FI 193 – Teoria Quântica de Sistemas de Muitos Corpos

2º Semestre de 2023

05/09/2023

Aula 10

Formação de momentos magnéticos localizados em metais

. HISTORICAMENTE, EXISTIA A SEGUINTE QUESTÃO:

SE VOCÊ CRESCESSE UM BOM METAL (Cu, Au, Ag) COM UMA PEQUENA CONCENTRAÇÃO DE UM OUTRO ELEMENTO (P.EX., OUTRO METAL DE TRANSIÇÃO, COMO, Fe, Co, Ni, Mn, V)

EM PRINCÍPIO, ESSES ELEMENTOS APRESENTAM, ENQUANTO ÁTOMOS OU ÍONS ISOLADOS, A CAMADA d INCOMPLETA ($d^1, d^2, d^3, \ldots$) E, PORTANTO, COM MOMENTO ANGULAR ($\underline{L}$ OU $\underline{S}$ OU $\underline{J}$) NÃO NULOS.

A PERGUNTA É: ESSES MOMENTOS LOCALIZADOS SOBREVIVEM NO METAL?

COMO DETECTAR NO LABORATÓRIO A PRESENÇA DE MOMENTOS MAGNÉTICOS LOCALIZADOS?

A SUSCEPTIBILIDADE MAGNÉTICA OBEDECE, EM ALTAS TEMPERATURAS, A LEI DE CURIE:

$$\chi(T) = \frac{N_i \, (g\mu_B)^2 \, J(J+1)}{3k_B T} \sim \frac{1}{T}$$

N_i = # DE IMPUREZAS

g = fator de Landé

J = MOMENTO ANGULAR TOTAL

μ_B = MAGNETON DE BOHR

$g^2 J(J+1) \equiv p^2$ = ASSINATURA DO ÍON

O modelo de impureza de Anderson

VÁRIAS SIMPLIFICAÇÕES.

i) PARA REPRESENTAR O METAL: UMA BANDA PARCIALMENTE PREENCHIDA DE ELÉTRONS COM SPIN 1/2:

$$H_0 = \sum_{\vec{k},\sigma} \epsilon_{\vec{k}} c^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k},\sigma}$$

NÃO IMPORTA MUITO A DISPERSÃO.

ii) PARA DESCREVER A IMPUREZA: UM NÍVEL ("d") NÃO DEGENERADO A NÃO SER PELO SPIN.

$$H_0' = \epsilon_d \sum_{\sigma} d^{\dagger}_{\sigma} d_{\sigma}$$ (ENERGIA DO ORBITAL)

$$H_2 = U\, n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \qquad n_{d\sigma} = d^{\dagger}_{\sigma} d_{\sigma}$$

↳ (REPULSÃO COULOMBIANA)

iii) HIBRIDIZAÇÃO ENTRE O NÍVEL LOCALIZADO E A BANDA:

$$H_1 = \sum_{\vec{k}\sigma} \left(V_{\vec{k}}\, c^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} d_\sigma + V_{k}^{*}\, d^{\dagger}_{\sigma} c_{\vec{k}\sigma} \right)$$

("HOPPING" ENTRE O ORBITAL $\underline{d}$ E A BANDA.

FREQUENTEMENTE: $V_k \to V \in \mathbb{R}$

$$H = H_0 + H_0' + H_1 + H_2$$

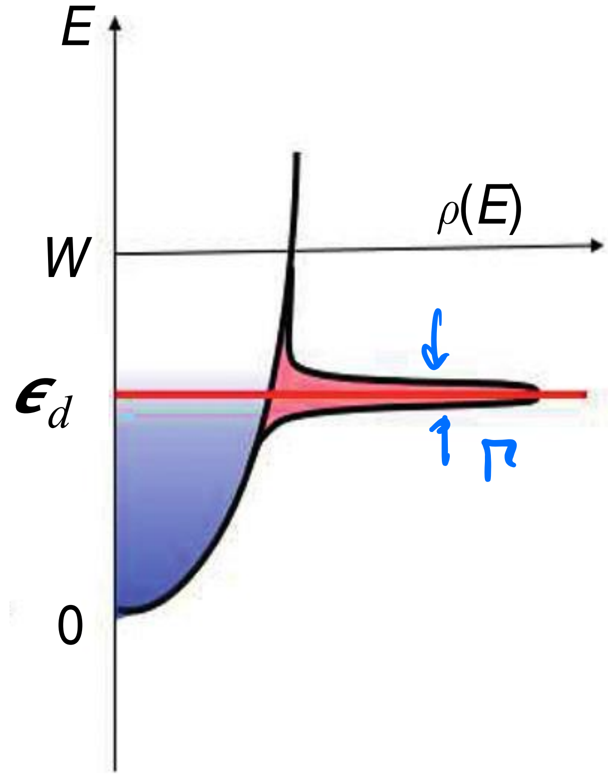
O caso não interagente: uma ressonância não magnética

