EOM

Mateus Marques

22 de setembro de 2022

Tentarei justificar as aproximações EOM0 e EOM1 do paper "Quantitative comparison of Anderson impurity solvers applied to transport in quantum dots".

Primeiramente, alguns fatos básicos:

- Equação de movimento na notação de Zubarev:

$$\omega^+ \langle\langle A : B \rangle\rangle = \langle \{A, B\} \rangle + \langle\langle [A, H] : B \rangle\rangle .$$

- Básicos:

$$[a, bc] = [a, b]c + b[a, c] \quad \text{e} \quad [a, bc] = \{a, b\}c - b\{a, c\}.$$

$$[f_\sigma, n_\sigma] = \{f_\sigma, n_\sigma\} = f_\sigma \quad \text{e} \quad [f_\sigma^\dagger, n_\sigma] = -\{f_\sigma^\dagger, n_\sigma\} = -f_\sigma^\dagger.$$

O modelo SIAM (Single Impurity Anderson Model) em consideração é

$$H = H_{\text{imp}} + H_{\text{C}} + H_{\text{B}},$$

onde

$$H_{\text{imp}} = \sum_\sigma \epsilon_\sigma f_\sigma^\dagger f_\sigma + U n_\uparrow n_\downarrow,$$

$$H_{\text{B}} = \sum_{\alpha,\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\alpha\mathbf{k}\sigma} c_{\alpha\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\alpha\mathbf{k}\sigma},$$

$$H_{\text{C}} = \sum_{\alpha,\mathbf{k},\sigma} \Big(V_{\alpha\mathbf{k}\sigma} c_{\alpha\mathbf{k}\sigma}^\dagger f_\sigma + V_{\alpha\mathbf{k}\sigma}^* f_\sigma^\dagger c_{\alpha\mathbf{k}\sigma} \Big).$$

Temos que $\alpha \in \{L, R\}$ e assumimos que $\epsilon_{\alpha\mathbf{k}\sigma}$ e $V_{\alpha\mathbf{k}\sigma}$ não dependem de σ. A equação de movimento exata para $G_\sigma(\omega^+) = \left\langle\left\langle f_\sigma : f_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle$ é a mesma que calculamos em nossos estudos anteriores:

$$\Big(\omega^+ - \epsilon_\sigma - \Sigma_0(\omega^+)\Big) G_\sigma(\omega^+) = 1 + U \left\langle\left\langle n_{\overline{\sigma}} f_\sigma : f_\sigma^\dagger \right\rangle\right\rangle ,$$

onde $\Sigma_0(\omega^+) = \displaystyle\sum_{\alpha\mathbf{k}} \frac{|V_{\alpha\mathbf{k}}^2|}{\omega - \epsilon_{\alpha\mathbf{k}}}$. Lembremos que, para chegar na equação acima, tínhamos calculado os comutadores

$$[f_\sigma, H] = \epsilon_\sigma f_\sigma + U n_{\overline{\sigma}} f_\sigma + \sum_{\alpha\mathbf{k}} V_{\alpha\mathbf{k}}^* c_{\alpha\mathbf{k}\sigma},$$

$$[c_{\alpha\mathbf{k}\sigma}, H] = \epsilon_{\alpha\mathbf{k}} c_{\alpha\mathbf{k}\sigma} + V_{\alpha\mathbf{k}} f_\sigma.$$

1 Aproximação EOM0

A aproximação que descobri que dá o resultado correto para EOM0 (equação (11) do paper) é $[n_{\bar{\sigma}}, H] \approx 0$.

