NCA

Mateus Marques

2 de outubro de 2022

1 Slave Boson

Aqui $k = \mathbf{k}$ significa todos os números quânticos além do spin.

Lembremos

$$H = H_{\text{bath}} + H_{\text{hyb}} + H_{\text{imp}},$$

onde

$$H_{\text{bath}} = \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma} c^\dagger_{k\sigma} c_{k\sigma},$$

$$H_{\text{hyb}} = \sum_{k\sigma} \left(V_{k\sigma} c^\dagger_{k\sigma} f_\sigma + V^*_{k\sigma} f^\dagger_\sigma c_{k\sigma} \right),$$

$$H_{\text{imp}} = U n_\uparrow n_\downarrow + \sum_{k\sigma} \epsilon_0 f^\dagger_\sigma f_\sigma.$$

Primeiramente, observemos que o espaço de Hilbert em consideração é o produto tensorial $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{imp}} \otimes \mathcal{H}_{\text{conduction}}$, onde os estados de impureza são representados por $|\alpha\rangle$ e os estados de elétrons de condução por $|c\rangle$. Note então que H_{imp} é diagonalizado pelos estados $|\alpha\rangle = |0\rangle$, $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ e $|2\rangle$:

$$\begin{cases} H_{\text{imp}} \left|0\right\rangle = 0 \cdot \left|0\right\rangle, \\ H_{\text{imp}} \left|\uparrow\right\rangle = \epsilon_0 \left|\uparrow\right\rangle, \\ H_{\text{imp}} \left|\downarrow\right\rangle = \epsilon_0 \left|\downarrow\right\rangle, \\ H_{\text{imp}} \left|2\right\rangle = (2\epsilon_0 + U) \left|2\right\rangle. \end{cases}$$

Escrevemos então

$$H_{\text{imp}} = \sum_\alpha \epsilon_\alpha \left|\alpha\middle\rangle\middle\langle\alpha\right|.$$

Temos os elementos de matrizes (todos os outros são nulos)

$$\langle\uparrow|f^\dagger_\uparrow|0\rangle = 1, \quad \langle 2|f^\dagger_\uparrow|\downarrow\rangle = 1,$$

$$\langle\downarrow|f^\dagger_\downarrow|0\rangle = 1, \quad \boxed{\langle 2|f^\dagger_\downarrow|\uparrow\rangle = -1.} \; ?$$

Portanto, vale que

$$f_\uparrow^\dagger = |\uparrow\rangle\langle 0| + |2\rangle\langle\downarrow| = X_{\uparrow,0} + X_{2,\downarrow},$$

$$f_\downarrow^\dagger = |\downarrow\rangle\langle 0| - |2\rangle\langle\uparrow| = X_{\downarrow,0} - X_{2,\uparrow},$$

onde definimos os operadores de Hubbard $X_{p,q} = |p\rangle\langle q|$. Como os estados $|\alpha\rangle$ são ortonormais, temos a seguinte álgebra de Lie para os operadores de Hubbard:

$$[X_{p,q}, X_{q',p'}] = |p\rangle \langle q|q'\rangle \langle p'| - |q'\rangle \langle p'|p\rangle \langle q| = \delta_{q,q'} X_{p,p'} - \delta_{p,p'} X_{q',q}.$$

Agora utilizamos a seguinte representação para os operadores de Hubbard:

Informalmente:

$$\begin{cases} |0\rangle \to b, & \text{(bosônico)} \\ |\uparrow\rangle \to s_\uparrow, & \text{(fermiônico)} \\ |\downarrow\rangle \to s_\downarrow, & \text{(fermiônico)} \\ |2\rangle \to a. & \text{(bosônico)} \end{cases}$$

