

FI 193 – Teoria Quântica de Sistemas de Muitos Corpos

2º Semestre de 2023

12/09/2023

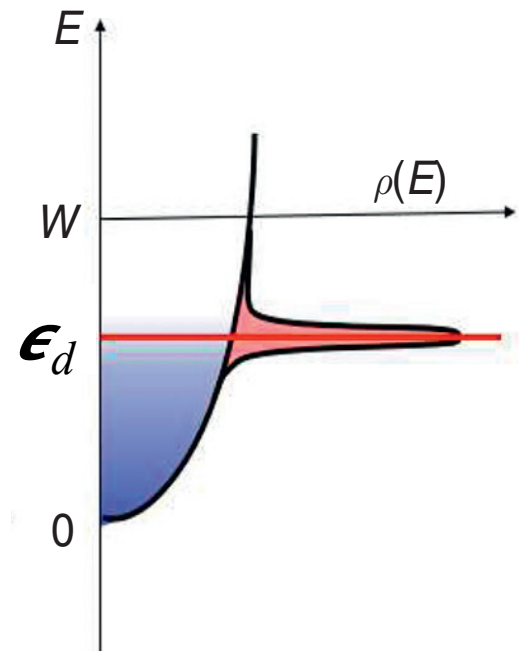
Aula 11

Formação de momentos magnéticos localizados em metais

Modelo de impureza única de Anderson

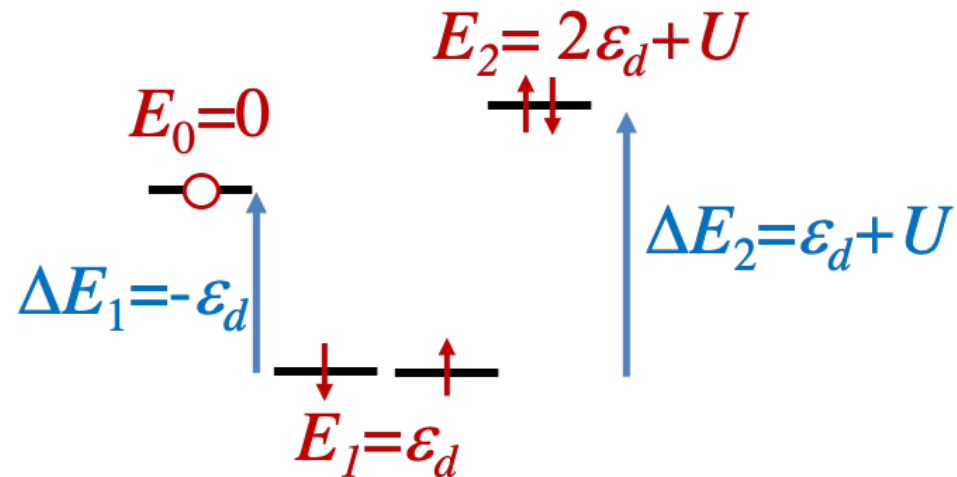
$$H_{SIAM} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_d d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(V_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{\sigma} + \text{h.c.} \right) + U \sum_{\sigma} d_{\uparrow}^\dagger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

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



Formação de momentos magnéticos localizados em metais

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



Condição para formação de momento magnético

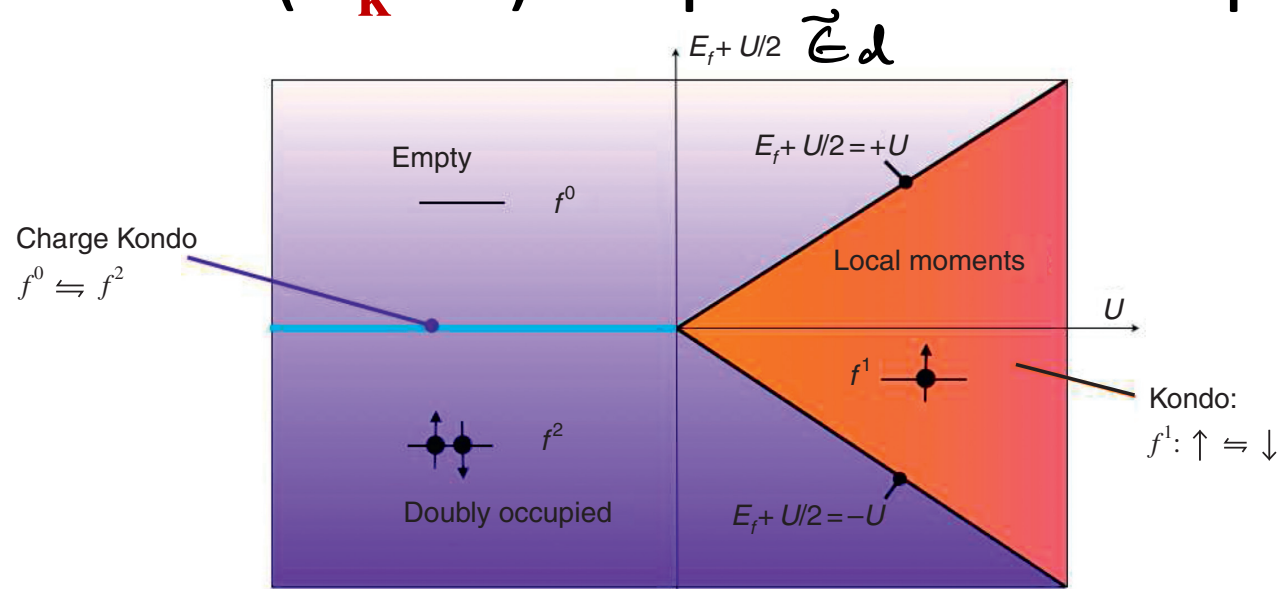
$$\tilde{\epsilon}_d = \epsilon_d + \frac{U}{2}$$

$$\Delta E_1 > 0 \Rightarrow \epsilon_d < 0 \Rightarrow \tilde{\epsilon}_d < \frac{U}{2}$$

$$\Delta E_2 > 0 \Rightarrow \epsilon_d > -U \Rightarrow \tilde{\epsilon}_d > -\frac{U}{2}$$

Formação de momentos magnéticos localizados em metais

b) Limite atômico ($V_k=0$): impureza desacoplada da banda.