Vamos mais fundo calculando a equação de movimento para $\langle\langle n_{\bar{\sigma}} f_\sigma : f_\sigma^\dagger \rangle\rangle$:

$$\omega^+ \langle\langle n_{\bar{\sigma}} f_\sigma : f_\sigma^\dagger \rangle\rangle = \langle \{ n_{\bar{\sigma}} f_\sigma, f_\sigma^\dagger \} \rangle + \langle\langle [n_{\bar{\sigma}} f_\sigma, H] : f_\sigma^\dagger \rangle\rangle .$$

Temos que

$$\{ n_{\bar{\sigma}} f_\sigma, f_\sigma^\dagger \} = n_{\bar{\sigma}} \{ f_\sigma, f_\sigma^\dagger \} = n_{\bar{\sigma}},$$

$$[n_{\bar{\sigma}} f_\sigma, H] = \cancelto{\approx 0}{[n_{\bar{\sigma}}, H]} f_\sigma + n_{\bar{\sigma}} [f_\sigma, H] = \epsilon_\sigma n_{\bar{\sigma}} f_\sigma + U n_{\bar{\sigma}}^2 f_\sigma + \sum_{\alpha \mathbf{k}} V_{\alpha \mathbf{k}}^* n_{\bar{\sigma}} c_{\alpha \mathbf{k} \sigma} =$$

$$= \epsilon_\sigma n_{\bar{\sigma}} f_\sigma + U n_{\bar{\sigma}} f_\sigma + \sum_{\alpha \mathbf{k}} V_{\alpha \mathbf{k}}^* n_{\bar{\sigma}} c_{\alpha \mathbf{k} \sigma}.$$

Acima, estamos fazendo a aproximação $[n_{\bar{\sigma}}, H] = [n_{\bar{\sigma}}, H_{\mathrm{C}}] \approx 0$. Usamos também que $n_{\bar{\sigma}}^2 = n_{\bar{\sigma}}$. Temos então

$$\Big(\omega^+ - \epsilon_\sigma - U \Big) \langle\langle n_{\bar{\sigma}} f_\sigma : f_\sigma^\dagger \rangle\rangle = \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle + \sum_{\alpha \mathbf{k}} V_{\alpha \mathbf{k}}^* \langle\langle n_{\bar{\sigma}} c_{\alpha \mathbf{k} \sigma} : f_\sigma^\dagger \rangle\rangle .$$

Vamos mais fundo de novo, calculando a equação de movimento para $\langle\langle n_{\bar{\sigma}} c_{\alpha \mathbf{k} \sigma} : f_\sigma^\dagger \rangle\rangle$:

$$\omega^+ \langle\langle n_{\bar{\sigma}} c_{\alpha \mathbf{k} \sigma} : f_\sigma^\dagger \rangle\rangle = \langle \{ n_{\bar{\sigma}} c_{\alpha \mathbf{k} \sigma}, f_\sigma^\dagger \} \rangle + \langle\langle [n_{\bar{\sigma}} c_{\alpha \mathbf{k} \sigma}, H] : f_\sigma^\dagger \rangle\rangle .$$

Os comutadores dão

$$\{ n_{\bar{\sigma}} c_{\alpha \mathbf{k} \sigma}, f_\sigma^\dagger \} = n_{\bar{\sigma}} \{ c_{\alpha \mathbf{k} \sigma}, f_\sigma^\dagger \} = 0,$$

$$[n_{\bar{\sigma}} c_{\alpha \mathbf{k} \sigma}, H] = \cancelto{\approx 0}{[n_{\bar{\sigma}}, H]} c_{\alpha \mathbf{k} \sigma} + n_{\bar{\sigma}} [c_{\alpha \mathbf{k} \sigma}, H] = \epsilon_{\alpha \mathbf{k}} n_{\bar{\sigma}} c_{\alpha \mathbf{k} \sigma} + V_{\alpha \mathbf{k}} n_{\bar{\sigma}} f_\sigma.$$

Substituindo na EOM, temos

$$\langle\langle n_{\bar{\sigma}} c_{\alpha \mathbf{k} \sigma} : f_\sigma^\dagger \rangle\rangle = \frac{V_{\alpha \mathbf{k}}}{\omega^+ - \epsilon_{\alpha \mathbf{k}}} \langle\langle n_{\bar{\sigma}} f_\sigma : f_\sigma^\dagger \rangle\rangle .$$

