UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS

“DIAGONALIZAÇÃO DO HAMILTONIANO
DE FALICOV E KIMBALL PARA DUAS
IMPUREZAS EM MEIO METÁLICO”

José Luiz Nunes de Mello

*Dissertação apresentada ao Instituto
de Física e Química de São Carlos,
Universidade de São Paulo, para
obtenção do Título de Mestre em
Física Básica*

ORIENTADOR: *Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira*

DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

SÃO CARLOS

1992

**IFSC UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO**
Instituto de Física e Química de São Carlos

Fone (0162) 72-6222
Fax (0162) 72-2218

Av. Dr. Carlos Botelho, 1465
Caixa Postal 369
CEP 13560 - São Carlos - SP
Brasil

MEMBRE DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE José Luiz Nunes de Mello APRESENTADA
AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 17.06.1992

COMISSÃO JULGADORA:

Luiz Nunes de Oliveira

Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

Roberto Leão

Prof. Dr. Roberto Leão

Nelson Stuart Filho

Prof. Dr. Nelson Stuart Filho

Este trabalho foi realizado com o apoio financeiro do programa PICD/CAPES e da Universidade do Amazonas.

Dedico este trabalho

aos meus pais.

Pela atenção permanente a seus filhos.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira, pelo ânimo e apoio permanentes na elaboração deste trabalho, mesmo nas etapas mais difíceis. Seus conhecimentos, aliados a humildade em ensinar e discutir idéias, são um exemplo na minha vida acadêmica.

Aos professores e colegas do DF da Universidade do Amazonas, que colaboraram com minha formação. Em especial, destaco os Professores Hidembergue O. Frota, Fernando S. Aguiar, Abraham Cohen e Melquisedech Soares.

A minha família, que me acompanhou nas alegrias e dificuldades por que passei. O seu carinho e atenção constantes, mesmo com a longa distância entre São Carlos e Manaus, nunca fizeram-me sentir sozinho.

Aos salesianos, que são minha segunda família. O apoio que recebi me ajudou a transpor esta fase da vida. Neles encontro os verdadeiros valores cristãos.

Aos amigos e colegas que conheci em São Carlos. Suas amizades são tão importantes quanto a realização deste trabalho.

Aos amigos de Manaus, que sempre me incentivaram a continuar os estudos. Em especial à Rita de Cássia, que não pôde ver o fim deste trabalho,

Finalmente, e não menos importante, à Rose, que de uma maneira especial aceitou que eu estudasse longe de Manaus. Este afastamento serviu para fortalecer o nosso relacionamento.

ÍNDICE

Lista de Figuras	iii
Lista de Tabelas	iv
Resumo	vi
Abstract	vii
1 - Introdução	1
1.1 - O Problema Kondo	1
1.2 - O modelo de Falicov e Kimball	5
1.3 - Modelo Kondo - uma impureza	8
1.4 - Modelo Kondo - duas impurezas	10
1.5 - Métodos para estudo do Modelo Kondo	13
1.6 - Organização geral do trabalho	15
2 Modelos Vigman-Finkelshtein e Kondo	16
2.1 - Definição dos modelos	16
2.2 - Grupo de Renormalização Numérico	20
2.3 - Diagonalização Iterativa	25
2.4 - Resultados	29
3 Modelo de Falicov e Kimball restrito	33
3.1 - Definição do Modelo	33
3.2 - Diagonalização Iterativa	36
3.3 - Casos Especiais	40
3.3.a - Banda livre	40
3.3.b - $G = 0$	43
3.3.c - $V = 0$	47
4 Modelos Falicov-Kimball restrito e Kondo	54
4.1 - Definição dos modelos	54
4.2 - Impurezas desacopladas ($R = \infty$)	58
4.3 - Impurezas fortemente acopladas ($R = 0$)	63

5	Conclusões	65
5.1	Conclusões gerais	65
5.2	Sugestões para trabalhos futuros	66
	APÊNDICE A - Banda de condução tridiagonal	68
	APÊNDICE B - Hamiltoniano Kondo - duas impurezas	71
	APÊNDICE C - Taxa de Transição	73
	REFERÊNCIAS	75

LISTA DE FIGURAS

Capítulo 1	1
Fig. 1 - Representação esquemática da contribuição à resistividade devida aos fônons e impurezas magnéticas.	2
Fig. 2 - Resistividade para três concentrações de Fe em Cu: 0.05, 0.1 e 0.2%.	2
Fig. 3 - Contribuição do Fe em compostos CuFe para as curvas de calor específico e suscetibilidade magnética em três concentrações (0.05, 0.1 e 0.2%)	3
Fig. 4 - Curvas de resistividade do $Ce_xLa_{1-x}Pb_3$ para várias concentrações de Ce.	4
Fig. 5 - Representação esquemática da mínima energia para mover um elétron ao estado livre mais próximo em um material isolante e um metal.	6
Fig. 6 - Condutividade para vários óxidos em função do inverso da temperatura.	6
Fig. 7 - Gráfico do inverso da suscetibilidade com a temperatura para $T \sim 0$ no modelo Kondo - uma impureza.	8
Fig. 8 - Curvas de calor específico e suscetibilidade obtidas por meio do grupo de renormalização numérico para o modelo Kondo - uma impureza.	10
Fig. 9 - Correlação spin-spin entre impurezas e um esquema do regime predominante para temperaturas próximas de 0 K no Modelo Kondo - duas impurezas.	13
Fig. 10 - Curvas de suscetibilidade uniforme, suscetibilidade <i>staggered</i> e momentos desacoplados obtidas com o método de Monte Carlo quântico para o Modelo Kondo - duas impurezas.	14
 Capítulo 2	 16
Fig. 1 - Esquema pictórico com configurações da banda de condução e impureza nos modelos Kondo e Vigman-Finkelshtein.	17