LIMITE $U=0$: $H_0 + H_0' + H_1 = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}} c^\dagger_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}\sigma} + \epsilon_d \sum_\sigma n_{d\sigma} +$

$V \sum_{\vec{k}\sigma} (c^\dagger_{\vec{k}\sigma} d_\sigma + h.c.)$

MODELO QUADRÁTICO: SOLUÇÃO SIMPLES

(PROBLEMA DA LISTA)



$$\rho_d(\omega) = \sum_n |\langle n|d\rangle|^2 \delta(\omega - E_n)$$

$|n\rangle, E_n$: AUTO-ESTADO E AUTO-VALOR EXATOS

$$\rho_d(\omega) = \frac{\Gamma/\pi}{(\omega-\epsilon_d)^2+\Gamma^2} \; ; \; \Gamma = \pi \rho_c(\epsilon_d) V^2$$

$\rho_c(\epsilon_d)$ = DENSIDADE DE ESTADOS DA BANDA EM ϵ_d

$$|u\rangle = \alpha\,|d\rangle + \sum_{\vec{k}} \beta_{\vec{k}}\,|\vec{k}\rangle$$

O NÍVEL <u>d</u> GANHA UMA "LARGURA"/MÉIA-VIDA

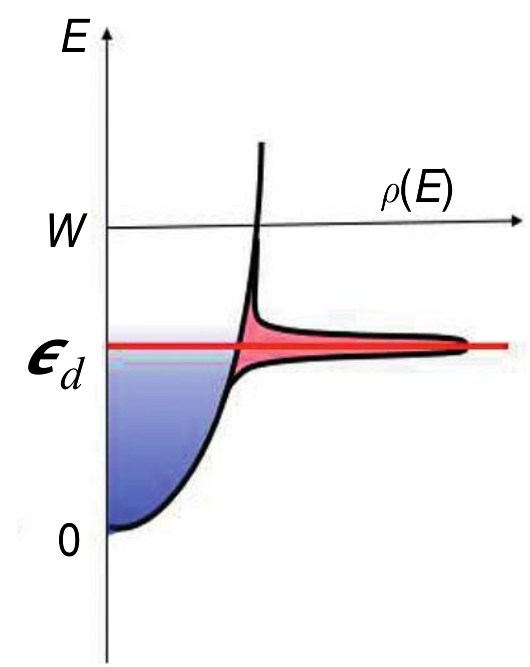
DADA POR Γ / $1/\Gamma$.

Formação de momentos magnéticos localizados em metais

Modelo de impureza única de Anderson

$$\boxed{H_{SIAM} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon(\mathbf{k})\, c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_d d^{\dagger}_{\sigma} d_{\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(V_{\mathbf{k}}\, c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} d_{\sigma} + \mathrm{h.c.} \right) + U \sum_{\sigma} d^{\dagger}_{\uparrow} d_{\uparrow} d^{\dagger}_{\downarrow} d_{\downarrow}}$$

a) Limite não interagente ($U=0$):
Uma ressonância em ε_d com largura $\Gamma = \pi \rho_c(\varepsilon_d)|V_{\mathbf{k}}|^2$
Não há momento magnético



LIMITE ATÔMICO: $V_k = 0$, BANDA E NÍVEL d SE DESACOPLAM:

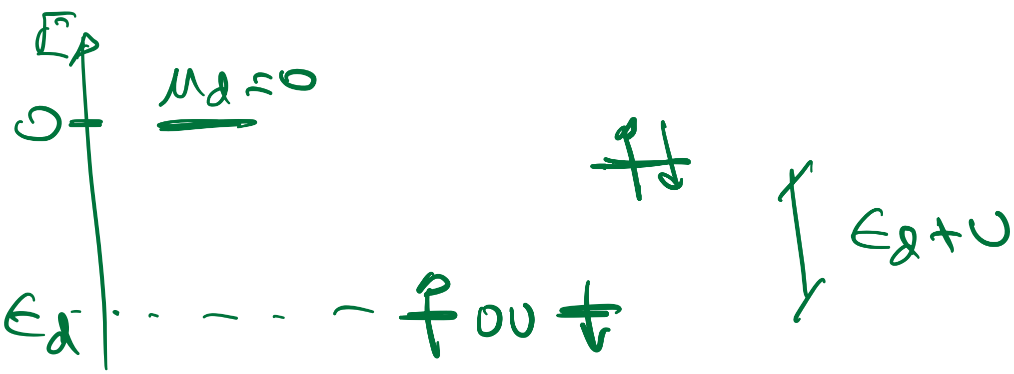
$$H_0' + H_2 = \epsilon_d \sum_\sigma \hat{n}_{d\sigma} + U \hat{n}_{d\uparrow} \hat{n}_{d\downarrow}$$

$n_d = 0$: $E_0 = 0$

$n_d = 1$ ($\uparrow$ OU $\downarrow$): $E_1 = \epsilon_d$ (DEGENERADO; $g = 2$)

$n_d = 2$: $E_2 = 2\epsilon_d + U$

CASO FAVORÁVEL: $\epsilon_d < 0$ E $\epsilon_d + U > 0$



$\rightarrow$ NO ESTADO FUNDAMENTAL NO ENSEMBLE GRAND-CANÔNICO:

$n_d = 1$ ($\uparrow$ OU $\downarrow$)

$\Rightarrow$ MOMENTO LOCALIZADO.

$\epsilon_d < 0 \quad (1)$

$\epsilon_d + U > 0 \quad (2)$

REDEFINO:

$$\tilde{\epsilon}_d = \epsilon_d + \frac{U}{2}$$

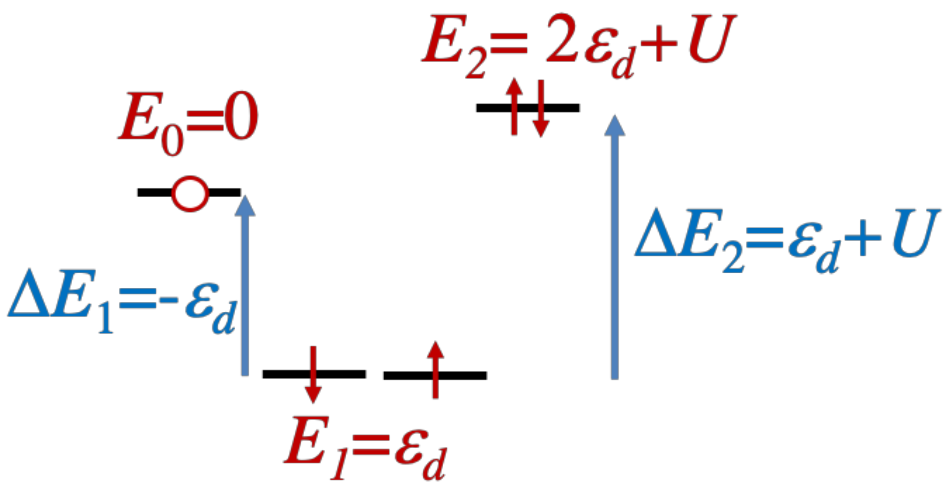
$$\Rightarrow (1) \quad \tilde{\epsilon}_d - \frac{U}{2} < 0 \Rightarrow \boxed{\tilde{\epsilon}_d < \frac{U}{2}}$$

$$\Rightarrow (2) \quad \tilde{\epsilon}_d - \frac{U}{2} + U = \tilde{\epsilon}_d + \frac{U}{2} > 0$$

$$\Rightarrow \boxed{\tilde{\epsilon}_d > -\frac{U}{2}}$$

Formação de momentos magnéticos localizados em metais

b) Limite atômico ($V_{\mathbf{k}}=0$): impureza desacoplada da banda.