Condição para formação de momento magnético

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

$$\Delta E_1 > 0 \Rightarrow \epsilon_d < 0 \Rightarrow \tilde{\epsilon}_d < \frac{U}{2}$$

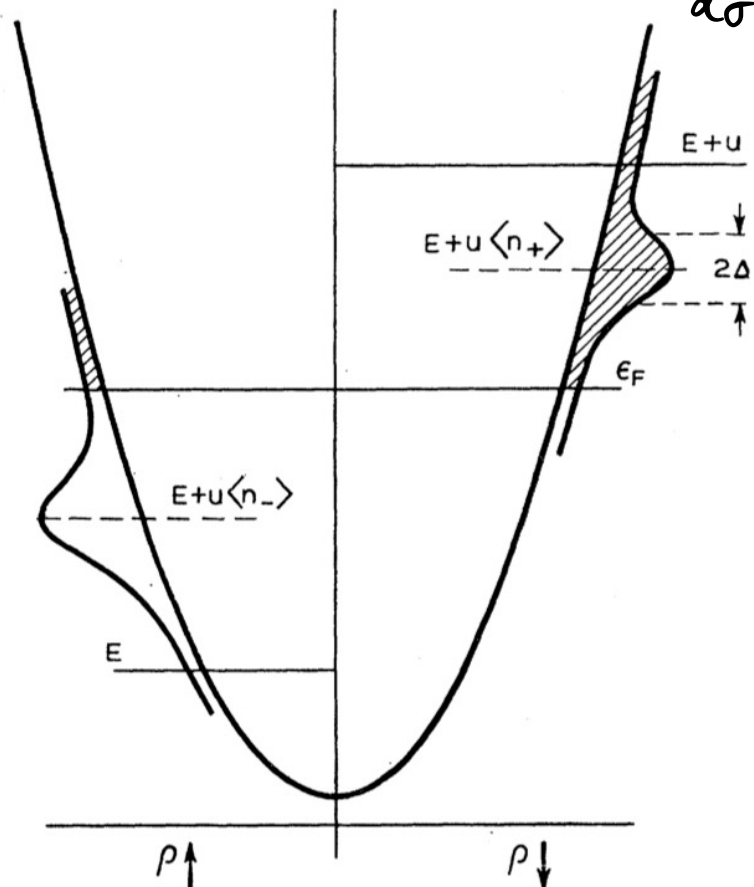
$$\Delta E_2 > 0 \Rightarrow \epsilon_d > -U \Rightarrow \tilde{\epsilon}_d > -\frac{U}{2}$$

A teoria de campo médio

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

$$U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} \rightarrow U (\langle n_{d\uparrow} \rangle n_{d\downarrow} + \langle n_{d\downarrow} \rangle n_{d\uparrow} - \langle n_{d\uparrow} \rangle \langle n_{d\downarrow} \rangle) = U \sum_{\sigma} \langle n_{d-\sigma} \rangle n_{d\sigma} - U \langle n_{d\uparrow} \rangle \langle n_{d\downarrow} \rangle$$

$$H_{MF} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\sigma} (\underbrace{\epsilon_d + U \langle n_{d-\sigma} \rangle}_{\epsilon_{d\sigma}}) n_{d\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} (V_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \text{h.c.}) - U \langle n_{d\uparrow} \rangle \langle n_{d\downarrow} \rangle$$



Há uma **região de parâmetros** em que há duas soluções (de mesma energia) com **momentos magnéticos estáveis**:

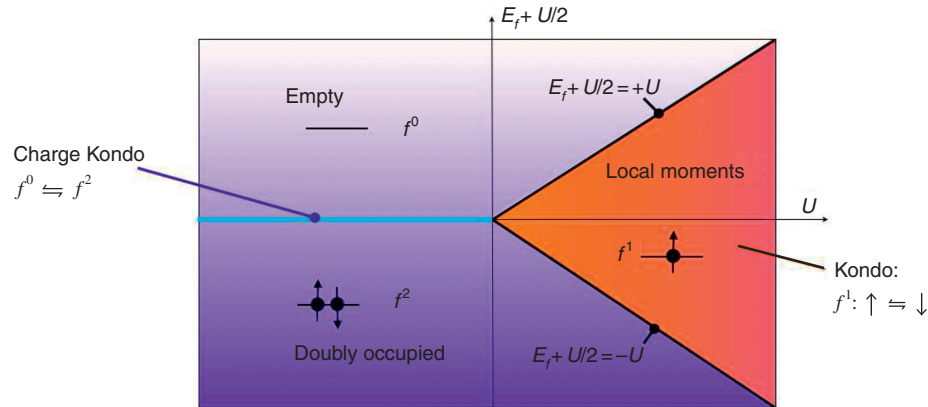
$$\langle n_{d\uparrow} \rangle \approx 1, \langle n_{d\downarrow} \rangle \approx 0$$