Agora substituiremos esse resultado na EOM para $\langle\langle n_{\bar{\sigma}} f_\sigma : f_\sigma^\dagger \rangle\rangle$:

$$\Big(\omega^+ - \epsilon_\sigma - U \Big) \langle\langle n_{\bar{\sigma}} f_\sigma : f_\sigma^\dagger \rangle\rangle = \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle + \sum_{\alpha \mathbf{k}} \frac{|V_{\alpha \mathbf{k}}|^2}{\omega^+ - \epsilon_{\alpha \mathbf{k}}} \langle\langle n_{\bar{\sigma}} f_\sigma : f_\sigma^\dagger \rangle\rangle \tag{1}$$

$$\Rightarrow \langle\langle n_{\bar{\sigma}} f_\sigma : f_\sigma^\dagger \rangle\rangle = \frac{\langle n_{\bar{\sigma}} \rangle}{\omega^+ - \epsilon_\sigma - U - \Sigma_0(\omega^+)}.$$

Finalmente, podemos voltar na EOM para G_σ:

$$\Big(\omega^+ - \epsilon_\sigma - \Sigma_0(\omega^+) \Big) G_\sigma(\omega^+) = 1 + \frac{U \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle}{\omega^+ - \epsilon_\sigma - \Sigma_0(\omega^+) - U} \Rightarrow$$

$$G_\sigma(\omega^+) = \frac{\omega^+ - \epsilon_\sigma - \Sigma_0(\omega^+) - U(1 - \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle)}{\Big(\omega^+ - \epsilon_\sigma - \Sigma_0(\omega^+) \Big) \Big(\omega^+ - \epsilon_\sigma - \Sigma_0(\omega^+) - U \Big)}.$$

Agora, chame $x = \omega^+ - \epsilon_\sigma - \Sigma_0(\omega^+)$. Temos que (somando e subtraindo $x \cdot \langle n_{\overline{\sigma}} \rangle$):

$$G_\sigma(\omega^+) = \frac{x - U(1 - \langle n_{\overline{\sigma}} \rangle)}{x\Big(x - U\Big)} = \frac{x\,\langle n_{\overline{\sigma}} \rangle}{x\Big(x - U\Big)} + \frac{x - x\,\langle n_{\overline{\sigma}} \rangle - U(1 - \langle n_{\overline{\sigma}} \rangle)}{x\Big(x - U\Big)} =$$

$$= \frac{\langle n_{\overline{\sigma}} \rangle}{x - U} + \frac{1 - \langle n_{\overline{\sigma}} \rangle}{x}.$$

Assim, chegamos finalmente à equação (11) do paper.

$$\boxed{G_\sigma(\omega^+) = \frac{1 - \langle n_{\overline{\sigma}} \rangle}{\omega^+ - \epsilon_\sigma - \Sigma_0(\omega^+)} + \frac{\langle n_{\overline{\sigma}} \rangle}{\omega^+ - \epsilon_\sigma - U - \Sigma_0(\omega^+)}.}$$

2 Aproximação EOM1

Agora justificarei a aproximação EOM1 (equação (15) do paper). Ela se baseia na aproximação de Hubbard-I. Lembre que a equação exata para $\langle\langle n_{\overline{\sigma}} f_\sigma : f_\sigma^\dagger \rangle\rangle$ era

$$\omega^+ \langle\langle n_{\overline{\sigma}} f_\sigma : f_\sigma^\dagger \rangle\rangle = \langle \{ n_{\overline{\sigma}} f_\sigma, f_\sigma^\dagger \} \rangle + \langle\langle [n_{\overline{\sigma}} f_\sigma, H] : f_\sigma^\dagger \rangle\rangle\,,$$