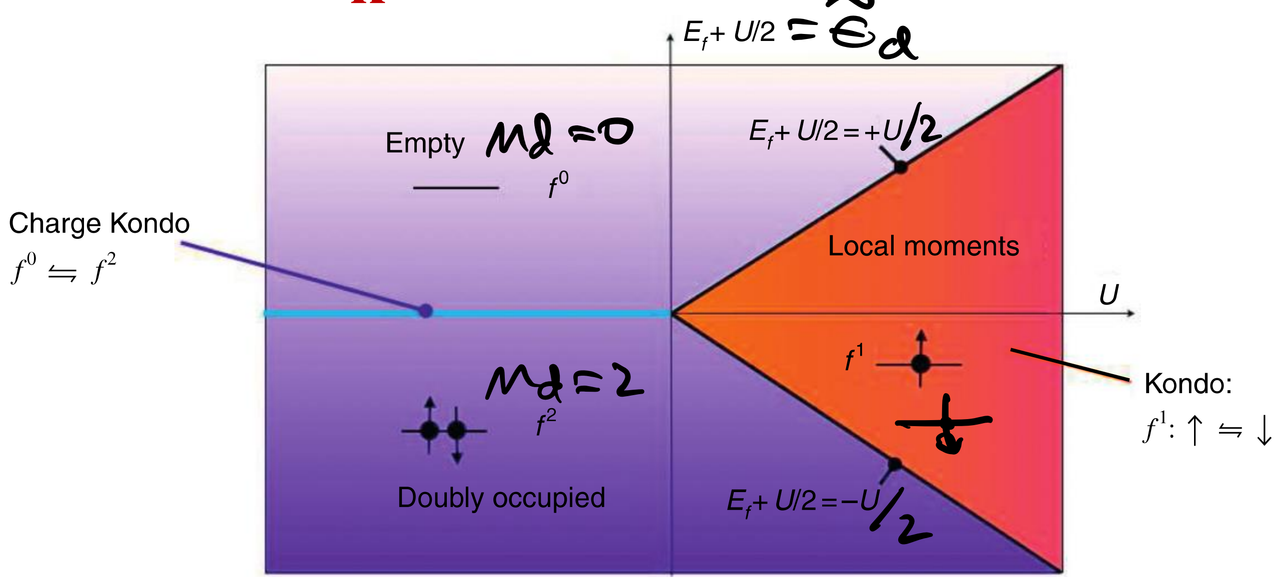
Condição para formação de momento magnético

$$\tilde{\epsilon}_d = \epsilon_d + \frac{U}{2}$$

$$\boxed{\begin{array}{l} \Delta E_1 \;>\; 0 \Rightarrow \epsilon_d < 0 \Rightarrow \tilde{\epsilon}_d < \dfrac{U}{2} \\ \Delta E_2 \;>\; 0 \Rightarrow \epsilon_d > -U \Rightarrow \tilde{\epsilon}_d > -\dfrac{U}{2} \end{array}}$$

Formação de momentos magnéticos localizados em metais

b) Limite atômico ($V_{\mathbf{k}}=0$): impureza desacoplada da banda.



Condição para formação de momento magnético

$$\tilde{\epsilon}_d = \epsilon_d + \frac{U}{2}$$

$$\boxed{\begin{aligned} \Delta E_1 &> 0 \Rightarrow \epsilon_d < 0 \Rightarrow \tilde{\epsilon}_d < \frac{U}{2} \\ \Delta E_2 &> 0 \Rightarrow \epsilon_d > -U \Rightarrow \tilde{\epsilon}_d > -\frac{U}{2} \end{aligned}}$$

A teoria de campo médio

(P. W. Anderson, Phys. Rev. **124**, 41 (1961))

$$H_2 = U\, \hat{n}_{d\uparrow} \hat{n}_{d\downarrow}$$

$\hat{n}_{d\sigma} = \langle \hat{n}_{d\sigma} \rangle + \hat{\delta}_\sigma$ = VALOR MÉDIO + FLUTUAÇÕES

DESPREZO

$$\hat{n}_{d\uparrow}\hat{n}_{d\downarrow} = \left(\langle \hat{n}_{d\uparrow} \rangle + \hat{\delta}_\uparrow\right)\left(\langle n_{d\downarrow} \rangle + \hat{\delta}_\downarrow\right)$$

$$= \langle \hat{n}_{d\uparrow} \rangle \langle \hat{n}_{d\downarrow} \rangle + \langle \hat{n}_{d\uparrow} \rangle \hat{\delta}_\downarrow + \langle \hat{n}_{d\downarrow} \rangle \hat{\delta}_\uparrow + \hat{\delta}_\uparrow \hat{\delta}_\downarrow$$