ou

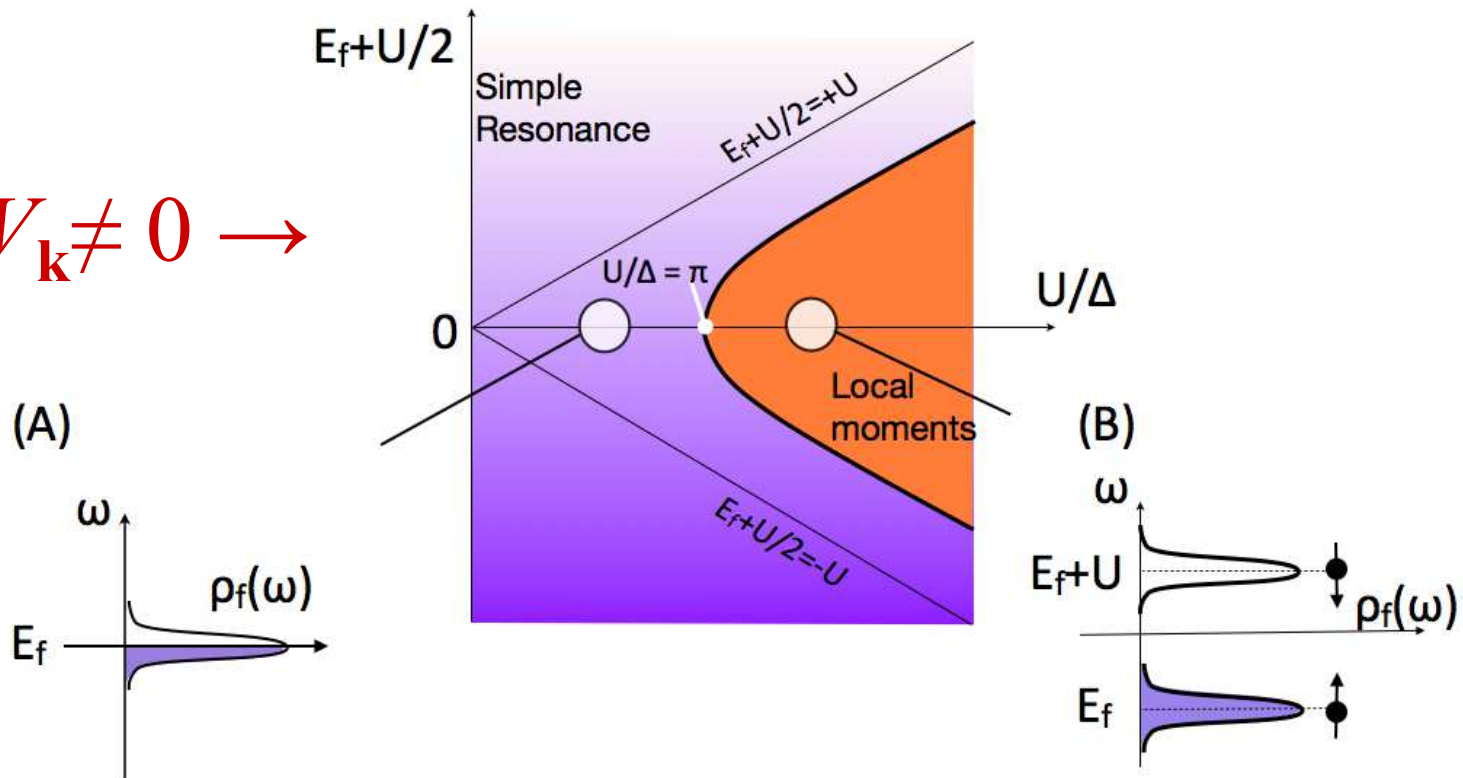
$$\langle n_{d\uparrow} \rangle \approx 0, \langle n_{d\downarrow} \rangle \approx 1$$

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

Caso $V_{\mathbf{k}} = 0 \rightarrow$



Caso $V_{\mathbf{k}} \neq 0 \rightarrow$



Transição de fase em dimensão 1 ?!

- As soluções de Anderson representam uma **quebra espontânea de simetria** em um modelo efetivamente 1D, o que é **proibido** por teoremas gerais.
- **Flutuações** além do campo médio deve **restaurar** a simetria quebrada.
- Essas flutuações representam transições de uma solução para a outra:



Transformação de Schrieffer-Wolff

(J. R. Schrieffer and P. A. Wolff, Phys. Rev. **149**, 491 (1966))

$$H = H_0 + H_V$$

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \epsilon_d \sum_{\mathbf{k}\sigma} d_\sigma^\dagger d_\sigma + U d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow$$

$$H_V = \sum_{\mathbf{k}\sigma} V_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_\sigma + \text{h.c.}$$

Supomos que estamos na região de momento localizado estável.

$$\langle n_d \rangle = \sum_{\sigma} \langle n_{d\sigma} \rangle = 1$$

$$U = e^S; U^\dagger = U^{-1} = e^{-S}; S^\dagger = -S$$

$$\tilde{H} = e^S H e^{-S} = H + [S, H] + \frac{1}{2} [S, [S, H]] + \dots$$

$$\tilde{H} = H_0 + \underbrace{H_V + [S, H_0]}_{=0} + [S, H_V] + \frac{1}{2} [S, [S, H_0]] + \frac{1}{2} [S, [S, H_V]] + \dots$$

$$H_V + [S, H_0] = 0 \Rightarrow S \propto V_{\mathbf{k}} \Rightarrow \tilde{H} = H_0 + [S, H_V] + \frac{1}{2} [S, [S, H_0]] + \mathcal{O}(V_{\mathbf{k}}^3) = H_0 + \frac{1}{2} [S, H_V] + \mathcal{O}(V_{\mathbf{k}}^3)$$

$$S = \sum_{\mathbf{k}\sigma} V_{\mathbf{k}} \left(\frac{1 - n_{d-\sigma}}{\epsilon_d - \epsilon(\mathbf{k})} + \frac{n_{d-\sigma}}{\epsilon_d + U - \epsilon(\mathbf{k})} \right) \left(d_{\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} - c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} \right)$$