onde $\{n_{\overline{\sigma}} f_\sigma, f_\sigma^\dagger\} = n_{\overline{\sigma}}$. Para o comutador, tínhamos que $[n_{\overline{\sigma}} f_\sigma, H] = [n_{\overline{\sigma}}, H] f_\sigma + n_{\overline{\sigma}} [f_\sigma, H]$, onde fizemos a aproximação $[n_{\overline{\sigma}}, H] \approx 0$. Desta vez, fiquemos com esse termo mais um pouco:

$$\Big(\omega^+ - \epsilon_\sigma - U\Big) \langle\langle n_{\overline{\sigma}} f_\sigma : f_\sigma^\dagger \rangle\rangle = \langle n_{\overline{\sigma}} \rangle + \sum_{\alpha\mathbf{k}} V_{\alpha\mathbf{k}}^* \langle\langle n_{\overline{\sigma}} c_{\alpha\mathbf{k}\sigma} : f_\sigma^\dagger \rangle\rangle + \langle\langle [n_{\overline{\sigma}}, H] f_\sigma : f_\sigma^\dagger \rangle\rangle.$$

Calculando $[n_{\overline{\sigma}}, H]$ explicitamente, temos

$$[n_{\overline{\sigma}}, H] = [n_{\overline{\sigma}}, H_\mathrm{C}] = \sum_{\alpha\mathbf{k}\tau} \Big\{ V_{\alpha\mathbf{k}} [n_{\overline{\sigma}}, c_{\alpha\mathbf{k}\tau}^\dagger f_\tau] + V_{\alpha\mathbf{k}}^* [n_{\overline{\sigma}}, f_\tau^\dagger c_{\alpha\mathbf{k}\tau}] \Big\}.$$

Temos que

$$[n_{\overline{\sigma}}, c_{\alpha\mathbf{k}\tau}^\dagger f_\tau] = \cancelto{0}{[n_{\overline{\sigma}}, c_{\alpha\mathbf{k}\tau}^\dagger]} f_\tau + c_{\alpha\mathbf{k}\tau}^\dagger [n_{\overline{\sigma}}, f_\tau] = -\delta_{\tau\overline{\sigma}}\, c_{\alpha\mathbf{k}\tau}^\dagger f_\tau,$$

$$[n_{\overline{\sigma}}, f_\tau^\dagger c_{\alpha\mathbf{k}\tau}] = [n_{\overline{\sigma}}, f_\tau^\dagger] c_{\alpha\mathbf{k}\tau} + f_\tau^\dagger \cancelto{0}{[n_{\overline{\sigma}}, c_{\alpha\mathbf{k}\tau}]} = +\delta_{\tau\overline{\sigma}}\, f_\tau^\dagger c_{\alpha\mathbf{k}\tau}.$$

Isso nos dá

$$[n_{\overline{\sigma}}, H] = \sum_{\alpha\mathbf{k}} \Big\{ -V_{\alpha\mathbf{k}} c_{\alpha\mathbf{k}\overline{\sigma}}^\dagger f_{\overline{\sigma}} + V_{\alpha\mathbf{k}}^* f_{\overline{\sigma}}^\dagger c_{\alpha\mathbf{k}\overline{\sigma}} \Big\}.$$

Substituindo na EOM:

$$\Big(\omega^+ - \epsilon_\sigma - U\Big) \langle\langle n_{\overline{\sigma}} f_\sigma : f_\sigma^\dagger \rangle\rangle = \langle n_{\overline{\sigma}} \rangle + \sum_{\alpha\mathbf{k}} V_{\alpha\mathbf{k}}^* \langle\langle n_{\overline{\sigma}} c_{\alpha\mathbf{k}\sigma} : f_\sigma^\dagger \rangle\rangle +$$

$$\sum_{\alpha\mathbf{k}} \Big\{ -V_{\alpha\mathbf{k}} \Big\langle\Big\langle c_{\alpha\mathbf{k}\overline{\sigma}}^\dagger f_{\overline{\sigma}} f_\sigma : f_\sigma^\dagger \Big\rangle\Big\rangle + V_{\alpha\mathbf{k}}^* \Big\langle\Big\langle f_{\overline{\sigma}}^\dagger c_{\alpha\mathbf{k}\overline{\sigma}} f_\sigma : f_\sigma^\dagger \Big\rangle\Big\rangle \Big\}.$$

