o modelo:  $U_{\uparrow\downarrow} = U$  e  $U_{\uparrow\uparrow} = 0$ . Como veremos adiante, apesar de inicialmente nulo, o parâmetro  $U_{\uparrow\uparrow}$  renormaliza naturalmente para valores finitos no limite de baixa energia do modelo. Por essa razão, teremos quatro tipos de vértices (onde apenas dois são independentes) que aparecerão em teoria de perturbação para o problema como está mostrado em termos dos diagramas de Feynman correspondentes na figura 3.4.

Uma vez listadas as regras de Feynman, podemos definir o importante conceito de auto-energia. Trata-se da soma de todos os diagramas irreduzíveis de uma partícula em  $G_\sigma(i\omega)$  sem as duas linhas fermiônicas externas. Por diagramas irreduzíveis entendemos como sendo aqueles que não podem ser divididos em dois outros diagramas cortando apenas uma linha

fermiônica.

A auto-energia nos dá uma noção sobre o meio de muitos corpos onde uma partícula se propaga. Fisicamente, a auto-energia representa todos os processos de espalhamento associados a uma partícula. Neste sentido, a função de Green pode ser descrita em termos da soma de propagadores livres com inserções de processos de espalhamento, conforme mostrado na figura 3.5.

$$G(i\omega) = \text{---} + \text{---} \circlearrowleft \Sigma \text{---} + \text{---} \circlearrowleft \Sigma \text{---} \circlearrowleft \Sigma \text{---} + \dots$$

Figura 3.5: Função de Green dada em termos dos propagadores livres e da auto-energia.

É conveniente representar a auto-energia como uma soma de diagramas de Feynman de uma partícula. Isto pode ser visto na figura 3.6. Dessa forma, fica claro que  $\Sigma(i\omega)$  representa a soma de todos os diagramas irreduzíveis de uma partícula sem as linhas externas.

Seguindo a representação da figura (3.5) podemos expandir em uma série geométrica de razão  $\Sigma(i\omega)G^{(0)}(i\omega)$  e escrever:

$$\begin{aligned} G(i\omega) &= G^{(0)}(i\omega) + G^{(0)}(i\omega)\Sigma(i\omega)G^{(0)}(i\omega) + G^{(0)}(i\omega)\Sigma(i\omega)G^{(0)}(i\omega)\Sigma(i\omega)G^{(0)}(i\omega) + \dots \\ &= \frac{1}{[G^{(0)}(i\omega)]^{-1} - \Sigma(i\omega)}. \end{aligned} \tag{3.25}$$

De modo que teremos a chamada equação de Dyson que relaciona a função de Green interagente com a auto-energia

$$G(i\omega)^{-1} = [G^{(0)}(i\omega)]^{-1} - \Sigma(i\omega). \tag{3.26}$$

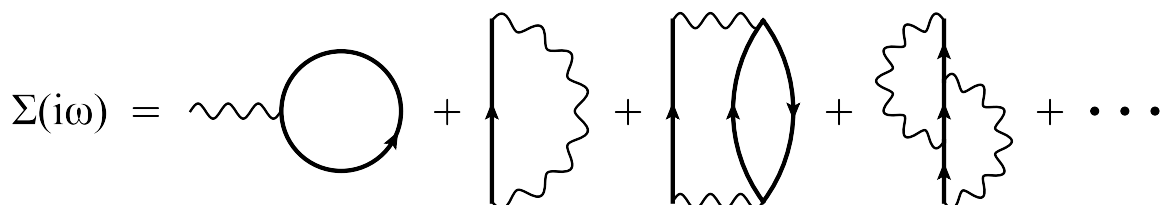


Figura 3.6: Auto-energia dada em função dos diagramas irreduzíveis de primeira e segunda ordem.

Partindo da equação de Dyson, podemos separar a auto-energia em uma parte imaginária e em outra parte real. Por conveniência, faremos também uma continuação analítica no propagador  $G(i\omega \rightarrow \omega + i0^+)$ . Como a função de Green do modelo de Anderson depende apenas da frequência  $\omega$ , obtemos

$$G(\omega + i0^+) = \frac{1}{\omega - \bar{E}_d - Re\Sigma(\omega + i0^+) - iIm\Sigma(\omega + i0^+)}. \quad (3.27)$$

A parte imaginária está relacionada ao tempo de vida da quasi-partícula. Supondo que a auto-energia é uma função analítica, expandindo  $Re\Sigma(\omega + i0^+)$  em uma série de Taylor em torno de  $\omega = 0$ .

$$Re\Sigma(\omega + i0^+) = Re\Sigma(0) + \left. \frac{d}{d\omega} Re\Sigma(\omega + i0^+) \right|_{\omega=0} \omega + \dots \quad (3.28)$$

Substituindo (3.28) em (3.27), isso nos leva a

$$G(\omega + i0^+) = \frac{1}{\omega - [\bar{E}_d + Re\Sigma(0)] - \left. \frac{d}{d\omega} Re\Sigma(\omega + i0^+) \right|_{\omega=0} \omega - iIm\Sigma(0)} + F(\omega), \quad (3.29)$$

com  $F(\omega)$  sendo uma parte chamada de incoerente, ou seja, um termo de correção da parte que foi deixada de fora da expansão (3.28). Podemos, ainda, reescrever a equação anterior da seguinte forma:

$$G(\omega + i0^+) = \frac{Z}{\omega - ZE_d^{int} + i\tau^{-1}} + F(\omega), \quad (3.30)$$

onde  $E_d^{int} = \bar{E}_d + Re\Sigma(0)$  e a grandeza  $\tau^{-1} = -Z Im\Sigma(\omega = 0^+)$  se refere ao tempo de vida da quasipartícula. A quantidade  $Z$  na equação acima é o peso da quasipartícula ( $0 < Z < 1$ ) e é definido explicitamente como

$$Z = \left[ 1 - \left. \frac{d}{d\omega} Re\Sigma(\omega + i0^+) \right|_{\omega=0} \right]^{-1}. \quad (3.31)$$

Fisicamente, o peso da quasipartícula representa uma medida da coerência das excitações do tipo fermiônicas do sistema. Em nosso trabalho, esse parâmetro será essencial uma vez que ele é proporcional à já mencionada escala de energia de Kondo que emerge naturalmente do modelo de Anderson de uma impureza no limite de forte acoplamento. Essa escala é dada por:

$$T_K = \left( \frac{2U\Delta}{\pi^2} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\pi U}{8\Delta}}, \quad (3.32)$$

onde  $U$  é a interação coulombiana e  $\Delta$  é, como sabemos, o termo de hibridização. A escala de energia de Kondo se manifesta em várias quantidades físicas do modelo de Anderson de uma impureza e pode ser encontrada associada ao peso da quasipartícula utilizando o método Bethe ansatz [39] no limite em que  $U \gg \Delta$  na forma

$$Z \sim \sqrt{\frac{8U}{\pi^2\Delta}} \exp\left(\frac{-\pi U}{8\Delta}\right). \quad (3.33)$$

Por outro lado, se considerarmos a teoria de perturbação até segunda ordem [3] no limite em que  $U \ll \Delta$ , o peso da quasipartícula será dado por

$$Z = 1 + \left(3 - \frac{\pi^2}{4}\right) \left(\frac{U}{\pi\Delta}\right)^2 + \dots \quad (3.34)$$

Os resultados acima são parâmetros importantes a serem discutidos nesta dissertação de mestrado.

Devemos ainda neste ponto de nossa discussão, definir a função de Green de duas partículas de forma análoga a feita com a equação (3.17). No formalismo de tempo imaginário, o propagador de duas partículas segue do cálculo do seguinte valor esperado:

$$G_{\alpha\beta}^{(4)}(\tau_1, \tau_2, \tau'_1, \tau'_2) = \frac{\text{Tr} \left\{ \exp(-\beta\bar{H}) T_\tau \left[ d_\alpha(\tau_1) d_\beta(\tau_2) d_\beta^\dagger(\tau'_2) d_\alpha^\dagger(\tau'_1) \right] \right\}}{\text{Tr} \left\{ \exp(-\beta\bar{H}) \right\}}. \quad (3.35)$$

Para obter os diagramas de Feynman para a função de Green de duas partículas basta seguir o mesmo procedimento utilizado na derivação das regras de Feynman para a função de Green de uma partícula. Mostramos na figura 3.7 os diagramas da função de Green de duas partículas definido em termos da grandeza chamada função vértice irreduzível de quatro pontos  $\Gamma^{(4)}$ . Esta quantidade desempenha um papel importante na implementação do grupo de renormalização para o modelo de Anderson de uma impureza e é discutida na próxima seção.

### 3.4 Teoria de perturbação convencional

Nesta seção, calcularemos até segunda ordem de perturbação nas interações a chamada função vértice irreduzível de quatro pontos  $\Gamma^{(4)}(\omega_1, \omega_2, \omega_3)$ . Para determinar essa função, iniciaremos definindo três quantidades que aparecem normalmente nos diagramas de Feynman

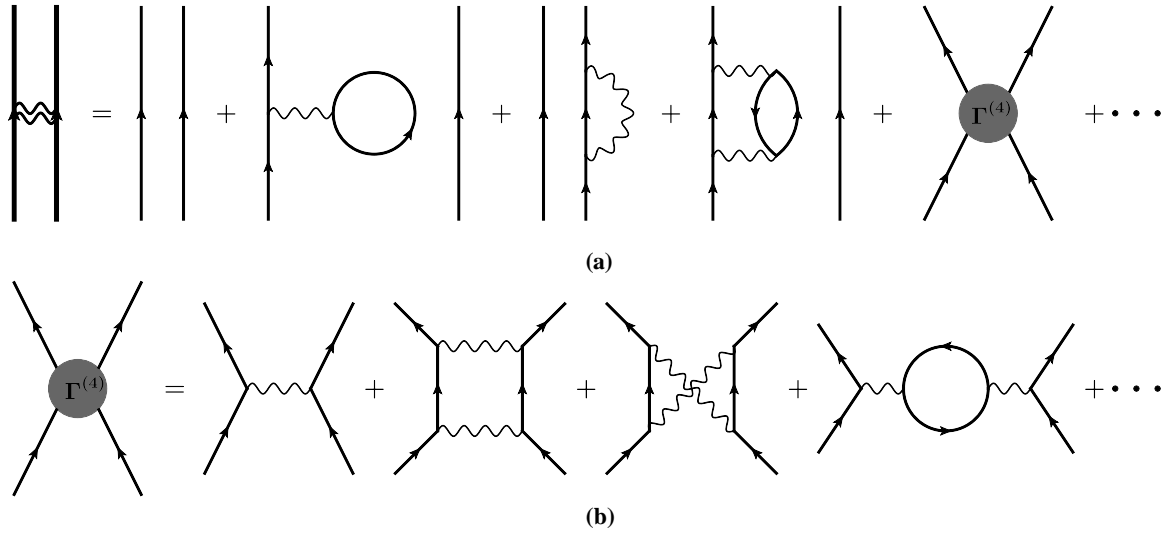


Figura 3.7: (a) Representação esquemática da função de Green de duas partículas em termos dos diagramas de Feynman. (b) Função vértice irreduzível de quatro pontos em função de alguns diagramas de Feynman de interação entre duas partículas.

da teoria, as chamadas bolhas de polarização partícula-partícula e partícula-buraco. Essas quantidades são representadas diagramaticamente na figura 3.8 e calculadas, respectivamente, conforme as equações:

$$\begin{aligned} \Pi(i\omega_1 + i\omega_2) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_0}{2\pi} G^{(0)}(i\omega_0) G^{(0)}(-i\omega_0 + i\omega_1 + i\omega_2) \\ &= \frac{2\Delta}{\pi|\omega_1 + \omega_2|(|\omega_1 + \omega_2| + 2\Delta)} \ln \left( \frac{|\omega_1 + \omega_2| + \Delta}{\Delta} \right), \end{aligned} \quad (3.36)$$

$$\begin{aligned} \chi_1(i\omega_1 - i\omega_3) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_0}{2\pi} G^{(0)}(i\omega_0) G^{(0)}(i\omega_0 + i\omega_1 - i\omega_3) \\ &= -\frac{2\Delta}{\pi|\omega_1 - \omega_3|(|\omega_1 - \omega_3| + 2\Delta)} \ln \left( \frac{|\omega_1 - \omega_3| + \Delta}{\Delta} \right), \end{aligned} \quad (3.37)$$

$$\begin{aligned} \chi_2(i\omega_2 - i\omega_3) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_0}{2\pi} G^{(0)}(i\omega_0) G^{(0)}(i\omega_0 + i\omega_2 - i\omega_3) \\ &= -\frac{2\Delta}{\pi|\omega_2 - \omega_3|(|\omega_2 - \omega_3| + 2\Delta)} \ln \left( \frac{|\omega_2 - \omega_3| + \Delta}{\Delta} \right), \end{aligned} \quad (3.38)$$

onde os  $G^{(0)}$ 's são dados de acordo com a equação (3.2).