$$[S, H_V] = \underbrace{\sum_{\mathbf{k}\sigma} (W_{\mathbf{k}\mathbf{k}} + J_{\mathbf{k}\mathbf{k}} n_{d-\sigma})}_{\text{CONST.}} n_{d\sigma} - \sum_{\mathbf{k}\rho\sigma} \underbrace{\left(W_{\mathbf{k}\rho} + J_{\mathbf{k}\rho} \frac{n_d}{2} \right)}_{(W+J/2)} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\rho\sigma}$$

$$+ 2 \sum_{\mathbf{k}\rho} J_{\mathbf{k}\rho} \mathbf{S}_{\mathbf{k}\rho} \cdot \mathbf{S}_d + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\rho\sigma} J_{\mathbf{k}\rho} \left(c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\rho-\sigma}^{\dagger} d_{-\sigma} d_{\sigma} + \text{h.c.} \right)$$

$$W_{\mathbf{k}\rho} = V_{\mathbf{k}} V_{\rho} \left(\frac{1}{\epsilon_d - \epsilon(\mathbf{k})} + \frac{1}{\epsilon_d - \epsilon(\rho)} \right)$$

TIRA DO SUB-ESPAÇO
 $\langle n_d \rangle = 1$

$$J_{\mathbf{k}\rho} = V_{\mathbf{k}} V_{\rho} \left(\frac{1}{\epsilon_d + U - \epsilon(\mathbf{k})} + \frac{1}{\epsilon_d + U - \epsilon(\rho)} - \frac{1}{\epsilon_d - \epsilon(\mathbf{k})} - \frac{1}{\epsilon_d - \epsilon(\rho)} \right)$$

$$\mathbf{S}_d = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} d_{\alpha}^{\dagger} \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} d_{\beta} \rightarrow S = 1/2 \text{ SE } n_d = 1$$

$$\mathbf{S}_{\mathbf{k}\rho} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} c_{\mathbf{k}\alpha}^{\dagger} \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} c_{\rho\beta}$$

$$\langle n_d \rangle = \sum_{\sigma} \langle n_{d\sigma} \rangle = 1$$

O modelo de Kondo

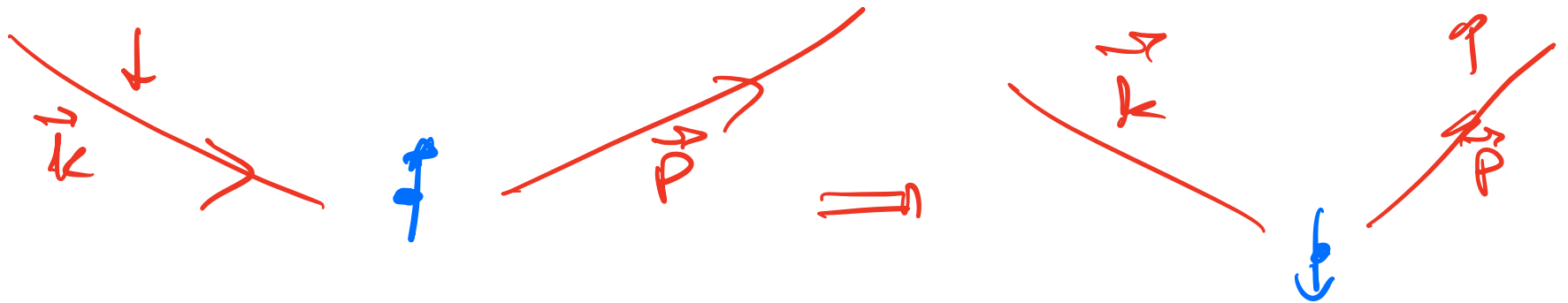
$$\tilde{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}p} J_{\mathbf{k}p} \mathbf{S}_{\mathbf{k}p} \cdot \mathbf{S}_d \quad \rightarrow \text{TEM SPIN FLIP}$$

$$\tilde{H} \approx \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{J}{2} \sum_{\mathbf{k}p} \mathbf{S}_{\mathbf{k}p} \cdot \mathbf{S}_d$$

MODELO KONDO
(S-d MODEL)