A aproximação Hubbard-I consiste de **três** aproximações. As **duas** primeiras (equações (46) e (47) de `hubbard1963`) são

$$\Big\langle\Big\langle c_{\alpha\mathbf{k}\overline{\sigma}}^\dagger f_{\overline{\sigma}} f_\sigma : f_\sigma^\dagger \Big\rangle\Big\rangle \approx \Big\langle c_{\alpha\mathbf{k}\overline{\sigma}}^\dagger f_{\overline{\sigma}} \Big\rangle \langle\langle f_\sigma : f_\sigma^\dagger \rangle\rangle = \Big\langle c_{\alpha\mathbf{k}\overline{\sigma}}^\dagger f_{\overline{\sigma}} \Big\rangle G_\sigma(\omega^+).$$

$$\left\langle\left\langle f^\dagger_{\bar\sigma} c_{\alpha\mathbf{k}\bar\sigma} f_\sigma : f^\dagger_\sigma \right\rangle\right\rangle \approx \left\langle f^\dagger_{\bar\sigma} c_{\alpha\mathbf{k}\bar\sigma} \right\rangle \langle\langle f_\sigma : f^\dagger_\sigma \rangle\rangle = \left\langle f^\dagger_{\bar\sigma} c_{\alpha\mathbf{k}\bar\sigma} \right\rangle G_\sigma(\omega^+).$$

Com isso, o termo colorido fica

$$\sum_{\alpha\mathbf{k}} \left\{ -V_{\alpha\mathbf{k}} \left\langle\left\langle c^\dagger_{\alpha\mathbf{k}\bar\sigma} f_{\bar\sigma} f_\sigma : f^\dagger_\sigma \right\rangle\right\rangle + V^*_{\alpha\mathbf{k}} \left\langle\left\langle f^\dagger_{\bar\sigma} c_{\alpha\mathbf{k}\bar\sigma} f_\sigma : f^\dagger_\sigma \right\rangle\right\rangle \right\} =$$

$$\sum_{\alpha\mathbf{k}} \left\{ -V_{\alpha\mathbf{k}} \left\langle c^\dagger_{\alpha\mathbf{k}\bar\sigma} f_{\bar\sigma} \right\rangle + V^*_{\alpha\mathbf{k}} \left\langle f^\dagger_{\bar\sigma} c_{\alpha\mathbf{k}\bar\sigma} \right\rangle \right\} G_\sigma(\omega^+) = T\, G_\sigma(\omega^+).$$

No `hubbard1963` ele argumenta que o termo T é nulo por simetria translacional. No nosso caso, o SIAM é somente de uma impureza. Mas se assumirmos que existissem várias impurezas regularmente dispostas, podemos utilizar o argumento de simetria translacional também (eu acho). Nesse caso, temos que $T = 0$.

Mas observe o seguinte: colocar $T = 0$ implica que o termo que vem de $[n_{\bar\sigma}, H]$ é **nulo**. Portanto, ainda não estamos fazendo nada de novo em relação ao EOM0. Nós ainda temos a mesma equação de movimento

$$\left(\omega^+ - \epsilon_\sigma - U\right) \langle\langle n_{\bar\sigma} f_\sigma : f^\dagger_\sigma \rangle\rangle = \langle n_{\bar\sigma} \rangle + \sum_{\alpha\mathbf{k}} V^*_{\alpha\mathbf{k}} \langle\langle n_{\bar\sigma} c_{\alpha\mathbf{k}\sigma} : f^\dagger_\sigma \rangle\rangle .$$