$$\simeq \langle \hat{n}_{d\uparrow} \rangle \langle \hat{n}_{d\downarrow} \rangle + \langle \hat{n}_{d\uparrow} \rangle \left(\hat{n}_{d\downarrow} - \langle \hat{n}_{d\downarrow} \rangle\right) +$$

$$+ \langle \hat{n}_{d\downarrow} \rangle \left(\hat{n}_{d\uparrow} - \langle \hat{n}_{d\uparrow} \rangle\right)$$

$$= \langle \hat{n}_{d\downarrow} \rangle \hat{n}_{d\uparrow} + \langle \hat{n}_{d\uparrow} \rangle \hat{n}_{d\downarrow} - \langle \hat{n}_{d\uparrow} \rangle \langle \hat{n}_{d\downarrow} \rangle$$

$$= \sum_\sigma \langle \hat{n}_{d,-\sigma} \rangle \hat{n}_{d\sigma} - \langle \hat{n}_{d\uparrow} \rangle \langle \hat{n}_{d\downarrow} \rangle$$

$$H_{MF} = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}} c^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}\sigma} + V \sum_{\vec{k},\sigma} \left(c^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} d_{\sigma} + h.c. \right)$$

$$+ \sum_{\sigma} \underbrace{\left(\epsilon_d + U \langle \hat{n}_{d-\sigma} \rangle \right)}_{\bar{\epsilon}_{d\sigma}} \hat{n}_{d\sigma} + \underbrace{U \langle n_{d\uparrow} \rangle \langle n_{d\downarrow} \rangle}_{\text{CONST.}}$$

O MODELO AGORA É FORMALMENTE IDÊNTICO AO CASO $U=0$, JÁ DISCUTIDO, MAS O NÍVEL $\underline{d}$ AGORA TEM ENERGIA $\bar{\epsilon}_{d\sigma} = \epsilon_d + U \langle n_{d-\sigma} \rangle$, QUE, EM PRINCÍPIO, DEPENDE DE σ.

A TEORIA DE CAMPO MÉDIO REQUER AUTO-CONSISTÊNCIA: POR EXEMPLO, EM $T=0$

$$\langle \hat{n}_{d\sigma} \rangle = \langle \Phi_0(\langle \hat{n}_{d\sigma} \rangle) | \hat{n}_{d\sigma} | \Phi_0(\langle \hat{n}_{d\sigma} \rangle) \rangle \qquad (3)$$

ONDE O ESTADO FUNDAMENTAL:

$$|\Psi_0(\langle \hat{n}_{d\sigma}\rangle)\rangle$$

É SOLUÇÃO DE:

$$H[\langle \hat{n}_{d\sigma}\rangle]\,|\Psi_0(\langle \hat{n}_{d\sigma}\rangle)\rangle = E_0[\langle n_{d\sigma}\rangle]\,|\Psi_0(\langle \hat{n}_{d\sigma}\rangle)\rangle$$

A EQ. (3) SÓ TERÁ SOLUÇÃO PARA DETERMINADOS VALORES DE $\langle \hat{n}_{d\uparrow}\rangle$ E $\langle \hat{n}_{d\downarrow}\rangle$