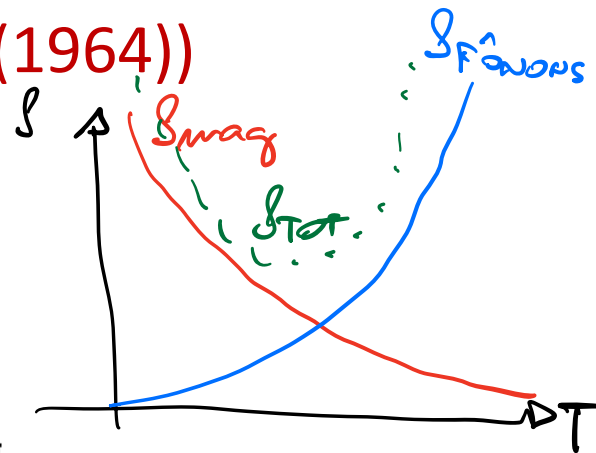
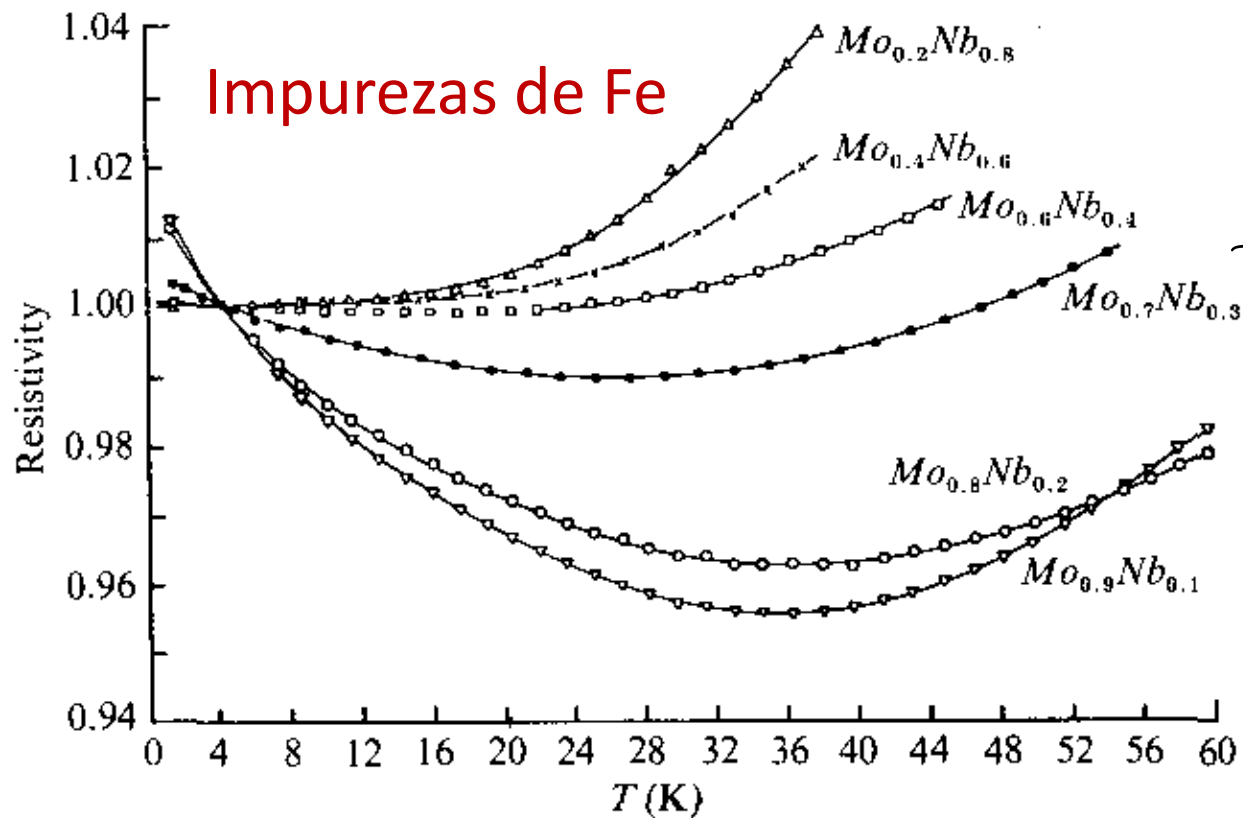
$$J \equiv J_{\mathbf{k}_F \mathbf{p}_F} = 2 \underbrace{V_{\mathbf{k}_F} V_{\mathbf{p}_F}}_{V^2} \left(\frac{1}{\epsilon_d + U} - \frac{1}{\epsilon_d} \right) = 2V_{\mathbf{k}_F}^2 \frac{-U}{\epsilon_d (\epsilon_d + U)} > 0.$$

$$\mathbf{S}_{\mathbf{k}p} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} c_{p\beta}$$



Mínimo na resistividade devido a impurezas magnéticas

(J. Kondo, Prog. Theoret. Phys. **32**, 37 (1964))



$$R(T) = aT^5 + c_{imp}R_0 - c_{imp}R_1 \ln(k_B T/D) \quad T_{min} = \left(\frac{R_1}{5a}\right)^{1/5} c_{imp}^{1/5}$$

Resistividade: espalhamento Kondo

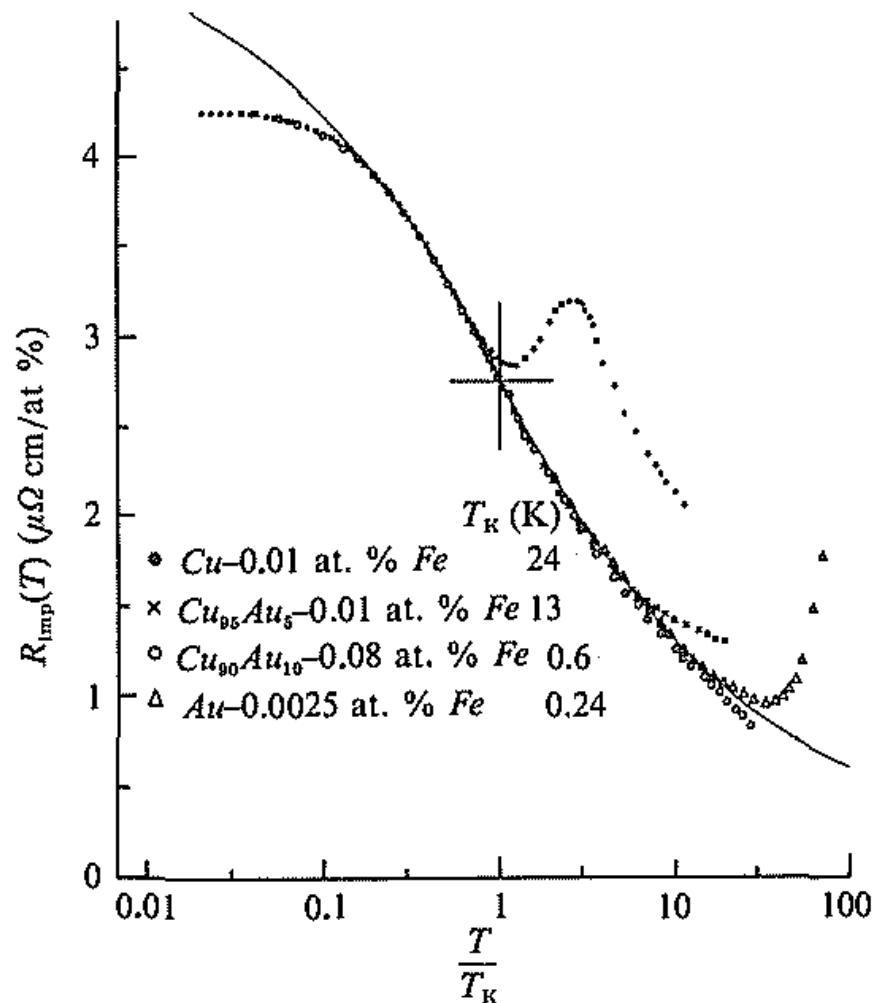


Figure 9.24 Temperature dependence of the impurity resistivity of Fe in $\text{Cu}_x\text{Au}_{1-x}$ alloys normalized to a Kondo temperature T_K . The full line is a fit to the Hamann result (3.12) with $S = 0.77$ (Loram, Whall & Ford, 1970).