A **última** aproximação do Hubbard-I (equação (45) de `hubbard1963`) é

$$\langle\langle n_{\bar\sigma} c_{\alpha\mathbf{k}\bar\sigma} : f^\dagger_\sigma \rangle\rangle \approx \langle n_{\bar\sigma} \rangle \langle\langle c_{\alpha\mathbf{k}\bar\sigma} : f^\dagger_\sigma \rangle\rangle .$$

Calculando rapidamente a equação de movimento para $\langle\langle c_{\alpha\mathbf{k}\bar\sigma} : f^\dagger_\sigma \rangle\rangle$, obtemos facilmente que

$$\langle\langle c_{\alpha\mathbf{k}\bar\sigma} : f^\dagger_\sigma \rangle\rangle = \frac{V_{\alpha\mathbf{k}}}{\omega^+ - \epsilon_{\alpha\mathbf{k}}} G_\sigma(\omega^+).$$

Com isso, a equação para $\langle\langle n_{\bar\sigma} f_\sigma : f^\dagger_\sigma \rangle\rangle$ fica:

$$\left(\omega^+ - \epsilon_\sigma - U\right) \langle\langle n_{\bar\sigma} f_\sigma : f^\dagger_\sigma \rangle\rangle = \langle n_{\bar\sigma} \rangle + \sum_{\alpha\mathbf{k}} \frac{|V_{\alpha\mathbf{k}}|^2}{\omega^+ - \epsilon_{\alpha\mathbf{k}}} \langle n_{\bar\sigma} \rangle G_\sigma(\omega^+). \tag{2}$$

Compare a equação 2 acima com a equação 1. É como se tivéssemos aplicado na equação 1 uma aproximação de *mean-field* $\langle\langle n_{\bar\sigma} f_\sigma : f^\dagger_\sigma \rangle\rangle \approx \langle n_{\bar\sigma} \rangle G_\sigma(\omega^+)$, obtendo assim a equação 2. Isso mostra que na realidade, EOM0 > EOM1 é um resultado mais exato, não o contrário.

Por fim, temos em EOM1:

$$\langle\langle n_{\bar\sigma} f_\sigma : f^\dagger_\sigma \rangle\rangle = \langle n_{\bar\sigma} \rangle \frac{1 + \Sigma_0(\omega^+) G_\sigma(\omega^+)}{\omega^+ - \epsilon_\sigma - U},$$

o que nos dá a equação (15) do paper para o EOM1

$$\boxed{G_\sigma(\omega^+) = \frac{\omega^+ - \epsilon_\sigma - U(1 - \langle n_{\bar\sigma} \rangle)}{(\omega^+ - \epsilon_\sigma)(\omega^+ - \epsilon_\sigma - U) - \Sigma_0(\omega^+)\left[\omega^+ - \epsilon_\sigma - U(1 - \langle n_{\bar\sigma} \rangle)\right]}.}$$

3 Sympy

$$\boxed{G_\sigma(\omega^+) = \frac{1 - \langle n_{\overline{\sigma}} \rangle}{\omega^+ - \epsilon_\sigma - \Sigma_0(\omega^+)} + \frac{\langle n_{\overline{\sigma}} \rangle}{\omega^+ - \epsilon_\sigma - U - \Sigma_0(\omega^+)}.}$$

Escrevendo $\Sigma_0(\omega) = \Lambda(\omega) - i\Delta(\omega)$, temos

$$\boxed{A_\sigma(\omega) = \frac{-\operatorname{Im}\{G_\sigma(\omega^+)\}}{\pi} = \frac{\Delta(\omega)\langle n_{\overline{\sigma}} \rangle/\pi}{\left[\omega - \epsilon_\sigma - U - \Lambda(\omega)\right]^2 + \Delta(\omega)^2} + \frac{\Delta(\omega)\left(1 - \langle n_{\overline{\sigma}} \rangle\right)/\pi}{\left[\omega - \epsilon_\sigma - \Lambda(\omega)\right]^2 + \Delta(\omega)^2}.}$$