Usando teoria de perturbação convencional até segunda ordem ou, equivalentemente, até um *loop*, vamos calcular as correções aos vértices do modelo induzidas por flutuações quânticas

até essa ordem de perturbação. Utilizando a ação para o modelo de Anderson de uma impureza (2.59) e aplicando à função de Green (3.24) até segunda ordem e, ainda, com o auxílio das regras de Feynman, podemos efetuar as possíveis contrações obtendo para a função vértice irreduzível de quatro pontos  $\Gamma^{(4)}(\omega_1, \omega_2, \omega_3)$  no canal de interação de partículas com spins iguais e encontrar a seguinte expressão:

$$\Gamma_{\uparrow\uparrow}^{(4)}(\omega_1, \omega_2, \omega_3) = -U_{\uparrow\uparrow} + U_{\uparrow\uparrow}^2 \Pi(\omega_1 + \omega_2) + (U_{\uparrow\uparrow}^2 + U_{\uparrow\downarrow}^2) \chi_1(\omega_1 - \omega_3) + (U_{\uparrow\uparrow}^2 - 3U_{\uparrow\downarrow}^2) \chi_2(\omega_2 - \omega_3), \quad (3.39)$$

Veja que, para o modelo de Anderson simétrico, o sistema é invariante por rotação de spin, ou seja, ele é invariante pelo grupo de simetria  $SU(2)$ . Dessa forma, exibimos os diagramas de correção ao vértice do canal de partículas de mesmo spin na figura 3.9.

De maneira análoga, podemos calcular a função vértice irreduzível de quatro pontos para o canal de partículas com spins opostos. Assim, obteremos até segunda ordem de perturbação:

$$\Gamma_{\uparrow\downarrow}^{(4)}(\omega_1, \omega_2, \omega_3) = U_{\uparrow\downarrow} - 2U_{\uparrow\downarrow}^2 \Pi(\omega_1 + \omega_2) - 2U_{\uparrow\downarrow}U_{\uparrow\uparrow} \chi_1(\omega_1 - \omega_3) - 3U_{\uparrow\downarrow}^2 \chi_2(\omega_2 - \omega_3). \quad (3.40)$$

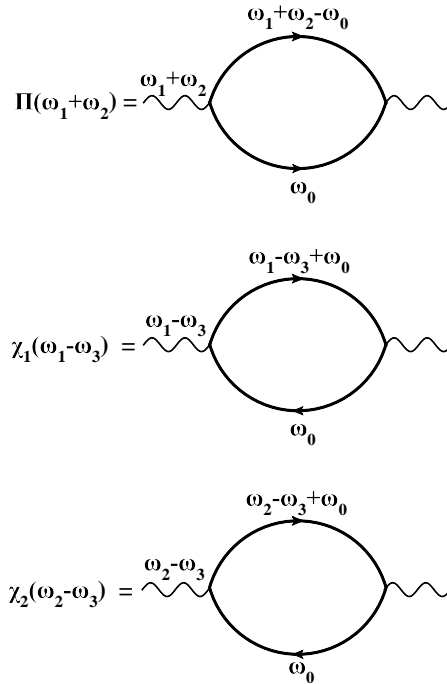


Figura 3.8: Bolhas do tipo partícula-partícula e partícula-buraco.

Mostramos os diagramas de Feynman correspondentes na figura 3.10. A seguir, aplicaremos a técnica do grupo de renormalização para o modelo de Anderson de uma impureza com o objetivo de derivar uma teoria efetiva de baixa energia que possa ser descrita em termos da teoria do líquido de Fermi de Landau. Isso será feito no próximo capítulo.

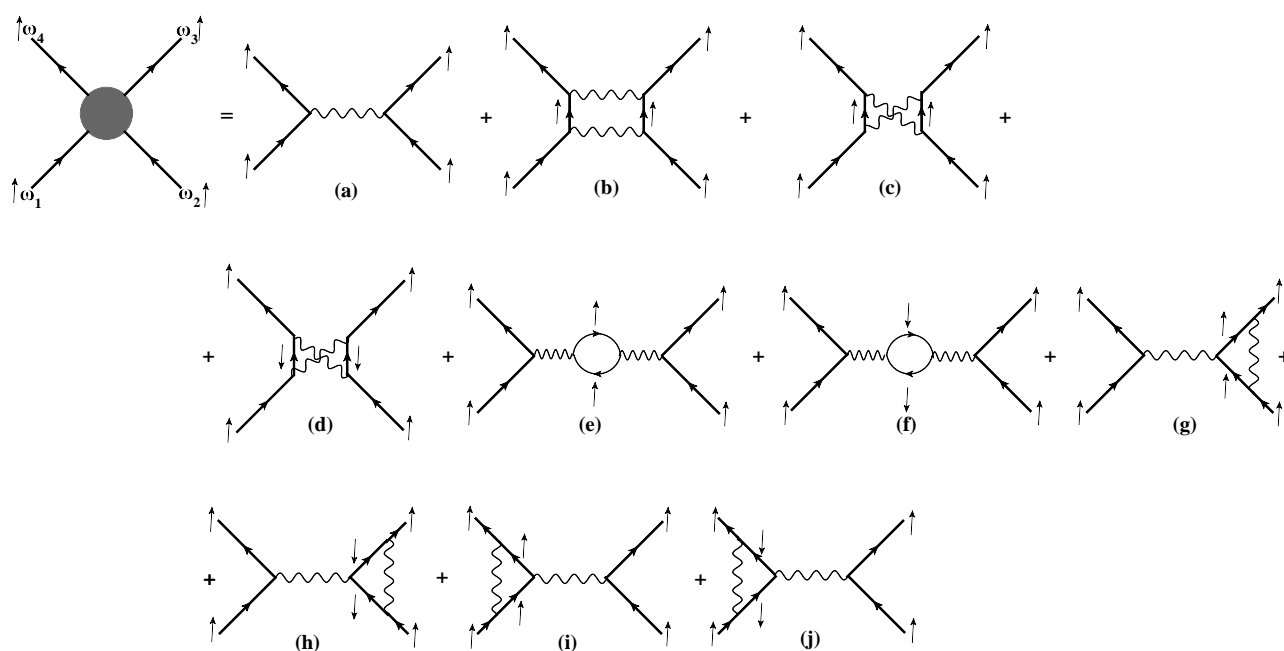


Figura 3.9: Os diagramas de Feynman correspondentes ao canal de partículas com spins iguais até um *loop*.

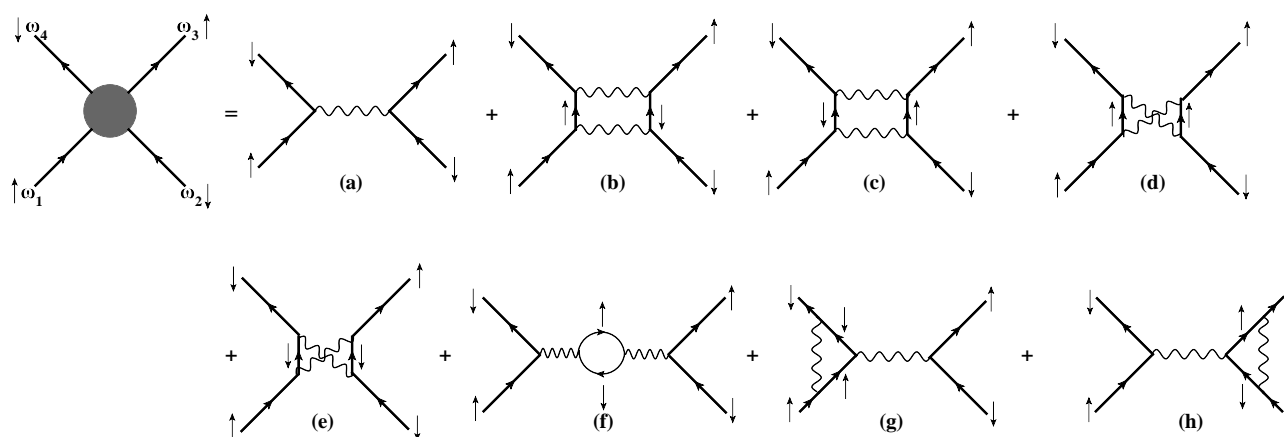


Figura 3.10: Os diagramas de Feynman correspondentes ao canal de partículas com spins opostos até um *loop*.

# Capítulo 4

## O Grupo de Renormalização

### 4.1 Introdução ao grupo de renormalização

Historicamente, o grupo de renormalização foi introduzido pela primeira vez por Stückelberg e Petermann [40] em 1953. No entanto, suas implicações para a eletrodinâmica quântica foram exploradas um ano depois por Gell-Mann e Low [41], quando analisavam a estrutura analítica dessa teoria que exibia inúmeras divergências induzidas por flutuações quânticas em teoria de perturbação. Mais tarde, em 1970, esses conceitos foram estendidos e generalizados por Callan (1970) [42] e Symanzik [43] e formam hoje o chamado grupo de renormalização de teoria de campos. Ainda na década de 70, uma outra formulação do GR (essencialmente equivalente ao método do GR de teoria de campos para modelos renormalizáveis) foi proposta por Wilson [44] com o objetivo de calcular os expoentes anômalos das chamadas transições de fase clássicas de segunda ordem, que se manifestam, tipicamente, em física da matéria condensada. Embora o método do grupo de renormalização de teoria de campos tenha como vantagem do ponto de vista técnico ser mais fácil de ser implementado em comparação ao método do GR de Wilson, esse último método se revela fisicamente mais intuitivo. Por essa razão, vamos explicar abaixo o método do GR de Wilson em linhas gerais.

A estratégia central da formulação do grupo de renormalização de Wilson está na derivação de uma teoria de campo efetiva de baixa energia para um dado modelo. Essa teoria efetiva é descrita por uma ação renormalizada que é capaz de descrever as propriedades físicas

de um dado sistema estudado até uma certa escala, que em nosso caso será uma escala de energia. Nesse sentido, o objetivo de se obter essa teoria de campo efetiva de baixa energia para um dado modelo eletrônico será o de estudar o seu comportamento nesse limite de tal forma a obter informações do estado fundamental do modelo e as suas excitações elementares de baixa energia. Dessa forma, seguindo o procedimento de Wilson, devemos primeiro escrever o modelo em termos de uma integral funcional que define a nossa teoria de campo. Essa teoria inicial (que define a chamada teoria “nua”) tem de ser apropriadamente regularizada no limite do ultravioleta, ou seja, até uma escala máxima de energia (ou um cutoff de energia  $\Lambda_0$ ). O próximo passo, consiste em separarmos modos de alta energia (modos rápidos) e modos de baixa energia (modos lentos) no modelo. Em seguida, integramos os graus de liberdade associados a escalas de energias altas, de modo a incluí-los de forma efetiva nos graus de liberdade associados a escalas de energias baixas. Logo depois, reescalonam-se as energias do modelo resultante de tal forma a estabelecer uma comparação entre as teorias antes e depois da integração. O processo de renormalização termina reescalando-se também os campos da teoria. Iterando esse procedimento várias vezes, obtemos uma transformação entre ações que, em essência, mapeia o modelo inicial em modelos efetivos definidos em termos de parâmetros renormalizados que são funções de uma nova escala variável: a chamada escala do grupo de renormalização  $\Lambda$ . No limite em que  $\Lambda \rightarrow 0$ , recuperamos finalmente o limite de baixa energia da teoria analisada.

Já para o caso do método do GR de teoria de campos a estratégia é um pouco diferente. A ideia central dessa última abordagem consiste em uma reorganização dos termos do esquema tradicional de teoria de perturbação via o método diagramático. Em linguagem de segunda quantização, essa estratégia consiste em uma redefinição dos parâmetros que definem o modelo eletrônico como, por exemplo, os acoplamentos e os campos associados aos operadores de criação e destruição de partículas, em termos dos respectivos parâmetros físicos observáveis experimentalmente (ou seja, os parâmetros ditos renormalizados ou efetivos). Esses parâmetros renormalizados passam a depender necessariamente de uma nova escala de energia, a escala do

grupo de renormalização  $\Lambda$  mencionada acima, de tal forma que o modelo efetivo resultante descreva exatamente a mesma física do modelo original que se pretende resolver. Por essa razão, esses parâmetros passam também a obedecer equações diferenciais (chamadas de equações do grupo de renormalização), que descrevem, por sua vez, o comportamento do modelo no limite de baixas energias. Essas equações do GR são, de uma maneira geral, semelhantes às equações do GR correspondentes obtidas usando o método de Wilson implementado perturbativamente.