Formalmente:

$$\begin{cases} X_{0,0} = b^\dagger b, & X_{0,\uparrow} = b^\dagger s_\uparrow, & X_{0,\downarrow} = b^\dagger s_\downarrow, & X_{0,2} = b^\dagger a, \\ X_{\uparrow,\uparrow} = s_\uparrow^\dagger s_\uparrow, & X_{\uparrow,\downarrow} = s_\uparrow^\dagger s_\downarrow, & X_{\uparrow,0} = s_\uparrow^\dagger b, & X_{\uparrow,2} = s_\uparrow^\dagger a, \\ X_{\downarrow,\downarrow} = s_\downarrow^\dagger s_\downarrow, & X_{\downarrow,\uparrow} = s_\downarrow^\dagger s_\uparrow, & X_{\downarrow,0} = s_\downarrow^\dagger b, & X_{\downarrow,2} = s_\downarrow^\dagger a, \\ X_{2,2} = a^\dagger a, & X_{2,\uparrow} = a^\dagger s_\uparrow, & X_{2,\downarrow} = a^\dagger s_\downarrow, & X_{2,0} = a^\dagger b, \end{cases}$$

onde impomos os seguintes vínculos:

- $s_\uparrow$, $s_\downarrow$ são fermiônicos: $\{s_\uparrow^\dagger, s_\uparrow\} = \{s_\downarrow^\dagger, s_\downarrow\} = 1$ e $\{s_\uparrow, s_\downarrow\} = \{s_\uparrow^\dagger, s_\downarrow\} = \{s_\uparrow^\dagger, s_\downarrow^\dagger\} = 0$.
- a e b são bosônicos: $\{a, a^\dagger\} = 1$ e $\{b, b^\dagger\} = 1$.
- a, b e $s_{\uparrow\downarrow}$ representam partículas diferentes, então eles também comutam entre si: $[a, b] = [a, s_{\uparrow\downarrow}] = [b, s_{\uparrow\downarrow}] = 0$ (o mesmo para os dagger's).
- $Q \equiv a^\dagger a + b^\dagger b + s_\uparrow^\dagger s_\uparrow + s_\downarrow^\dagger s_\downarrow = 1$ (só existem essas 4 possibilidades).

A partir da representação acima para os operadores de Hubbard, utilizando as regras de comutação listadas é possível verificar que $X_{p,q}$ continua satisfazendo a mesma relação algébrica da álgebra de Lie. Esse é o fato que faz a representação pelos operadores acima ser válida.

Devido ao vínculo $Q = 1$ (Q é um projetor), adicionamos o fator $\lambda(Q-1)$ na hamiltoniana, onde enxergamos $\lambda = -\mu$ como um potencial químico negativo e faremos as contas no ensemble grande canônico (G). Para voltarmos ao ensemble canônico, temos o "truque de Abrikosov"

$$\langle A \rangle = \lim_{\lambda\to\infty} \frac{\langle AQ \rangle_G (\lambda)}{\langle Q \rangle_G (\lambda)}. \tag{1}$$

Note que o operador AQ é o operador A restrito ao subespaço das impurezas (onde $Q = 1$). Temos (ignorando extras de Baker-Campbell-Hausdorff)

$$\langle QA \rangle_G \overset{\lambda\to\infty}{\approx} \frac{1}{Z_C} \sum_{Q=1} \langle n|Ae^{-\beta H}|n\rangle + \sum_{Q=0} \langle n|\cancelto{0}{Q} A\rho_G|n\rangle \,,$$

e tomando $A = 1$

$$\langle Q \rangle_G \overset{\lambda\to\infty}{\approx} \frac{1}{Z_C} \sum_{Q=1} \langle n|e^{-\beta H}|n\rangle = \mathrm{tr}(\rho) = 1,$$

o que nos dá a equação 1.

Caso A seja um operador de impureza próprio, então $AQ = A$ e

$$\langle A \rangle = \lim_{\lambda\to\infty} \frac{\langle A \rangle_G (\lambda)}{\langle Q \rangle_G (\lambda)}. \tag{2}$$

2 NCA

Derivemos a expressão para o NCA nos baseando na seção 7.2 do Hewson (perturbação Keiter-Kimball).