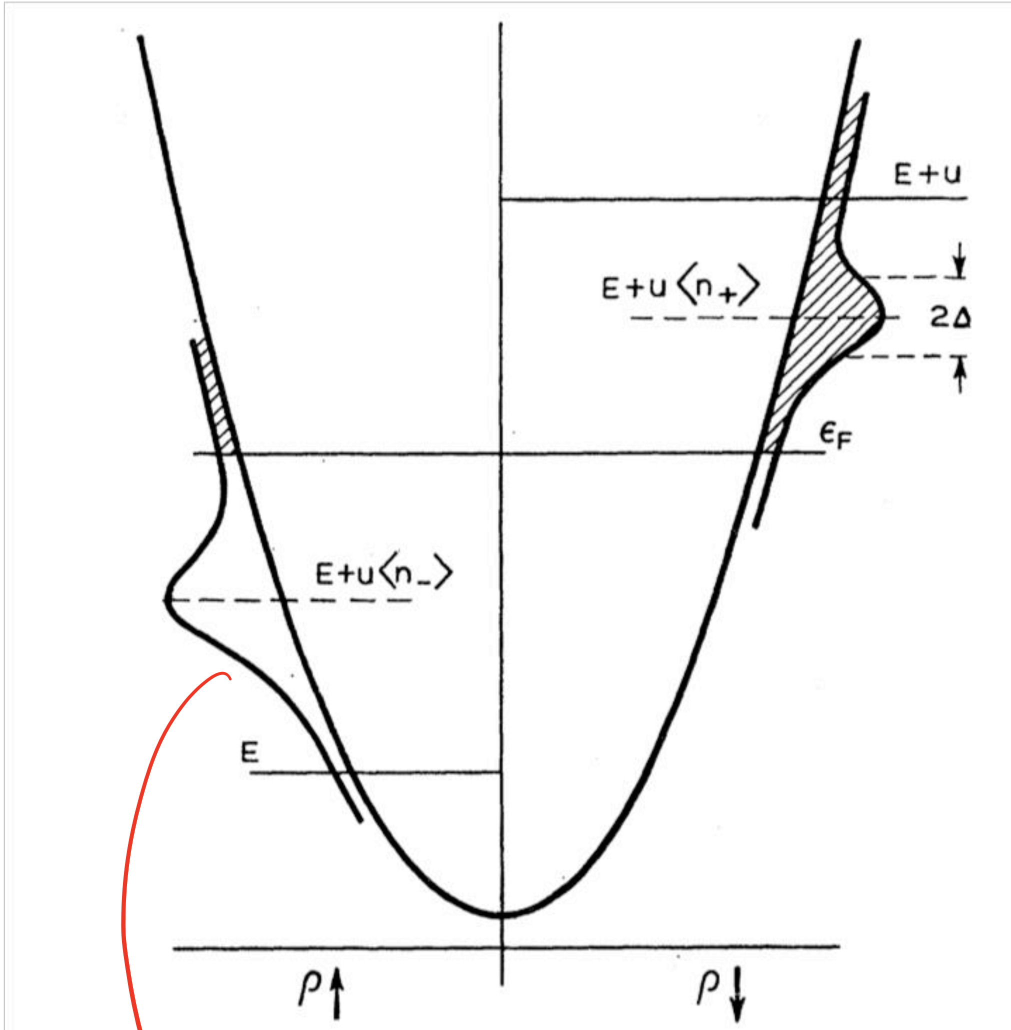
PARA $T>0$, USA-SE A MÉDIA TÉRMICA.

$E \equiv \epsilon_d$

O CASO AO LADO CORRESPONDE A

$\langle n_{d\uparrow} \rangle \sim 1$

$\langle n_{d\downarrow} \rangle \sim 0$



$\langle n_{d\uparrow} \rangle \simeq 1$

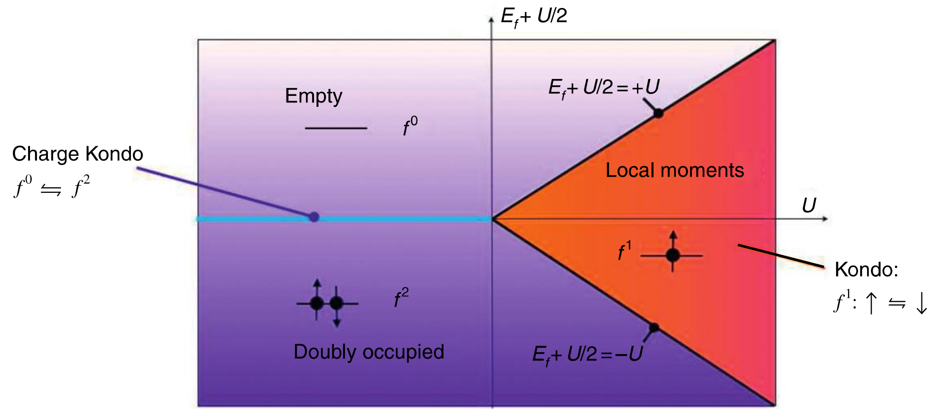
NA MESMA REGIÃO, HÁ UMA OUTRA SOLUÇÃO, DE <u>MESMA ENERGIA</u>, COM:

$\langle n_{d\uparrow} \rangle \sim 0$

$\langle n_{d\downarrow} \rangle \sim 1$

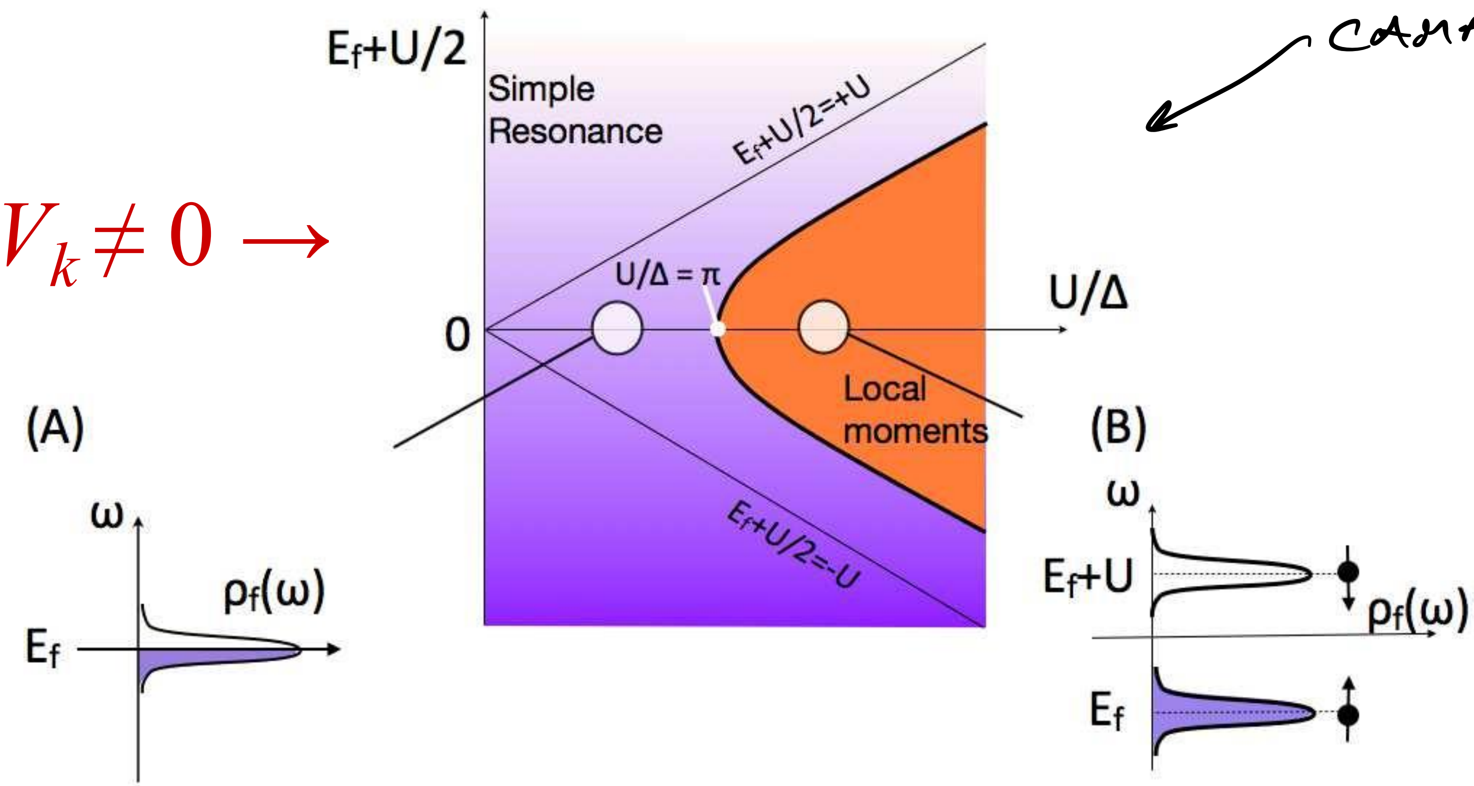
Diagrama de fases de campo médio para o Modelo de Impureza de Anderson

Caso $V_k = 0 \longrightarrow$



CAMPO MÉDIO

Caso $V_k \neq 0 \longrightarrow$



Transição de fase em dimensão 1 ?!

AS DUAS SOLUÇÕES REPRESENTAM UMA QUEBRA ESPONTÂNEA DE SIMETRIA (EM $T=0$ OU $T>0$).

O MODELO PODE SER REESCRITO COMO UM MODELO 1D. E NÃO É POSSÍVEL TER QES EM 1D COM INTERAÇÕES DE CURTO ALCANCE.

EM 2ª ORDEM EM TEORIA DE PERTURBAÇÃO O SPIN LOCALIZADO PODE FLIPAR. ESSES PROCESSOS, EM BAIXAS TEMPERATURAS, VÃO RESTAURAR A ORDEM QUEBRADA.