Como o modelo de Anderson de uma impureza se trata de um modelo microscópico, todas as quantidades presentes em sua ação ( $U$ ,  $d_\sigma$  e  $\bar{d}_\sigma$ ) também estão definidos em uma escala microscópica. Por isso, podemos dizer que este modelo representa a teoria “nua” e que todos os parâmetros que o definem são igualmente “nus”. Dessa forma, iremos implementar o método do GR de teoria de campos para esse modelo de tal forma a obter o modelo efetivo correspondente no limite de física de baixa energia. Do ponto de vista técnico, isso será feito reescrevendo todos os parâmetros “nus” do modelo original em termos das quantidades fisicamente observadas (ou seja, renormalizadas). A diferença entre esses parâmetros será dada por um novo termo chamado, por convenção, de contratermo. Se este procedimento vier a bom termo, dizemos que a teoria original é renormalizável e o seu limite de baixa energia fica bem definido.

Na próxima seção, mostraremos como se aplica o método do GR de teoria de campos no caso do modelo de Anderson de uma impureza.

## 4.2 Sistemática do grupo de renormalização

Consideremos a ação (2.59). Para fazermos previsões para as quantidades físicas medidas experimentalmente no modelo de Anderson de uma impureza, redefiniremos todos os parâmetros da ação total  $S[\bar{d}, d]$  por parâmetros renormalizados adequados à escala de energia de interesse. Para fazer isso, definimos as seguintes relações:

$$d_\sigma = d_{\sigma,R} + \Delta d_{\sigma,R} \equiv Z^{\frac{1}{2}} d_{\sigma,R}, \quad (4.1)$$

$$\bar{d}_\sigma = \bar{d}_{\sigma,R} + \Delta \bar{d}_{\sigma,R} \equiv Z^{\frac{1}{2}} \bar{d}_{\sigma,R}, \quad (4.2)$$

$$U_\alpha = Z^{-2} [U_{\alpha,R} + \Delta U_{\alpha,R}], \quad (4.3)$$

com  $\alpha = \uparrow\uparrow$  ou  $\uparrow\downarrow$  e o termo  $\Delta U_{\alpha,R}$  sendo chamado de contratermo. Substituindo os parâmetros renormalizados na ação total “nua”, podemos reescrevê-la na seguinte ação renormalizada:

$$\begin{aligned} S_R [\bar{d}_R, d_R] &= \sum_{\sigma, i\omega_n} Z \bar{d}_{\sigma,R} \left[ -i\omega_n + \bar{E}_d + \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}}|^2}{i\omega_n - \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \right] d_{\sigma,R} \\ &+ [U_{\uparrow\downarrow,R} + \Delta U_{\uparrow\downarrow,R}] \int_{\omega_1, \omega_2, \omega_3} \bar{d}_{\uparrow,R}(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3) \bar{d}_{\downarrow,R}(\omega_3) d_{\downarrow,R}(\omega_2) d_{\uparrow,R}(\omega_1) \\ &+ [U_{\uparrow\uparrow,R} + \Delta U_{\uparrow\uparrow,R}] \int_{\omega_1, \omega_2, \omega_3} \bar{d}_{\uparrow,R}(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3) \bar{d}_{\uparrow,R}(\omega_3) d_{\uparrow,R}(\omega_2) d_{\uparrow,R}(\omega_1). \end{aligned} \quad (4.4)$$

Podemos ainda escrever essa ação de uma forma alternativa utilizando o contratermo de renormalização do campo fermiônico  $\Delta Z = Z - 1$ . Assim teremos,

$$\begin{aligned} S_R [\bar{d}_R, d_R] &= \sum_{\sigma, i\omega_n} \bar{d}_{\sigma,R} \left[ -i\omega_n + \bar{E}_d + \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}}|^2}{i\omega_n - \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \right] d_{\sigma,R} \\ &+ U_{\uparrow\downarrow,R} \int_{\omega_1, \omega_2, \omega_3} \bar{d}_{\uparrow,R}(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3) \bar{d}_{\downarrow,R}(\omega_3) d_{\downarrow,R}(\omega_2) d_{\uparrow,R}(\omega_1) \\ &+ U_{\uparrow\uparrow,R} \int_{\omega_1, \omega_2, \omega_3} \bar{d}_{\uparrow,R}(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3) \bar{d}_{\uparrow,R}(\omega_3) d_{\uparrow,R}(\omega_2) d_{\uparrow,R}(\omega_1) \\ &+ \sum_{\sigma, i\omega_n} \Delta Z \bar{d}_{\sigma,R} \left[ -i\omega_n + \bar{E}_d + \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}}|^2}{i\omega_n - \bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \right] d_{\sigma,R} \\ &+ \Delta U_{\uparrow\downarrow,R} \int_{\omega_1, \omega_2, \omega_3} \bar{d}_{\uparrow,R}(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3) \bar{d}_{\downarrow,R}(\omega_3) d_{\downarrow,R}(\omega_2) d_{\uparrow,R}(\omega_1) \\ &+ \Delta U_{\uparrow\uparrow,R} \int_{\omega_1, \omega_2, \omega_3} \bar{d}_{\uparrow,R}(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3) \bar{d}_{\uparrow,R}(\omega_3) d_{\uparrow,R}(\omega_2) d_{\uparrow,R}(\omega_1). \end{aligned} \quad (4.5)$$

Nas próximas seções, mostraremos a aplicação deste método até um *loop* para o modelo de Anderson de uma impureza.

### 4.3 O grupo de renormalização até um *loop*

Conforme mencionamos anteriormente, o grupo de renormalização nada mais é do que uma técnica analítica que permite reescrever o modelo original em termos de um modelo efetivo apropriado para escala de observação de interesse. Até o momento, todos os parâmetros de nosso problema estão definidos na escala de energia  $\Lambda_0$ . Tais parâmetros são chamados de “nus”.

Devemos agora definir um acoplamento efetivo, ou seja, renormalizado, definido para escalas de energia macroscópicas associadas à dinâmica de baixa energia do modelo. Para tanto, iremos reescrever toda a teoria de perturbação em função desses novos acoplamentos efetivos que então serão escritos em termos de uma escala arbitrária  $\Lambda$  de energia. Isso significa rearranjar todos os termos da série perturbativa de modo a remover potenciais não-analiticidades do modelo.

Nosso primeiro passo será substituir os acoplamentos “nus” pelos acoplamentos renormalizados que serão definidos para a escala de energia  $\Lambda$  que, por sua vez, tende a zero no limite de baixa energia associado ao modelo. Assim, os acoplamentos renormalizados são dados pela equação (4.3). Substituindo essa expressão na ação do modelo e calculando a função vértice de quatro pontos para o canal de interação entre partículas de spins iguais teremos

$$\begin{aligned} \Gamma_{\uparrow\uparrow}^{(4)}(\omega_1, \omega_2, \omega_3) &= -U_{\uparrow\uparrow,R} + U_{\uparrow\uparrow,R}^2 \Pi(\omega_1 + \omega_2) + (U_{\uparrow\uparrow,R}^2 + U_{\uparrow\downarrow,R}^2) \chi_1(\omega_1 - \omega_3) \\ &+ (U_{\uparrow\uparrow,R}^2 - 3U_{\uparrow\downarrow,R}^2) \chi_2(\omega_2 - \omega_3) - \Delta U_{\uparrow\uparrow,R}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Como  $U_{\uparrow\uparrow,R}$  é o acoplamento efetivo na escala de energia  $\Lambda$ , precisamos definir a seguinte prescrição para esta quantidade:

$$\Gamma_{\uparrow\uparrow}^{(4)}\left(\omega_1 = \frac{3\Lambda}{2}, \omega_2 = -\frac{\Lambda}{2}, \omega_3 = \frac{\Lambda}{2}\right) = -U_{\uparrow\uparrow,R}(\Lambda), \quad (4.7)$$

onde vamos definir que  $\Lambda > 0$ . Dessa forma o contratermo da teoria se torna

$$\Delta U_{\uparrow\uparrow,R}(\Lambda) = -(U_{\uparrow\uparrow,R}^2 - 2U_{\uparrow\downarrow,R}^2) \frac{2\Delta}{\pi\Lambda(\Lambda + 2\Delta)} \ln\left(\frac{\Lambda + \Delta}{\Delta}\right). \quad (4.8)$$

Analogamente podemos fazer o mesmo procedimento para o canal de partículas com spins opostos, dessa maneira

$$\Gamma_{\uparrow\downarrow}^{(4)}(\omega_1, \omega_2, \omega_3) = U_{\uparrow\downarrow,R} - 2U_{\uparrow\downarrow,R}^2 \Pi(\omega_1 + \omega_2) - 2U_{\uparrow\downarrow,R} U_{\uparrow\uparrow,R} \chi_1(\omega_1 - \omega_3) - 3U_{\uparrow\downarrow,R}^2 \chi_2(\omega_2 - \omega_3) + \Delta U_{\uparrow\downarrow,R}. \quad (4.9)$$

Estabelecendo a seguinte condição de renormalização para o acoplamento  $U_{\uparrow\downarrow,R}$

$$\Gamma_{\uparrow\downarrow}^{(4)}\left(\omega_1 = \frac{3\Lambda}{2}, \omega_2 = -\frac{\Lambda}{2}, \omega_3 = \frac{\Lambda}{2}\right) = U_{\uparrow\downarrow,R}(\Lambda), \quad (4.10)$$

obtemos que o contratermo  $\Delta U_{\uparrow\downarrow,R}$  fica

$$\Delta U_{\uparrow\downarrow,R}(\Lambda) = - (U_{\uparrow\downarrow,R}^2 + 2U_{\uparrow\uparrow,R}U_{\uparrow\downarrow,R}) \frac{2\Delta}{\pi\Lambda(\Lambda + 2\Delta)} \ln \left( \frac{\Lambda + \Delta}{\Delta} \right). \quad (4.11)$$

Note que, essa teoria de perturbação está bem definida no limite de baixa energia  $\Lambda \rightarrow 0$  do modelo. Desse fato, podemos concluir que toda a teoria foi renormalizada até segunda ordem de perturbação.

Vejamos como estes parâmetros renormalizados variam quando mudamos a escala de observação  $\Lambda$  em que eles estão definidos calculando a função  $\beta = \Lambda dU_\alpha/d\Lambda$  onde  $\alpha = \uparrow\uparrow$  ou  $\uparrow\downarrow$ . A função  $\beta$  analisa como as constantes de acoplamento variam ao mudarmos a escala de observação em que elas estão definidas. Usando o fato de que as grandezas “nuas” não dependem da escala de energia, segue que para o acoplamento com partículas de spins iguais  $U_{\uparrow\uparrow}$  teremos

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} (U_{\uparrow\uparrow,R} + \Delta U_{\uparrow\uparrow,R}) = 0. \quad (4.12)$$

Efetuada a derivada para este canal ficamos com:

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} U_{\uparrow\uparrow,R} = (U_{\uparrow\uparrow,R}^2 - 2U_{\uparrow\downarrow,R}^2) \frac{2\Delta}{\pi(\Lambda + 2\Delta)} \left[ \frac{1}{\Lambda + \Delta} - \frac{2(\Lambda + \Delta)}{\Lambda(\Lambda + 2\Delta)} \ln \left( \frac{\Lambda + \Delta}{\Delta} \right) \right]. \quad (4.13)$$

De maneira semelhante, para o canal de partículas com spins opostos teremos

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} (U_{\uparrow\downarrow,R} + \Delta U_{\uparrow\downarrow,R}) = 0. \quad (4.14)$$

De onde resulta que

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} U_{\uparrow\downarrow,R} = (U_{\uparrow\downarrow,R}^2 + 2U_{\uparrow\uparrow,R}U_{\uparrow\downarrow,R}) \frac{2\Delta}{\pi(\Lambda + 2\Delta)} \left[ \frac{1}{\Lambda + \Delta} - \frac{2(\Lambda + \Delta)}{\Lambda(\Lambda + 2\Delta)} \ln \left( \frac{\Lambda + \Delta}{\Delta} \right) \right]. \quad (4.15)$$

As equações (4.13) e (4.15) são chamadas de equações do grupo de renormalização até um *loop*. É importante observar que as correções dos vértices do modelo até um *loop* não levam em consideração os importantes efeitos das flutuações quânticas que afetam as excitações de uma partícula desse sistema. Para fazer isso, calcularemos agora a auto-energia associada a esse modelo.