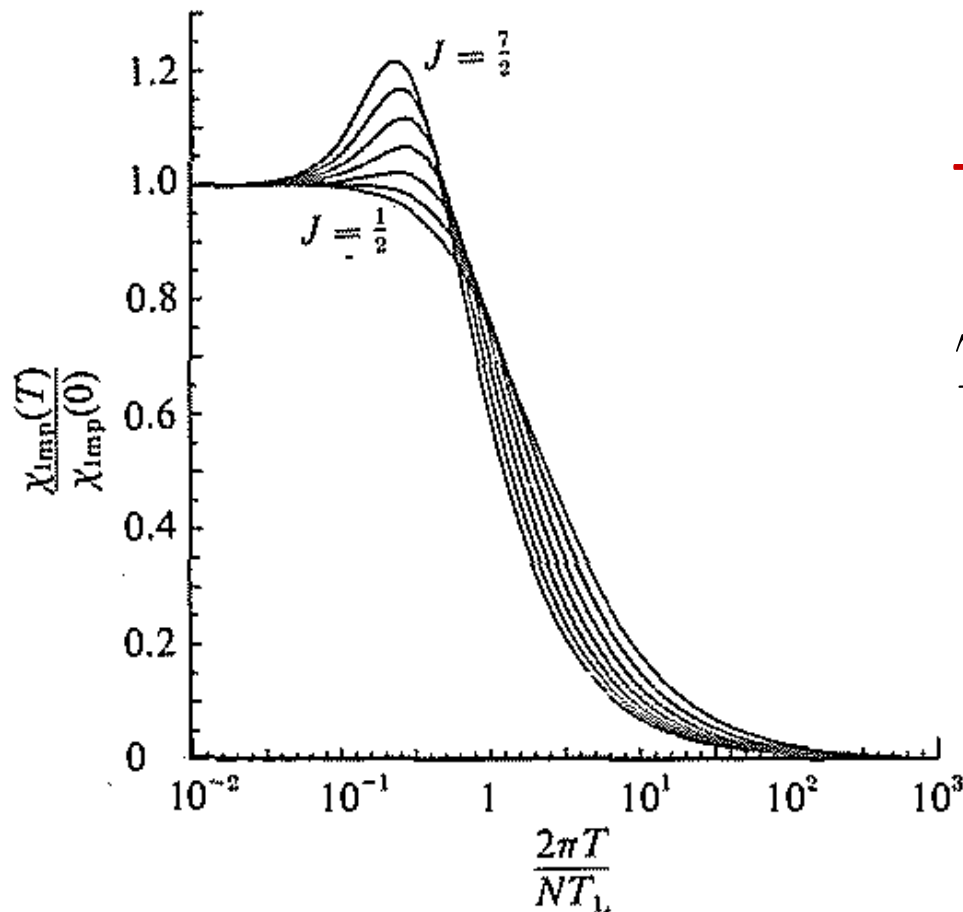
Temperatura Kondo

$$T_K \approx D \exp\left(-\frac{1}{\rho_F J}\right)$$

$D = \text{SEMI-LARGURA DA BANDA DE CONDUÇÃO}$

$\rho_F = \text{DENS. DE ESTADOS DA BANDA DE CONDUÇÃO NO NÍVEL DE FERMI}$

Susceptibilidade magnética: “blindagem” do spin



Temperatura Kondo

$$T_K \approx D \exp\left(-\frac{1}{\rho_F J}\right)$$

Figure 7.12 Plots of the exact results for $\chi_{imp}(T)$ versus $2\pi T/NT_L$ for $N = 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8$ (Rajan, 1983).