## 4.4 Cálculo da auto-energia no modelo de Anderson

Nesta seção, vamos calcular a auto-energia  $\Sigma(i\omega)$  do modelo de Anderson de uma impureza até dois *loops*. Utilizando as regras de Feynman para o modelo associadas a nossa Hamiltoniana, podemos escrever a seguinte expressão para a auto-energia:

$$\Sigma(i\omega) = \Sigma^{(1)}(i\omega) + \Sigma^{(2)}(i\omega) + \Delta\Sigma(i\omega), \quad (4.16)$$

onde  $\Sigma^{(1)}(i\omega)$  representa as contribuições na auto-energia até um *loop*,  $\Sigma^{(2)}(i\omega)$  diz respeito às contribuições até dois loops e  $\Sigma_{\text{contratermos}}(i\omega)$  se refere aos diagramas gerados pelos contratermos definidos na teoria. Na figura 4.1 mostramos os diagramas de auto-energia gerados pela teoria. Veja que a quantidade referente a um *loop* não necessita ser determinada explicitamente uma vez que fizemos a conveniente escolha  $\mu = E_d$ . De fato, efetuando os cálculos para os diagramas de um *loop* (que são os chamados diagramas de Hartree-Fock) e ainda para seus respectivos contratermos, verificamos que essas integrais se anulam de modo que apenas o

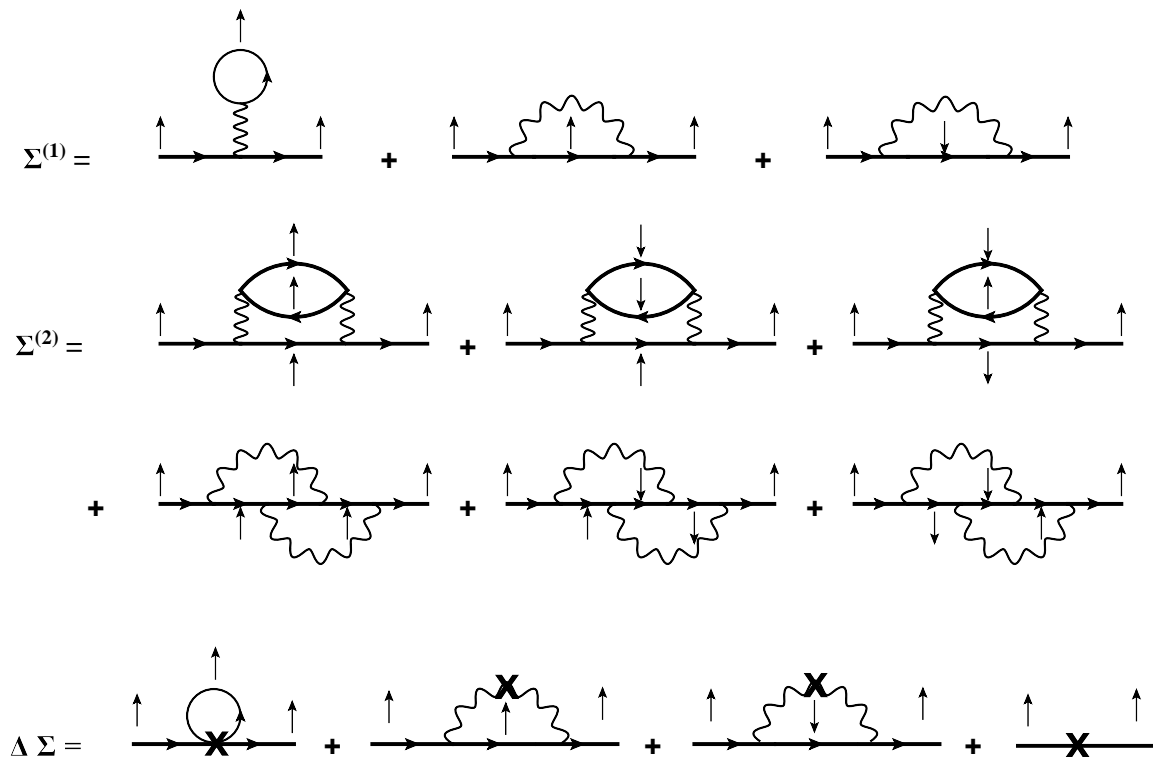


Figura 4.1: Diagramas de Feynman para auto-energia até dois *loops*. O último diagrama do contratermo da auto-energia corresponde a correção do peso da quasipartícula.

último diagrama do termo  $\Delta\Sigma$  será relevante em nossos cálculos.

Antes de calcular as contribuições de dois *loops* podemos linearizar a bolha de polarização partícula-buraco até primeira ordem. Assim teremos:

$$\Pi(i\omega + i\omega_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} G^{(0)}(i\omega') G^{(0)}(i\omega + i\omega_0 - i\omega'). \quad (4.17)$$

Resolvendo a integral ficamos com

$$\begin{aligned} (\pi\Delta) \Pi(i\omega + i\omega_0) &= \frac{\Delta \ln \left[ 1 + \frac{|\omega + \omega_0|}{\Delta} \right]}{|\omega + \omega_0| \left[ 1 + \frac{|\omega + \omega_0|}{2\Delta} \right]} \\ &= 1 - \frac{|\omega + \omega_0|}{\Delta} + O\left(\frac{|\omega + \omega_0|}{\Delta}\right)^2. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Desse modo, a auto-energia em dois *loops* fica

$$\Sigma^{(2)}(i\omega) = \frac{4iU_{\uparrow\downarrow}^2}{\pi\Delta} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_0}{2\pi} \frac{1}{\omega_0 + \Delta \text{sgn}(\omega_0)} \left[ 1 - \left( \frac{|\omega + \omega_0|}{\Delta} \right) \right]. \quad (4.19)$$

A primeira integral se anula, portanto

$$\Sigma^{(2)}(i\omega) = -\frac{4iU_{\uparrow\downarrow}^2}{\pi\Delta^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_0}{2\pi} \frac{1}{\omega_0 + \Delta \text{sgn}(\omega_0)} |\omega + \omega_0|. \quad (4.20)$$

em função da linearização, a integral acima diverge, de modo que teremos que incluir um *cutoff* ultravioleta  $\Lambda_0$  na teoria

$$\Sigma^{(2)}(i\omega) = -\frac{4iU_{\uparrow\downarrow}^2}{\pi\Delta^2} \int_{-\Lambda_0}^{\Lambda_0} \frac{d\omega_0}{2\pi} \frac{1}{\omega_0 + \Delta \text{sgn}(\omega_0)} |\omega + \omega_0|. \quad (4.21)$$

Supondo  $\omega > 0$  podemos dividir a integral nos intervalos

$$\Sigma^{(2)}(i\omega) = -\frac{4iU_{\uparrow\downarrow}^2}{2\pi^2\Delta^2} \left[ \int_0^{\Lambda_0} d\omega_0 \frac{\omega + \omega_0}{\omega_0 + \Delta} + \int_{-\omega}^0 d\omega_0 \frac{\omega + \omega_0}{\omega_0 - \Delta} + \int_{-\Lambda_0}^{-\omega} d\omega_0 \frac{\omega + \omega_0}{\omega_0 - \Delta} \right]. \quad (4.22)$$

Resolvendo a integral e lembrando que  $\Lambda_0 \gg \Delta$  obtemos

$$\Sigma^{(2)}(i\omega) = -\frac{4iU_{\uparrow\downarrow}^2}{\pi^2\Delta^2} \left[ \omega \ln \left( \frac{\Lambda_0}{\omega + \Delta} \right) + \Delta \ln \left( \frac{\Delta}{\omega + \Delta} \right) + \omega \right]. \quad (4.23)$$

Analogamente, podemos proceder de forma semelhante para o caso em que  $\omega < 0$ . Dessa forma encontraremos

$$\Sigma^{(2)}(i\omega) = -\frac{4iU_{\uparrow\downarrow}^2}{\pi^2\Delta^2} \left[ \omega \ln \left( \frac{\Lambda_0}{\omega - \Delta} \right) - \Delta \ln \left( \frac{\Delta}{\omega - \Delta} \right) + \omega \right]. \quad (4.24)$$

Tanto para o caso em que  $\omega > 0$  quanto para  $\omega < 0$  esse termo é não-analítico para  $\Lambda_0 \gg \Delta$ .

Para remover essa não-analiticidade, precisamos renormalizar também os campos fermiônicos. Por essa razão, vamos renormalizar os campos fermiônicos associados à nossa ação (2.59). Em outras palavras, vamos reescrever, como fizemos anteriormente, os campos fermiônicos “nus” em termos dos campos fermiônicos renormalizados conforme as equações (4.1) e (4.2). Com a ação renormalizada (4.5), vamos efetuar o cálculo perturbativo até dois *loops* da função  $\Gamma^{(2)}(i\omega)$  que é o inverso da função de Green  $G^{-1}(i\omega)$  associada ao sistema interagente. Esta função pode ser calculada utilizando-se a equação de Dyson (3.5)

$$\Gamma^{(2)}(i\omega) = [G^{(0)}]^{-1} - \Sigma(i\omega). \quad (4.25)$$

Dessa forma teremos

$$\Gamma^{(2)}(i\omega) = i\omega + i\Delta \text{sgn}(\omega) - \frac{4iU_{\uparrow\downarrow}^2}{\pi^2\Delta^2}\omega \ln\left(\frac{\Lambda_0}{\omega + \Delta}\right) - i\omega\Delta Z. \quad (4.26)$$

Para encontrarmos  $\Delta Z$ , estabeleceremos a seguinte condição de renormalização para  $\Gamma^{(2)}(i\omega)$ :

$$\text{Im} \Gamma^{(2)}(\omega = \Lambda) = \Lambda + \Delta. \quad (4.27)$$

Logo obteremos,

$$\Delta Z = -\frac{4U_{\uparrow\downarrow}^2}{\pi^2\Delta^2} \ln\left(\frac{\Lambda_0}{\Lambda + \Delta}\right), \quad (4.28)$$

de modo que da nossa condição de renormalização fica fácil encontrar  $Z$ . Daqui, é possível derivar uma equação do grupo de renormalização que descreve como o peso da quasipartícula varia quando nos aproximamos do limite de baixa energia do sistema. Derivando a equação anterior em relação a  $\Lambda$  encontramos

$$\frac{\Lambda}{Z} \frac{dZ}{d\Lambda} = \frac{4U_{\uparrow\downarrow}^2}{\pi^2\Delta^2} \left(\frac{\Lambda}{\Lambda + \Delta}\right). \quad (4.29)$$

Vamos observar o que fizemos até o momento. Descrevemos na seção anterior nosso cálculo dos acoplamentos renormalizados até um *loop* ou seja, até segunda ordem de perturbação enquanto que, na presente seção, desenvolvemos um cálculo para a auto-energia até dois *loops*. Uma

vez que levamos em consideração flutuações quânticas até dois *loops* no sistema poderemos incluir em nossos cálculos para os acoplamentos o chamado propagador “vestido” com efeitos de auto-energia. Mostraremos como fazê-lo na próxima seção.

## 4.5 Equações do grupo de renormalização com efeitos da auto-energia

Até o momento, utilizamos a sistemática do grupo de renormalização de teoria de campos para determinar os acoplamentos renormalizados numa escala de energia  $\Lambda$ . Calculamos, dessa maneira, a função vértice de quatro pontos para os canais de interação entre partículas de spin iguais e entre partículas de spin opostos. Em seguida, derivamos as equações do GR até um *loop* para os acoplamentos renormalizados correspondentes do modelo, o que nada mais é do que um procedimento para somar algumas classes de diagramas (construídas a partir de bolhas não-renormalizadas do tipo partícula-partícula e partícula-buraco) até ordem infinita em teoria de perturbação. No entanto, infelizmente, esse procedimento se revela insuficiente para remover uma instabilidade artificialmente gerada do tipo Stoner nesse modelo que se manifesta para acoplamentos que satisfazem  $U/\pi\Delta > 1$ . Para resolver esse tipo de problema, uma solução sugerida em [27] e [29] consiste em “vestir” os propagadores não-interagentes do modelo utilizados no método do GR diretamente com efeitos da energia. Dessa maneira, como estamos interessados no comportamento de baixa energia do modelo (particularmente na possível obtenção da escala de Kondo do problema), vamos nos concentrar no limite de baixas frequências  $|\omega| \lesssim \Delta$ . Nesse regime, é razoável supor que a função de Green renormalizada do modelo é dada pela forma do líquido de Fermi de Landau para baixas frequências (veja equação (3.30)), ou seja

$$G_\sigma(i\omega) = \frac{Z}{i\omega + iZ\Delta\text{sgn}(\omega)}, \quad (4.30)$$

onde  $Z$ , como vimos anteriormente, é o peso da quasipartícula que, no nosso caso, contém efeitos da auto-energia até dois *loops*.

A equação (4.30) é a função de Green interagente do modelo de Anderson de uma

impureza. Essa equação será incluída, a partir de agora, em todos os nossos cálculos utilizando o método do grupo de renormalização de teoria de campos no lugar da função de Green de Hartree-Fock utilizada anteriormente. Dessa forma, como ficará claro mais adiante quando discutirmos a solução numérica das equações do GR correspondentes, esse procedimento se revela de fato bem sucedido na remoção da instabilidade do tipo Stoner no modelo.

Podemos agora determinar as equações do grupo de renormalização até um *loop* vestidas com efeitos da auto-energia para os acoplamentos a partir das equações (4.13) e (4.15). Dessa maneira, seguindo esse procedimento, as novas equações do GR para os acoplamentos se tornam

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} U_{\uparrow\uparrow,R} = (U_{\uparrow\uparrow,R}^2 - 2U_{\uparrow\downarrow,R}^2) \frac{2Z^3\Delta}{\pi(\Lambda + 2Z\Delta)} \left[ \frac{1}{\Lambda + Z\Delta} - \frac{2(\Lambda + Z\Delta)}{\Lambda(\Lambda + 2Z\Delta)} \ln \left( \frac{\Lambda + Z\Delta}{Z\Delta} \right) \right], \quad (4.31)$$

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} U_{\uparrow\downarrow,R} = (U_{\uparrow\downarrow,R}^2 + 2U_{\uparrow\uparrow,R}U_{\uparrow\downarrow,R}) \frac{2Z^3\Delta}{\pi(\Lambda + 2Z\Delta)} \left[ \frac{1}{\Lambda + Z\Delta} - \frac{2(\Lambda + Z\Delta)}{\Lambda(\Lambda + 2Z\Delta)} \ln \left( \frac{\Lambda + Z\Delta}{Z\Delta} \right) \right]. \quad (4.32)$$

De forma essencialmente análoga, usando o procedimento de renormalização descrito acima, podemos calcular também a nova equação do grupo de renormalização para o peso da quasi-partícula. Da expressão (4.29), temos que essa equação do GR se torna

$$\frac{\Lambda}{Z} \frac{dZ}{d\Lambda} = \frac{4U_{\uparrow\downarrow}^2 Z}{\pi^2 \Delta^2} \left( \frac{\Lambda}{\Lambda + Z\Delta} \right). \quad (4.33)$$

Como vemos, essas equações do GR continuam sendo equações diferenciais acopladas entre si, que são difíceis de serem resolvidas analiticamente. Mais adiante, resolveremos numericamente essas equações do GR de tal forma a obter o comportamento do modelo no limite de baixa energia. Na próxima seção, continuaremos nossa implementação do grupo de renormalização de teoria de campos e derivaremos uma equação do GR para outra quantidade física importante do modelo: a susceptibilidade uniforme de spin.

## 4.6 Susceptibilidade uniforme de spin

Nas últimas seções, calculamos algumas grandezas físicas do nosso modelo microscópico

de modo a mostrar a sistemática do grupo de renormalização e derivar as equações do grupo de renormalização correspondentes. Agora, discutiremos sobre a função resposta associada à susceptibilidade uniforme de spin do modelo. Com a finalidade de obtermos essas quantidades devemos, conforme mencionamos, calcular a função resposta linear originada de um campo externo infinitesimal uniforme que acopla com os operadores número de ocupação. Para isso, adicionamos à nossa ação “nua” o seguinte termo

$$-h_{ext} \sum_{\sigma} \mathcal{T}_{\alpha} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}, \quad (4.34)$$

de modo que  $\mathcal{T}_{\alpha}$  é definido como a função resposta linear “nua”,  $h_{ext}$  é um campo externo uniforme e  $d_{\sigma}^{\dagger}$  e  $d_{\sigma}$  são respectivamente os campos fermiônicos “nus” associados aos operadores de criação e destruição de elétrons do nosso modelo. Em seguida, podemos definir duas funções irreduzíveis  $\Gamma_{\uparrow\uparrow}^{(2,1)}$  e  $\Gamma_{\downarrow\downarrow}^{(2,1)}$  que deverão ser renormalizadas definindo-se novos contratermos de maneira semelhante ao que foi feita na seção anterior. Em um cálculo perturbativo até um *loop* e utilizando as regras de Feynman apropriadas para o modelo, encontramos os diagramas das funções conforme as figuras 4.2 e 4.3.

Assim, seguiremos o mesmo procedimento mostrado anteriormente e reescreveremos os campos fermiônicos do modelo definido em (4.34). Para tanto, iremos expressar a função resposta “nua”  $\mathcal{T}_{\alpha}$  em termos da grandeza correspondente renormalizada  $\mathcal{T}_{\alpha}^{(R)}$ . Podemos então

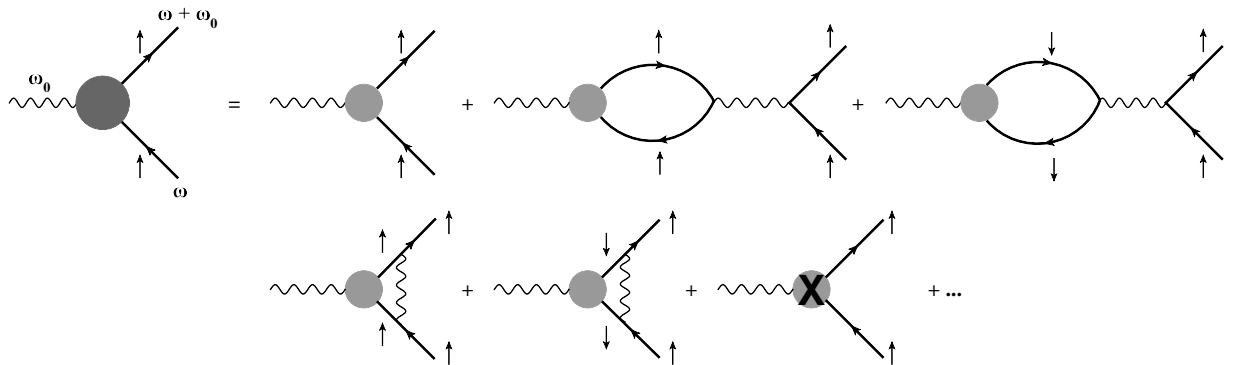


Figura 4.2: Os diagramas de Feynman do canal de partícula de mesmo spin correspondentes ao cálculo da função resposta uniforme do sistema até um *loop*. A função resposta renormalizada é representada, na figura, por círculos cinzas e os seu contratermo pelo círculo cinza com uma cruz.

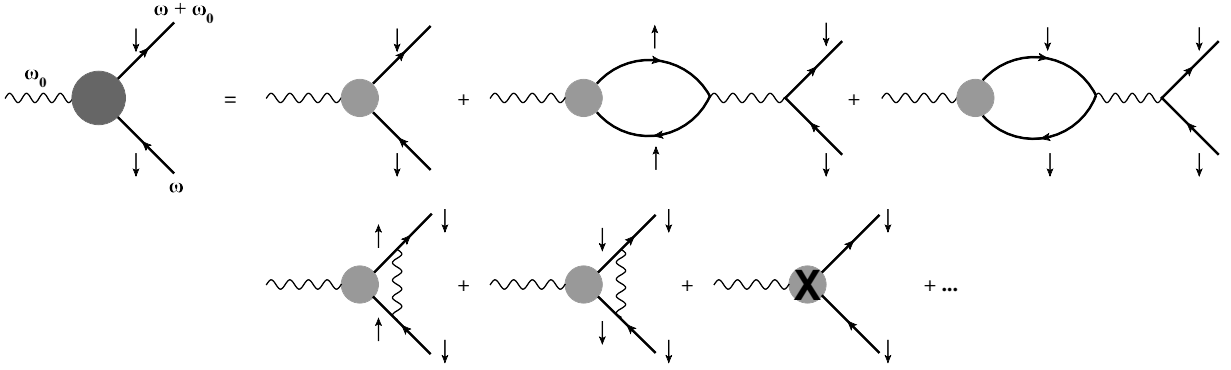


Figura 4.3: Os diagramas de Feynman do canal de partícula de spin contrários correspondetes ao cálculo da função resposta uniforme do sistema até um *loop*. A função resposta renormalizada é representada, na figura, por círculos cinzas e os seu contratermo pelo círculo cinza com uma cruz.

escrever

$$\mathcal{T}_\alpha = \frac{1}{Z} [\mathcal{T}_\alpha^{(R)} + \Delta\mathcal{T}_\alpha^{(R)}], \quad (4.35)$$

onde  $\Delta\mathcal{T}_\alpha^{(R)}$  é o contratermo. Para calcular esse contratermo, vamos estabelecer uma condição de renormalização para nos dizer em que escala a função resposta renormalizada está definida. Escolhendo a condição de renormalização teremos

$$\Gamma_\alpha^{(2,1)}(\omega = \Lambda) = -i\mathcal{T}_\alpha^R(\Lambda), \quad (4.36)$$

onde  $\alpha = \uparrow\uparrow$  ou  $\downarrow\downarrow$ . Dessa condição, os contratermos ficam

$$\Delta\mathcal{T}_{\uparrow\uparrow}^R(\Lambda) = 2U_{\uparrow\downarrow}^R\mathcal{T}_{\downarrow\downarrow}^R(\Lambda)\Pi(\Lambda), \quad (4.37)$$

$$\Delta\mathcal{T}_{\downarrow\downarrow}^R(\Lambda) = 2U_{\uparrow\downarrow}^R\mathcal{T}_{\uparrow\uparrow}^R(\Lambda)\Pi(\Lambda). \quad (4.38)$$

Antisimetrizando  $\mathcal{T}_\alpha^R$  em relação a projeção de spin  $\alpha$ , podemos definir a função resposta de spin como sendo

$$\mathcal{T}_{spin}^R(\Lambda) = \mathcal{T}_{\uparrow\uparrow}^R(\Lambda) - \mathcal{T}_{\downarrow\downarrow}^R(\Lambda), \quad (4.39)$$

Seguindo o mesmo esquema de renormalização proposto anteriormente, e inserindo em nossos cálculos o propagador vestido (4.30), podemos derivar as seguinte equações para essas quantidades

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \mathcal{T}_{spin}^R = -2U_{\uparrow\downarrow}^R \mathcal{T}_{spin}^R \frac{2Z^3\Delta}{\pi(\Lambda + 2Z\Delta)} \left[ \frac{1}{\Lambda + Z\Delta} - \frac{2(\Lambda + Z\Delta)}{\Lambda(\Lambda + 2Z\Delta)} \ln \left( \frac{\Lambda + Z\Delta}{Z\Delta} \right) \right]. \quad (4.40)$$

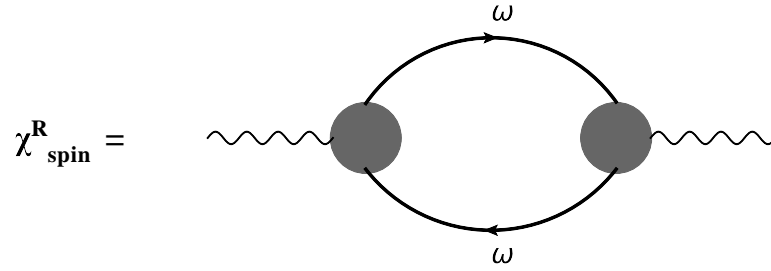


Figura 4.4: O diagrama de Feynman associado à susceptibilidade uniforme de spin.

Vamos passar para o cálculo da susceptibilidade uniforme de spin. Para isso, voltemos nossa atenção para a figura 4.4 na qual vemos que a susceptibilidade de spin é calculada diretamente a partir das funções resposta.

Calculando esses diagramas chegamos na equação do grupo de renormalização para essa quantidade

$$\mathcal{X}_{\text{spin}}^R = - (\mathcal{T}_{\text{spin}}^R)^2 \frac{2Z^3 \Delta}{\pi \Lambda (\Lambda + 2Z\Delta)} \ln \left( \frac{\Lambda + Z\Delta}{\Delta} \right), \quad (4.41)$$

Finalmente, derivando a equação (4.41) em relação a  $\Lambda$  obtemos

$$\Lambda \frac{d\mathcal{X}_{\text{spin}}^R}{d\Lambda} = - (\mathcal{T}_{\text{spin}}^R)^2 \frac{2Z^3 \Delta}{\pi (\Lambda + 2Z\Delta)} \left[ \frac{1}{\Lambda + Z\Delta} - \frac{2(\Lambda + Z\Delta)}{\Lambda (\Lambda + 2Z\Delta)} \ln \left( \frac{\Lambda + Z\Delta}{Z\Delta} \right) \right], \quad (4.42)$$

Uma vez que determinamos a equação do grupo de renormalização para a susceptibilidade uniforme de spin, nosso próximo passo será analisar numericamente o fluxo de todas as quantidades calculadas discutidas até aqui no limite de baixa energia do sistema e, em seguida, discutir os resultados. Isso será feito no capítulo que se segue.