Susceptibilidade magnética

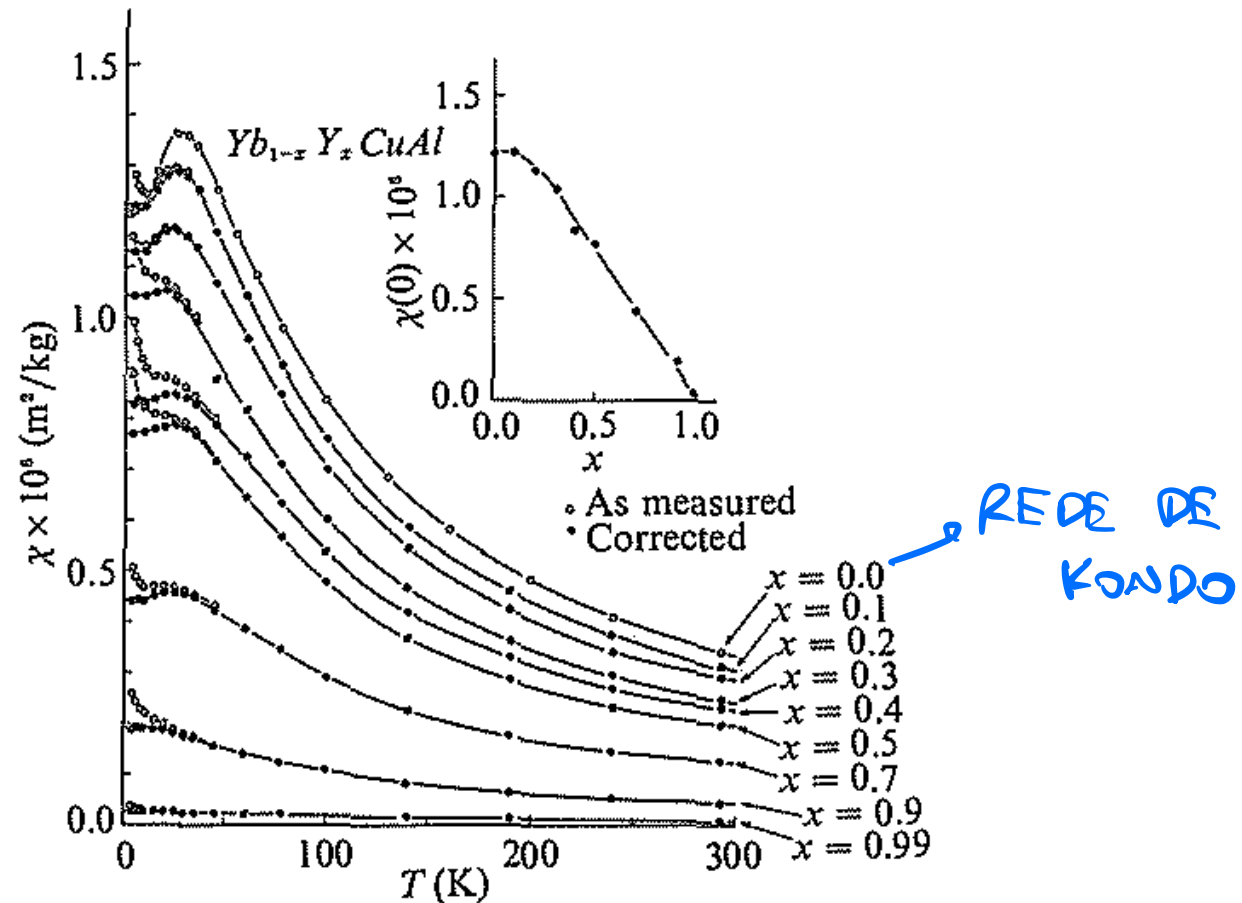
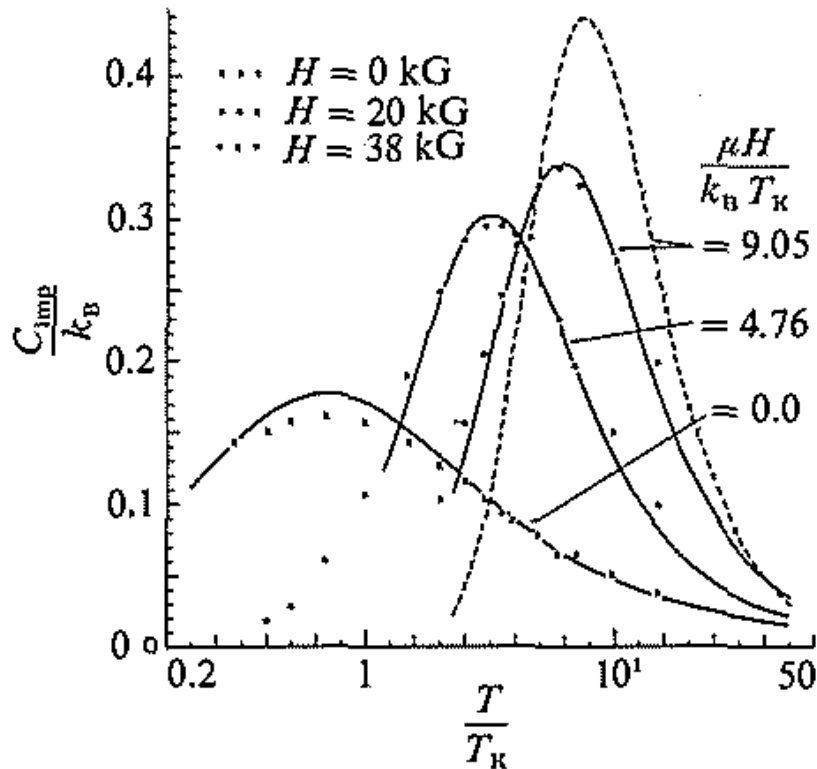


Figure 9.15 Experimental results for the susceptibility as a function of temperature for $\text{Yb}_{1-x}\text{Y}_x\text{CuAl}$ for various values of x . The inset shows the $T = 0$ susceptibility as a function of x (Mattens, 1980).

Calor específico



Temperatura Kondo

$$T_K \approx D \exp \left(-\frac{1}{\rho_F J} \right)$$

Figure 9.12 The specific heat as a function of temperature for various applied magnetic fields for the $S = 1/2$ s-d model fitted to experimental data (Bader et al, 1975) for Ce impurities in $LaAl_2$ (Rajan, Lowenstein & Andrei, 1982).

Funções de Green

• $\Psi(\tilde{\pi}_1, \dots, \tilde{\pi}_N)$: TEM INFORMAÇÃO DE MAIS SE $N \approx 10^{22}$
• INTRODUIZ OBJETOS MATEMÁTICOS MAIS SIMPLES
QUE SÃO SUFICIENTES PARA RESPONDER PERGUNTAS
DE LABORATÓRIO.