# Capítulo 5

## Resultados: Cálculos Numéricos

Neste capítulo, discutiremos a solução numérica das equações do grupo de renormalização derivadas anteriormente, ou seja, as equações do grupo de renormalização para os acoplamentos, para o peso da quasipartícula e para a susceptibilidade uniformes de spin. Conforme constatamos, essas equações diferenciais são acopladas entre si e, por isso, complicadas de serem resolvidas analiticamente. Com o intuito de acessarmos as informações referentes às propriedades físicas do modelo de Anderson de uma impureza no limite de baixa energia vamos utilizar um método numérico, o qual explicaremos a seguir.

### 5.1 O método numérico

Discutiremos, nesta seção, a estratégia numérica que utilizamos para resolver as equações diferenciais de primeira ordem acopladas encontradas no capítulo anterior. Essas equações do grupo de renormalização, como mencionadas anteriormente, são complicadas de serem resolvidas analiticamente. Por isso, lançaremos mão de um método numérico.

O método numérico utilizado para resolver as equações do grupo de renormalização dos acoplamentos renormalizados do sistema é o método Runge-Kutta de quarta ordem [45] que foi implementado neste trabalho utilizando a linguagem de programação Fortran 90.

Como forma de elaborarmos o programa, definimos o parâmetro  $l$  que para nós será o passo do grupo de renormalização. Esse parâmetro está relacionado à escala  $\Lambda$  da nossa teoria efetiva da seguinte forma:,  $\Lambda = \Lambda_0 e^{(-l)}$ , onde  $\Lambda_0$  é o *cutoff* ultravioleta associado à energia.

Assim, quanto maior o passo do grupo de renormalização ( $l$ ), menor a escala de energia  $\Lambda$ . Além disso, escolhemos as condições iniciais para a resolução das equações diferenciais de primeira ordem  $l = 0$ , onde o acoplamento de partículas de mesmo spin e o acoplamento de partículas de spins opostos são, respectivamente,  $U_{\uparrow\uparrow} = 0$  e  $U_{\uparrow\downarrow} = U$ .

Ao longo deste capítulo, discutiremos o modelo de Anderson de uma impureza definido com acoplamentos que vão de fracos ( $U/\pi\Delta < 1$ ) a fortes ( $U/\pi\Delta > 1$ ). Discutiremos, ainda, os resultados numéricos para esta situação utilizando a abordagem do grupo de renormalização explicado anteriormente. Por fim, faremos a discussão sobre a natureza das excitações elementares presentes em nosso modelo analisando o fluxo do GR da susceptibilidade uniforme associada ao spin.

## 5.2 O fluxo do GR dos acoplamentos

Nesta seção, vamos nos limitar à análise da solução numérica das equações do grupo de renormalização até um *loop* para os acoplamentos renormalizados como função de  $\Lambda$  ou seja, as equações (4.13) e (4.15).

Utilizando o método numérico descrito anteriormente, obtivemos o chamado fluxo do grupo de renormalização para os acoplamentos  $U_{\uparrow\uparrow}$  e  $U_{\uparrow\downarrow}$  exibidos nas figuras 5.1a e 5.1b. Ambos os acoplamentos foram obtidos até um passo de  $l = 30$  e com a condição inicial de que  $U_{\uparrow\uparrow} = 0$  e  $U_{\uparrow\downarrow} = U$ . Na figura 5.1a, vemos que o acoplamento  $U_{\uparrow\uparrow}$ , mesmo partindo inicialmente do valor nulo, renormaliza rapidamente para valores negativos. Isso significa que o acoplamento  $U_{\uparrow\uparrow}$  adquire um caráter atrativo no limite de baixa energia. Por outro lado, analisando a figura 5.1b, nota-se que os vários valores do acoplamento  $U_{\uparrow\downarrow}$  sempre se renormalizam no regime de baixa energia para resultados positivos o que evidencia seu comportamento repulsivo. Além disso, fica claro a presença de *plateaus* nos fluxos do grupo de renormalização o que indica a existência de ponto fixo no limite do infravermelho.

Podemos afirmar que os resultados obtidos para o fluxo dos acoplamentos é numericamente estável o que nos encoraja a prosseguir com a nossa metodologia.

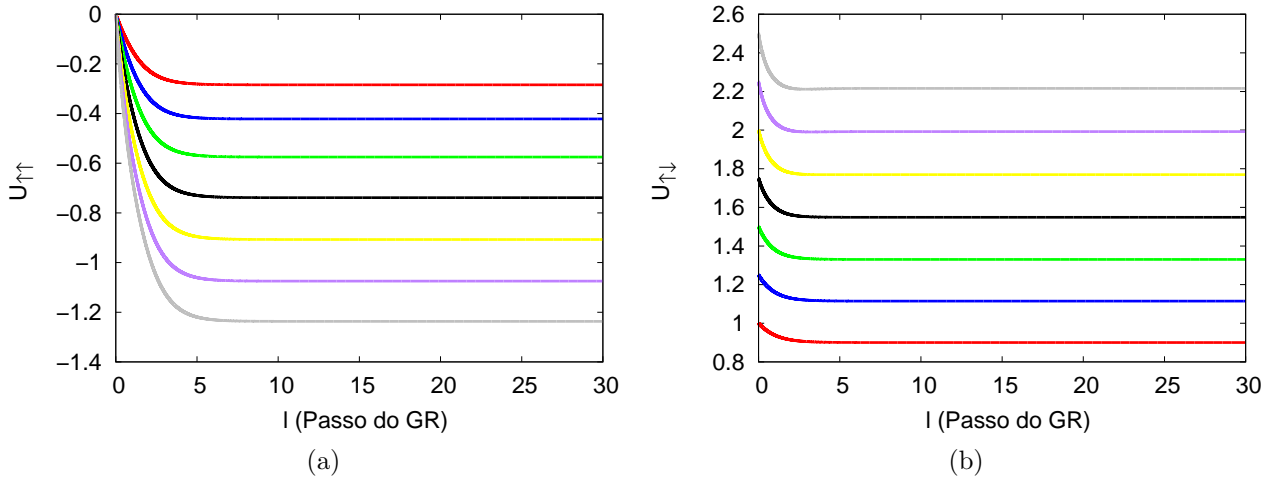


Figura 5.1: Fluxo de renormalização até um *loop* dos acoplamentos efetivos do modelo de Anderson de uma impureza. Como condição inicial utilizamos  $l = 0$ ,  $U_{\uparrow\uparrow} = 0$  e  $U_{\uparrow\downarrow} = U$  onde  $U$  é o parâmetro de interação local do modelo de Anderson.

### 5.3 O fluxo do peso da quasipartícula

No capítulo 4 derivamos a equação do grupo de renormalização que descreve o fluxo do peso da quasipartícula em nosso sistema. Essa quantidade afeta diretamente as equações do grupo de renormalização para os acoplamentos e para as susceptibilidades. A equação (4.29) foi resolvida numericamente levando-se em consideração que o peso da quasipartícula  $Z$  é identicamente igual a um para a situação com a escala de  $\Lambda$  ao *cutoff*  $\Lambda_0$ , ou seja, estamos usando como condição inicial  $Z(l = 0) = 1$ .

Na figura 5.2, mostramos o peso da quasipartícula em função do passo do grupo de renormalização ( $l$ ) para quatro escolhas de acoplamentos. Verificamos que o peso da quasipartícula renormaliza fortemente para cada valor da interação e ainda,  $Z$  sempre permanece finito, o que sugere a existência de excitações do tipo quasipartículas fermiônicas bem definidas no limite de baixa energia do sistema e a descrição do mesmo através da teoria do líquido de Fermi de Landau. Para interações fracas,  $Z$  renormaliza para valores próximos à unidade o que implica no caráter metálico do estado fundamental ao passo que, para interações fortes, até o valor em que pudemos ir numericamente, percebemos que o peso da quasipartícula renormaliza

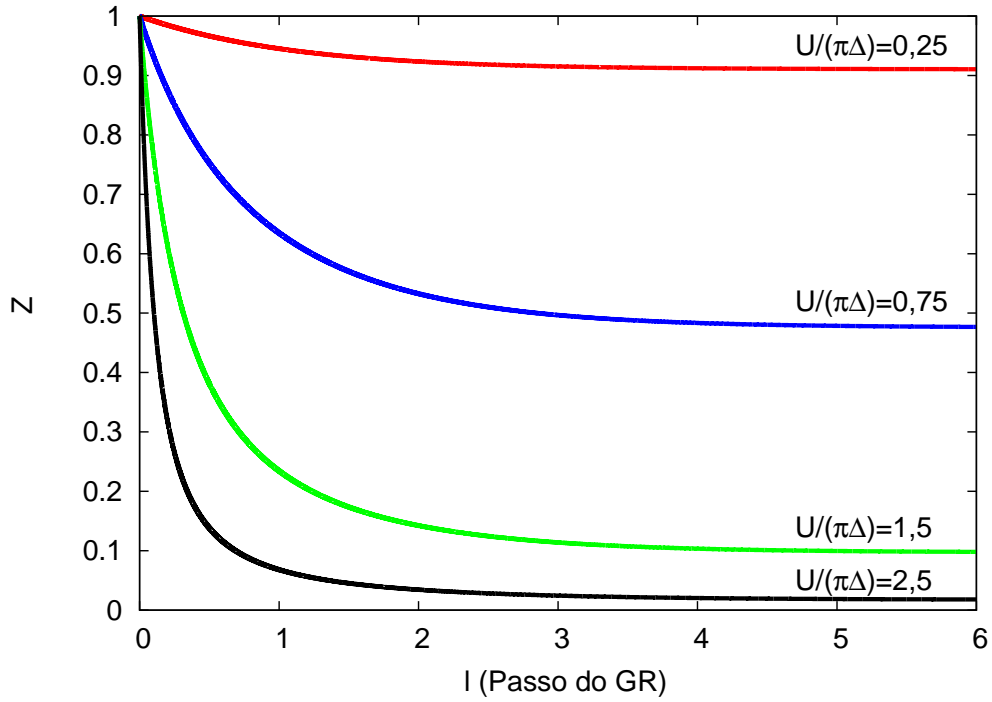


Figura 5.2: Fluxo para o peso da quasipartícula para quatro valores de acoplamentos.

para valores próximos, mas nunca iguais a zero. Isto significa que, para este último regime de interação, o modelo conserva suas características condutoras embora o pico da quasipartícula na função espectral se estreite fortemente.

Para continuarmos nossa análise sobre esta quantidade mostraremos a seguir a relação direta do peso da quasipartícula com o acoplamento.

## 5.4 Inverso do peso da quasipartícula em função dos acoplamentos

Como forma de verificar para nosso modelo se a escala Kondo é reproduzida utilizando o método do grupo de renormalização de teoria de campos, vamos analisar o gráfico do inverso do peso da quasipartícula  $Z^{-1}$  em uma escala logarítmica em função de  $U/(\pi\Delta)$ . A ideia aqui é comparar nosso resultado com as conclusões dadas pelo método preciso do grupo de renormalização numérico [26], pela teoria de perturbação até segunda ordem [3], conforme vimos na equação (3.34) para  $U \ll \Delta$ , e ainda, pelo resultado oriundo do método Bethe

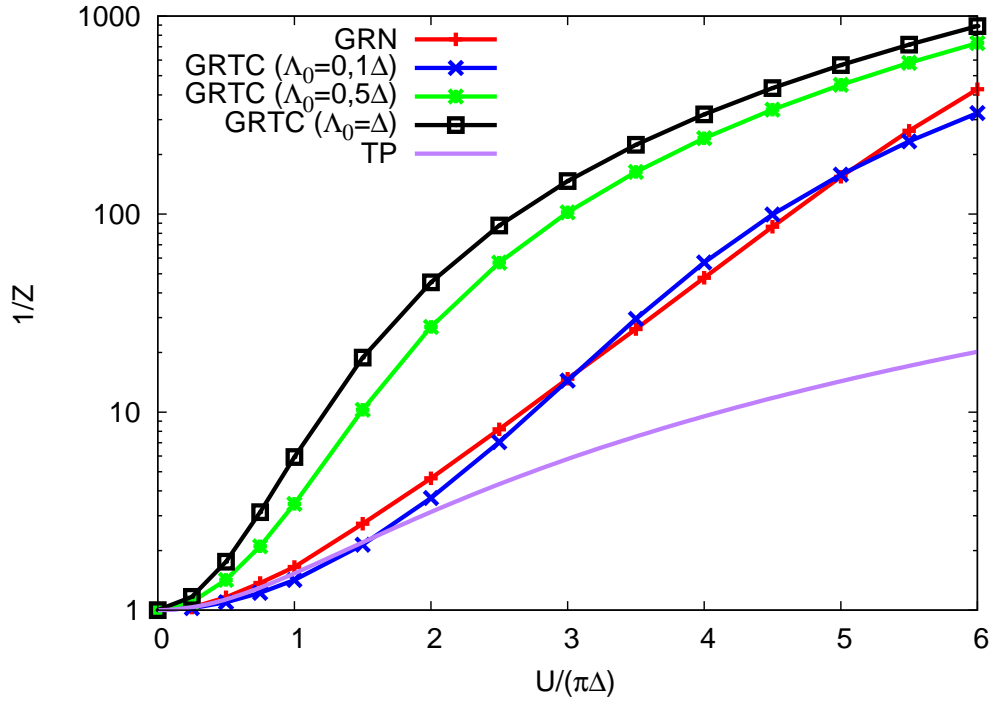


Figura 5.3: O inverso do peso da quasipartícula como função de  $U/(\pi\Delta)$  utilizando o grupo de renormalização de teoria de campos (GRTC). Como comparação colocamos os resultados da teoria de perturbação até segunda ordem (TP) [3] e do grupo de renormalização numérico (GRN) extraído da Ref. [26].

ansatz [39] para  $U \gg \Delta$  contido na equação (3.33).

Para o cálculo numérico utilizamos a equação (4.29) com a condição inicial  $Z = 1$ . Além disso, variamos  $\Lambda_0$  em função de  $\Delta$  com valores que iam de  $\Lambda_0 = 0,1\Delta$  até  $\Lambda_0 = \Delta$ . O resultado obtido é colocado na figura 5.3. Com a intenção de facilitar nossa análise, nós separamos a razão  $U/(\pi\Delta)$  em limites de acoplamentos fraco e forte. Observando o gráfico, percebemos que a curva para a teoria de perturbação concorda quantitativamente com o resultado exato para  $U/(\pi\Delta) < 1,0$  que configura o limite de acoplamento fraco. Para  $U/(\pi\Delta) > 1,0$  o comportamento exponencial de  $1/Z$  vem à tona, determinando dessa forma o limite de forte acoplamento. A partir dessas considerações, no que diz respeito ao nosso resultado, é importante perceber que o comportamento de cada uma das três curvas que geramos depende da relação entre  $\Lambda_0$  e  $\Delta$ . Para valores relativamente grandes de  $\Lambda_0$  vemos que o resultado se afasta em relação ao valor dado pelo grupo de renormalização numérico que, como dissemos, mostra

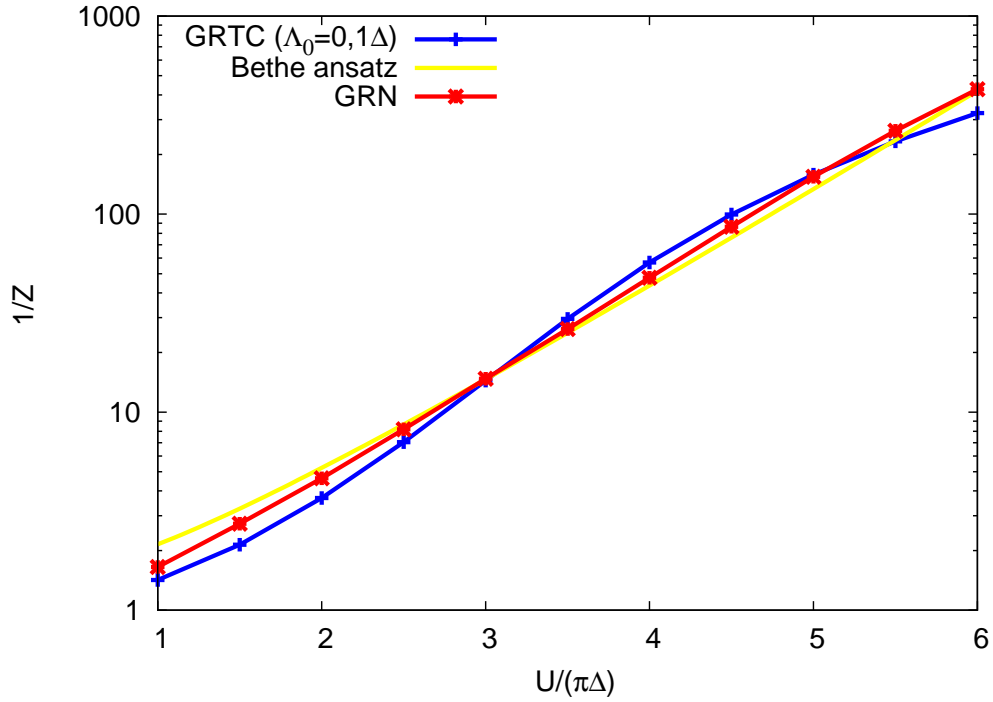


Figura 5.4: O inverso do peso da quasipartícula como função de  $U/(\pi\Delta)$  utilizando o grupo de renormalização de teoria de campos (GRTC) para  $\Lambda_0 = 0,1\Delta$ . Comparamos este resultado com o dado pelo método Bethe ansatz [39] e pelo método do grupo de renormalização numérico (GRN) extraído da Ref. [26].

o comportamento numericamente preciso desta quantidade. Por outro lado, ajustando  $\Lambda_0$  para  $0,1\Delta$  encontramos um resultado próximo (mas não igual) do valor de referência (dado pelo GRN). Neste caso, nosso resultado para o inverso do peso da quasipartícula do modelo de Anderson de uma impureza concorda qualitativamente com os dados do grupo de renormalização numérico no regime de acoplamento moderado até uma faixa do acoplamento forte ( $U/\pi\Delta < 6$ ) e, também, de forma qualitativa, no limite de fraco acoplamento. Além disso, se compararmos o resultado dado pela teoria de perturbação até segunda ordem encontramos, para  $\Lambda_0 = 0,1\Delta$ , um resultado qualitativamente melhor no intervalo de  $2.0 < U/(\pi\Delta) < 6,0$ . Para tornar claro este fato, comparamos nosso resultado com o fornecido pelo método Bethe ansatz no limite em que  $U \gg \Delta$  e novamente, com o método do grupo de renormalização numérico conforme gráfico da figura 5.4. Este resultado reforça o fato de que no intervalo considerado conseguimos reproduzir qualitativamente o resultado esperado para o peso da quasipartícula.

É claro que um empecilho de nosso resultado é a dependência de  $\Lambda_0$  em função de  $\Delta$ . Isto é uma consequência da linearização da auto-energia do modelo que escolhemos para atacar este problema. Outra possibilidade para essa discrepância é que esse resultado pode refletir a nossa escolha de renormalizar os acoplamentos em um *loop* e a auto-energia em dois *loops*. Para ser mais consistente, a renormalização das duas quantidades tem de ser na mesma ordem de teoria de perturbação. Além disso, isso significa que nosso resultado ainda subestima a força das flutuações quânticas no modelo de Anderson de uma impureza para uma faixa de interação tão grande quanto esta que estamos considerando. Evidentemente este fato estabelece um limite de validade para a nossa abordagem para esse problema. Por essa razão, para trabalhos futuros, pretendemos implementar um cálculo de dois *loops* completo (ou seja, incluir diagramas de dois *loops* para os acoplamentos) para verificar se nesse caso poderíamos obter uma concordância mais quantitativa com os resultados exatos.

Podemos ainda colocar nosso resultado em contexto com alguns outros trabalhos disponíveis na literatura tal qual o trabalho de Karrasch *et al.* [25] que implementou recentemente um estudo com o grupo de renormalização funcional de Wilson para algumas quantidades do modelo de Anderson de uma impureza como a massa efetiva, a susceptibilidade de spin estático e a função espectral. Nesse trabalho, concluiu-se que enquanto o método utilizado por eles reproduz com precisão os resultados do grupo de renormalização numérico em regime de fraco acoplamento, ele falha por outro lado em determinar a escala Kondo para o modelo. Desse ponto de vista podemos dizer que, embora nosso resultado também não reproduza a escala Kondo em forte acoplamento, ele fornece um quadro qualitativo para o peso da quasipartícula.

## 5.5 Resultados para a função resposta e a susceptibilidade de spin

Conforme mencionamos no capítulo anterior, para calcularmos a função resposta e a susceptibilidade de spin, devemos resolver auto-consistentemente as equações (4.40) e (4.42) utilizando o método numérico explicado anteriormente. A susceptibilidade uniforme de spin é

de grande importância uma vez que caracteriza um sistema eletrônico e fornece informações relevantes sobre a natureza de suas excitações elementares de spin em baixas energias. Resolvendo numericamente as equações do grupo de renormalização correspondentes, encontramos o gráfico mostrado na figura 5.5 para a função resposta linear uniforme de spin. Com vários valores para os acoplamentos, vemos que a função resposta renormaliza para resultados maiores que a unidade. Além disso, analisando o fluxo de renormalização da função resposta, observamos que para qualquer regime de interação esta quantidade permanece finita.

Apresentamos, em seguida, os cálculos para a susceptibilidade de spin uniforme. No entanto, ao examinarmos a equação do grupo de renormalização para essa quantidade (4.42), nota-se que ela flui mesmo para a situação de acoplamento nulo, ou seja, para o caso não-interagente. Dessa forma, é essencial que se faça um ajuste fino na condição inicial dessa equação do grupo de renormalização (isto é, na susceptibilidade de spin “nua”) de tal forma que, no caso em que  $U = 0$ , a susceptibilidade de spin física (ou renormalizada) flua para o seu

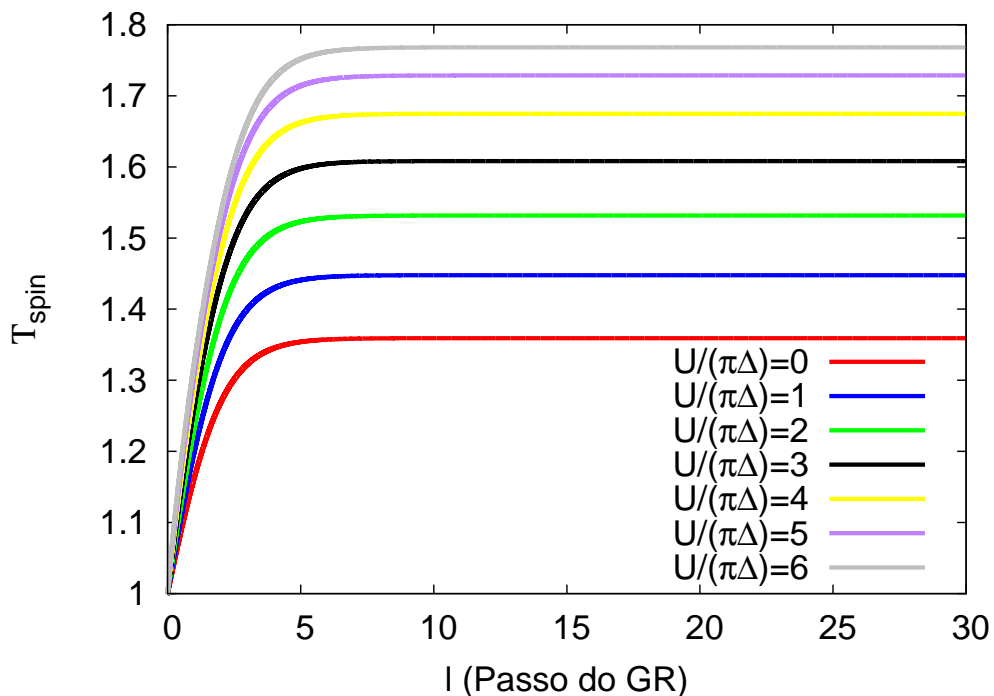


Figura 5.5: Função resposta linear de spin em função do passo do grupo de renormalização utilizando o método do grupo de renormalização de teoria de campos.