PARA DEFINIR FUNÇÕES DE GREEN, EU PRECISO DE
OUTRAS DEFINIÇÕES PRÉVIAS:

Versões de Schrödinger e Heisenberg

VERSÃO DE SCHRÖDINGER:

- FUNÇÕES DE ONDA DEPENDEM DO TEMPO E OPERADORES FUNDAMENTAIS NÃO!

$$i \partial_t |\Psi_S(t)\rangle = H |\Psi_S(t)\rangle$$

OPERADORES: \hat{O}_S , como o próprio H , QUE NÃO DEPENDEM DO TEMPO: $X_i, p_i, \psi_k(\vec{x}), \psi_k^\dagger(\vec{x})$

VERSÃO DE HEISENBERG: ESTADOS NÃO DEPENDEM DO TEMPO, MAS OPERADORES SIM.

$$\hat{O}_H(t) = e^{iHt} \hat{O}_S e^{-iHt}$$

$$|\psi_H\rangle = e^{iHt} |\psi_S(t)\rangle$$

DEPENDÊNCIA TEMPORAL:

$$i\partial_t |\psi_H\rangle = i\partial_t [e^{iHt} |\psi_S(t)\rangle]$$

$$= -H e^{iHt} |\psi_S(t)\rangle + e^{iHt} [H |\psi_S(t)\rangle] = 0$$

$$\Rightarrow |\psi_H\rangle = \text{CONST.}$$

$$i\partial_t \hat{O}_H(t) = e^{iHt} [-H \hat{O}_S + \hat{O}_S H] e^{-iHt}$$

$$= -H \hat{O}_H(t) + \hat{O}_H(t) H = [\hat{O}_H(t), H]$$

EM PARTICULAR:

$$\psi_H(\vec{\lambda}, t) = e^{iHt} \psi_S(\vec{\lambda}) e^{-iHt}$$

$$\psi_H^\dagger(\vec{\lambda}, t) = e^{iHt} \psi_S^\dagger(\vec{\lambda}) e^{-iHt} = [\psi_H(\vec{\lambda}, t)]^\dagger$$

É POSSÍVEL FAZER O MESMO EM OUTRAS BASES:

$$c_{\vec{k}H}(t) = e^{iHt} c_{\vec{k}} e^{-iHt}, \quad c_{\vec{k}H}^\dagger(t) = e^{iHt} c_{\vec{k}}^\dagger e^{-iHt}$$

$$\text{NOTE-SE QUE: } [\psi_S(\vec{\lambda}), \psi_S^\dagger(\vec{\lambda}')]_{\mathcal{I}} = \delta^{(3)}(\vec{\lambda} - \vec{\lambda}') \quad (1)$$

$$\text{ONDE: } \begin{cases} \{A, B\}_+ = AB - BA & \mathcal{I} = +1, \text{ BÓSONS} \\ \{A, B\}_- = AB + BA = \{A, B\} & -1, \text{ FÉRMIONS} \end{cases}$$

"SANDUICHANDO" (2) COM $e^{iHt} c_{\vec{k}} > e^{-iHt}$:

$$[\psi_H(\vec{\lambda}, t), \psi_H^\dagger(\vec{\lambda}', t)]_{\mathcal{I}} = \delta^{(3)}(\vec{\lambda} - \vec{\lambda}')$$

PORÉM:

$$[\psi_H(\vec{\lambda}, t), \psi_H^\dagger(\vec{\lambda}', t')]_{\mathcal{I}} \neq \delta^{(3)}(\vec{\lambda} - \vec{\lambda}')$$

Operador ordenamento temporal

$$T [A_H(t) B_H(t')] = \begin{cases} A_H(t) B_H(t') & \text{SE } t > t' \\ (-1)^P B_H(t') A_H(t) & \text{SE } t' > t \end{cases}$$

ONDE, P , É O NÚMERO DE OPERADORES DE CRIAÇÃO
OU DESTRUIÇÃO **FERMIÔNICOS** QUE PRECISAM
SER TRANSPOSTOS NO PROCESSO DE ORDENAMENTO.

POR EXEMPLO:

$$\text{SE } A = \psi^\dagger(\vec{\lambda}_1) \psi^\dagger(\vec{\lambda}_2) \quad \text{E} \quad B = \psi(\vec{\lambda}_3) \psi(\vec{\lambda}_4)$$

$$\Rightarrow P = 2$$

$$\text{SE } A = \psi_H^\dagger(\vec{\lambda}_1, t_1) \quad \text{E} \quad B = \psi_H(\vec{\lambda}_2, t_2)$$

$$\Rightarrow P = 1$$

Função de Green de um corpo a $T=0$

ORDENADA TEMPORAL MENTE

$$i G(\bar{\alpha} t; \bar{\alpha}' t') = \frac{\langle \psi_{0H} | T [\psi_H(\bar{\alpha} t) \psi_H^\dagger(\bar{\alpha}' t')] | \psi_{0H} \rangle}{\langle \psi_{0H} | \psi_{0H} \rangle}$$

$|\psi_{0H}\rangle$: ESTADO FUNDAMENTAL

SE HOUVER SPIN:

$$i G_{\alpha\beta}(\bar{\alpha} t; \bar{\alpha}' t') = \frac{\langle \psi_{0H} | T [\psi_{\alpha H}(\bar{\alpha} t) \psi_{\beta H}^\dagger(\bar{\alpha}' t')] | \psi_{0H} \rangle}{\langle \psi_{0H} | \psi_{0H} \rangle}$$

SIMPLIFICAÇÕES: NA (QUASE) TOTALIDADE DOS CASOS,
 H NÃO DEPENDE DO TEMPO. NESSE CASO:

$$\Rightarrow G_{\alpha\beta}(\bar{\alpha} t; \bar{\alpha}' t') \equiv G_{\alpha\beta}(\bar{\alpha}, \bar{\alpha}'; t - t')$$

SE O SISTEMA TEM INVARIÂNCIA TRANSLACIONAL
(PODE SER DE REDE):

$$G_{\alpha\beta}(\vec{n}, \vec{n}', t-t') \equiv G_{\alpha\beta}(\vec{n}-\vec{n}'; t-t')$$

FINALMENTE, SE O SISTEMA NÃO TEM ORDENAMENTO
MAGNÉTICO E (OU CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO
(SIMÉTRICO POR REVERSAO TEMPORAL)):

$$G_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} G$$