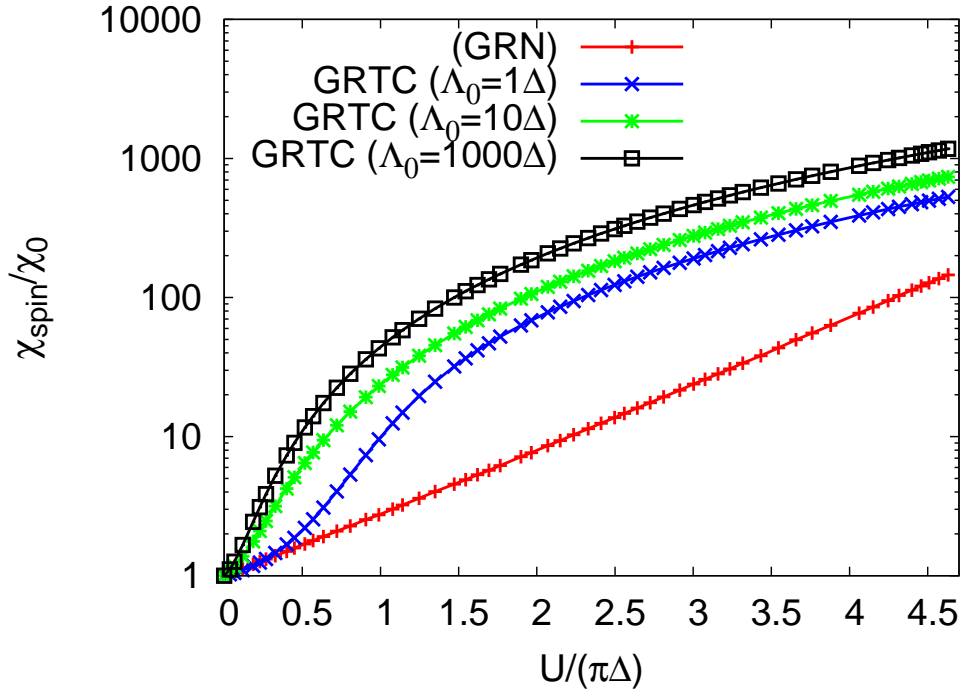


Figura 5.6: A razão  $\chi_{spin}/\chi_0$  como função de  $U_0/(\pi\Delta)$  utilizando o grupo de renormalização de teoria de campos (GRTC). Para comparação colocamos o resultado dado pelo grupo de renormalização numérico [25].

valor exato que é  $\chi_0 = 1/\pi\Delta$ . Esse procedimento possui uma analogia com outras teorias de campo como a teoria  $\phi^4$  (ou, em física da matéria condensada, a teoria de Ginzburg-Landau-Wilson (GLW) [46], [47]) em que o parâmetro de massa “nua” da teoria (que está relacionada com a temperatura do sistema na teoria de GLW) tem que ser ajustada finamente para que o sistema fique sem massa, ou seja, que esteja sempre próximo da temperatura crítica de uma transição de fase clássica de segunda ordem.

Seguindo o procedimento descrito acima, mostramos a solução numérica das equações do grupo de renormalização para essa quantidade em termos da razão entre a susceptibilidade uniforme de spin renormalizada com a susceptibilidade não-interagente em função da razão  $U/(\pi\Delta)$  (veja a figura 5.6). Podemos perceber uma concordância qualitativa de nosso resultado com o valor preciso dado pelo grupo de renormalização numérico [25] para o limite de acoplamento fraco. Particularmente, se admitirmos a curva para  $\Lambda_0 = \Delta$  encontramos resultados próximos para o intervalo de  $U/(\pi\Delta) \lesssim 0.4$ . Para outras faixas de acoplamento nossa

comparação fica meramente qualitativa. É importante mencionar que para este resultado a dependência entre  $\Lambda_0$  e  $\Delta$  é atenuada se compararmos com o resultado que encontramos para  $1/Z$  discutido anteriormente.

Com isso, podemos dizer que com o truncamento aqui apresentado, nosso método nos dá um entendimento inicial de como se comportam as propriedades para o modelo de Anderson de uma impureza. Desse ponto de vista, acreditamos que o grupo de renormalização de teoria de campos aqui aplicado pode ser uma alternativa possível para descrever as propriedades de equilíbrio do modelo estudado nesta dissertação.

# Capítulo 6

## Conclusão

Nesta dissertação de mestrado, implementamos o método do grupo de renormalização de teoria de campos até um *loop* para os acoplamentos e dois *loops* para a auto-energia para o modelo de Anderson de uma impureza. Buscamos com isso, efetuar um teste inicial com essa abordagem de modo a tentar obter, mesmo que qualitativamente, algumas importantes propriedades associadas ao modelo.

Com a finalidade de aplicarmos o método do grupo de renormalização, utilizamos o método diagramático de Feynman aplicado ao modelo de Anderson de uma impureza e calculamos todos os diagramas de correção ao vértice até um loop. Constatou-se que nenhum desses diagramas apresentavam algum tipo de singularidade ou divergência, o que está de acordo com os outros resultados obtidos na literatura.

Levando em consideração os importantes efeitos das flutuações quânticas, inserimos em nossos cálculos a auto-energia até dois *loops*. Utilizando o método do grupo de renormalização, derivamos analiticamente e então resolvemos numericamente as equações diferenciais acopladas para os acoplamentos, para o peso da quasipartícula e para a susceptibilidade uniforme de spin.

Para aplicarmos o método do grupo de renormalização, definimos uma transformação entre modelos que mapeia o modelo inicial (ou “nu”) em outro modelo denominado renormalizado (ou efetivo). Uma vez que montamos todo o esquema do grupo de renormalização, determinamos as equações para os acoplamentos efetivos do sistema. Além disso, para remover uma instabilidade artificialmente gerada do tipo Stoner, “vestimos” os propagadores

não-interagentes do modelo com efeitos de auto-energia.

Neste ponto, utilizando o método numérico, vimos que o fluxo dos acoplamentos do canal  $U_{\uparrow\uparrow}$  renormalizam para valores negativos o que evidencia seu comportamento atrativo enquanto que, para o canal  $U_{\uparrow\downarrow}$ , a renormalização ocorre para valores positivos o que mostra seu caráter repulsivo. Analizando ainda os *plateaus* nos fluxos do grupo de renormalização percebemos a presença de ponto fixo no limite do infravermelho.

Determinando numericamente o peso da quasipartícula, verificamos que esta quantidade renormaliza fortemente à medida em que aumentamos o valor da interação. Além disso, constatamos o comportamento metálico do modelo uma vez que o gráfico de  $Z$  em função do passo do grupo de renormalização resulta em valores finitos o que indica que este sistema é bem descrito pela teoria do líquido de Fermi de Landau para baixas energias. Por outro lado, com a finalidade de averiguarmos o quão bom foi nosso truncamento em um *loop* nos acoplamentos e dois *loops* na auto-energia, comparamos nossos resultados com o método do grupo de renormalização numérico de Wilson da referência [26]. Para isso, plotamos o gráfico do inverso do peso da quasipartícula em função de  $U/(\pi\Delta)$ . Dessa forma, verificamos que nosso resultado concorda de forma qualitativa com o resultado dado pelo grupo de renormalização numérico para acoplamentos até a ordem de  $U/(\pi\Delta) < 6$ . Percebemos ainda que, comparando nosso resultado com o dado pela teoria de perturbação até segunda ordem [3], encontramos um resultado que concorda qualitativamente no limite de baixas energias e ainda, um resultado qualitativamente mais próximo dos resultados do GRN e ansatz de Bethe para  $U/(\pi\Delta) > 2$ .

Devemos ainda considerar uma sensibilidade importante nos resultados que encontramos em nossa aproximação utilizando o método de grupo de renormalização de teoria de campos. Em vários resultados, constatamos uma dependência deles com a relação entre  $\Lambda_0$  e  $\Delta$ . Como citamos, isto ocorreu por conta do tipo de linearização que escolhemos. De qualquer forma, nossa aproximação utilizando o grupo de renormalização, mostrou-se qualitativamente eficaz em capturar os aspectos gerais do problema.

No que diz respeito ao resultado encontrado para a susceptibilidade uniforme de spin,

vimos que este apresenta uma menor dependência com a relação entre  $\Lambda_0$  e  $\Delta$ . Além disso, esse resultado mostrou que está qualitativamente próximo do resultado preciso do grupo de renormalização numérico da referência [25] até valores de  $U/(\pi\Delta) < 0,4$ .

Como perspectiva futura de trabalho, o próximo passo consistirá em implementar o cálculo completo de dois *loops* para o modelo, o que se mostra ser tecnicamente mais simples utilizando esta abordagem do grupo de renormalização de teoria de campos se comparada com o método do grupo de renormalização funcional. Acreditamos que este cálculo deverá melhorar quantitativamente nossos resultados para este modelo no que diz respeito ao regime de forte acoplamento. Assim, podemos dizer que com o presente trabalho, pudemos mostrar o potencial do método do grupo de renormalização de teoria de campos, de modo que esta técnica representa uma alternativa promissora para descrever as correlações eletrônicas descritas pelo modelo de Anderson de uma impureza.

# Bibliografia

- [1] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961).
- [2] A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge University Press: New York, 1993).
- [3] K. Yamada, *Electron Correlation in Metals* (Cambridge University Press: New York, 2004).
- [4] D. Goldhaber-Gordon, H. Shtrikman, D. Mahalu, D. Abusch-Magder, U. Meirav e M. A. Kastner, *Nature* **391**, 156 (1998).
- [5] W. Metzner e D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 324 (1989).
- [6] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth e M. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).
- [7] W. Kohn e L. J. Scham, *Phys. Rev.* **140**, 1133 (1965).
- [8] N. Andrei, K. Furuya e J. H. Lowenstein, *Rev. Mod. Phys.* **55**, 331 (1983).
- [9] K. G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773 (1975).
- [10] M. Caffarel e W. Krauth, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1545 (1994).
- [11] X. Y. Zhang, M. J. Rozenberg e G. Kotliar *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1666 (1993).
- [12] J. E. Hirsch e R. M. Fye, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2521 (1986).
- [13] E. Gull, A. J. Millis, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, M. Troyer e P. Werner, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 349 (2011).

- [14] H. R. Krishnamurthy, J. W. Wilkins e K. G. Wilson, *Phys. Rev. B* **21**, 1003 (1980).
- [15] L. D. Landau, *Sov. Phys - JETP* **3**, 920 (1957).
- [16] P. Nozières, *J. Low. Temp. Phys.* **17**, 31 (1974).
- [17] D. Zanchi e H. J. Schulz, *Phys. Rev. B* **61**, 13609 (2000).
- [18] C. J. Halboth e W. Metzner, *Phys. Rev. B* **61**, 7364 (2000).
- [19] C. Honerkamp, M. Salmhofer, N. Furukawa e T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **63**, 35109 (2001).
- [20] A. Ferraz, *Phys. Rev. B* **68**, 075115 (2003).
- [21] H. Freire, E. Correa e A. Ferraz, *Phys. Rev. B* **71**, 165113 (2005).
- [22] H. Freire, E. Correa e A. Ferraz, *Phys. Rev. B* **78**, 125114 (2008).
- [23] P. Kopietz, L. Bartosch e F. Schütz, *Introduction to the Functional Renormalization Group* (Springer: Berlim, 2010).
- [24] W. Metzner, M. Salmhofer, C. Honerkamp, V. Meden, e K. Schönhammer, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 299 (2012).
- [25] C. Karrasch, R. Hedden, R. Peters, T. Pruschke, K. Schonhammer e V. Meden *J. Phys. Condens. Matter.* **20**, 345205 (2008).
- [26] A. Isidori, D. Roosen, L. Bartosch, W. Hofstetter e P. Kopietz *Phys. Rev. B* **81**, 235120 (2010).
- [27] L. Bartosch, H. Freire, J. J. R. Cardenas e P. Kopietz *J. Phys. Condens. Matter.* **21**, 305602 (2009).
- [28] P. Kopietz, L. Bartosch, L. Costa, A. Isidori e A. Ferraz *J. Phys. A: Math. Theory.* **43**, 385004 (2010).

- [29] H. Freire e E. Corrêa, *J. Low. Temp. Phys.* **166**, 192 (2012).
- [30] R. D. Mattuck, *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem* (Dover Publications, New York, 1992).
- [31] J. R. Schrieffer e P. A. Wolff, *Phys. Rev.* **149**, 491 (1966).
- [32] J. W. Negele e H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems* (Addison Wesley: Redwood City, 1988).
- [33] R. P. Feynman, e F. L. Vernon, *Ann. Phys.* **24**, 118 (1963).
- [34] P. Coleman, *Introduction to Many Body Physics* (Cambridge University Press, New York, 2012).
- [35] A. Altland e B. Simons, *Condensed Matter Field Theory* (Cambridge University Press, New York, 2010).
- [36] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics* (Plenum Press: New York, 1993).
- [37] Alexander F. Fetter e John Dirk Wallecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (Dover Publications, New York, 2003).
- [38] T. Matsubara, *Prog. Theoret. Phys. (Kyoto)* **14**, 351 (1955).
- [39] A. M. Tsvelick e P. B. Wiegmann, *Adv. Phys.* **32**, 453 (1983).
- [40] E. Stückelberg e A. Petermann, *Helv. Phys. Acta* **26**, 499 (1953).
- [41] M. Gell-Mann e F. Low, *Phys. Rev.* **95**, 1300 (1954).
- [42] C. G. Callan, *Phys. Rev. D* **2**, 1541 (1970).
- [43] K. Symanzik, *Comm. Math. Phys.* **18**, 227 (1970).
- [44] K. G. Wilson, *Phys. Rev. B* **4**, 3174 (1971).

- 
- [45] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling e B. P. Flannery *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing* (Cambridge University Press, New York, 2007).
- [46] V. L. Ginzburg e L. D. Landau, *Zh Ekaper. Teoret. Fiz.* **20**, 1064 (1950).
- [47] K. G. Wilson e M. E. Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 240 (1972).