Fig. 2 - Diversas curvas de suscetibilidade do Modelo de Vigman-Finkelshtein para identificar correspondência de parâmetros com o Modelo Kondo - uma impureza	20
Fig. 3 - Representação esquemática de estados acessíveis às várias escalas temperatura na banda de condução.	21
Fig. 4 - Esquema de sucessivas transformações de escala.	22
Fig. 5 - Banda de condução discretizada por um parâmetro $\Lambda > 1$	24
Fig. 6 - Gráfico dos autovalores obtidos na diagonalização iterativa do modelo de Vigman-Finkelshtein.	31
Capítulo 3	33
Fig. 1 - Representação esquemática de estados de muitos corpos do Hamiltoniano de banda livre.	42
Fig. 2 - Representação esquemática de estados de muitos corpos para H_{FK} com $G = 0$	45
Fig. 3 - Pontos fixos de H_{FK} para vários A_+ e A_- , com $G = 0$	47
Fig. 4 - Representação esquemática dos níveis definidos pelo termo associado a G em H_{FK}	51
Capítulo 4	54
Fig. 1 - Gráfico dos autovalores obtidos na diagonalização iterativa do modelo de Falicov e Kimball no caso $R = \infty$	59
Fig. 2 - Estados de muitos corpos do modelo de Falicov e Kimball no caso $R = \infty$	60
LISTA DE TABELAS	
Capítulo 2	16
Tab. 1 - Valores que determinam equivalência entre os Hamiltonianos Kondo (uma impureza) e Vigman-Finkelshtein.	20

Tab. II - Autovalores e autovetores de H_0 no processo de diagonalização iterativa do Hamiltoniano de Vigman-Finkelshtein.	28
Tab. III - Base para diagonalizar o Hamiltoniano H_1 no processo de diagonalização iterativa do Hamiltoniano de Vigman-Finkelshtein.	28
Tab. IV - Autovalores na diagonalização iterativa $N = 3$ do modelo de Vigman-Finkelshtein.	32
 Capítulo 3	 33
Tab. I - Autovalores de H_0 no processo de diagonalização iterativa do Hamiltoniano de Falicov e Kimball.	39
Tab. II - Autovalores na diagonalização do modelo de elétrons livres.	42
Tab. III - Pontos fixos na diagonalização de H_{FK} com $G = 0$	45
Tab. IV - Estados de muitos corpos para H_{FK} em que $G = 0$	46
Tab. V - Autovalores na diagonalização de H_{FK} em que $V = 0$, com duas impurezas vazias.	50
Tab. VI - Estados de muitos corpos para H_{FK} em que $V = 0$	52
Tab. VII - Diversos valores para o exponte da taxa de transição para o modelo H_{FK}	53
 Capítulo 4	 54
Tab. I - Autovalores na diagonalização iterativa $N = 21$ do modelo de Falicov e Kimball para $R = \infty$	61
Tab. II - Estados de muitos corpos dos Hamiltonianos H_{VF} e H_{FK} para várias iterações pares.	63

RESUMO

Este trabalho estuda o modelo de Falicov e Kimball com duas impurezas. O modelo consiste de um metal com duas impurezas separadas por uma distância R , cada uma das quais é representada por um único nível eletrônico. Um acoplamento V permite transferência de carga entre cada impureza e a banda de condução do metal. Além disso, cada impureza introduz um potencial espalhador G cuja intensidade depende da ocupação do seu nível, assim simulando a interação eletrostática entre um buraco na impureza e os elétrons de condução. Esta dissertação diagonaliza o Hamiltoniano do modelo pelo método do grupo de renormalização numérico. Dá-se atenção à possível equivalência entre este modelo (desprovido de spin) e o modelo de Kondo para duas impurezas. Discute-se em particular essa equivalência para $R = 0$ e para $R = \infty$. Para R finito, apenas um primeiro passo na direção de se estabelecer a equivalência é dado: obtém-se uma expressão analítica para a taxa de transição eletrônica entre os níveis das impurezas e a banda de condução.

ABSTRACT

In this work, the two-impurity Falicov-Kimball model is studied. The model consists of a metal containing two impurities separated by a distance R , each represented by a single electronic level. A coupling V allows charge transfer between each impurity and the conduction band. In addition, each impurity scatters the conduction electrons with a localized potential G whose intensity depends on the occupancy of the impurity level; this mimics the Coulomb attraction between an impurity hole and the conduction band. This dissertation diagonalizes the model Hamiltonian with the numerical renormalization group method. In two special limits, $R = 0$ and $R = \infty$, the equivalence between the (spinless) Falicov-Kimball model and the two-impurity Kondo model is discussed. For other impurity separations, only a first step towards establishing that equivalence is taken: an analytical expression for the electronic transition rate between the impurity levels and the conduction states is obtained.

Capítulo 1

1.1 - INTRODUÇÃO

Na natureza os metais são conhecidos principalmente pelas suas condutividades, tanto a elétrica como a térmica, sendo que essas e outras propriedades (calor específico e suscetibilidade magnética, por exemplo) dependem do grau de pureza do metal. Nesta introdução vamos identificar propriedades das ligas metálicas com impurezas magnéticas, bem como os sucessivos passos desenvolvidos na tentativa de explicar os resultados obtidos.

Sabe-se que dois fatores contribuem para reduzir a condutividade dos elétrons: (a) os fônons, cuja densidade aumenta com a temperatura, interagindo com os elétrons de condução e (b) os defeitos na rede cristalina (vacâncias ou impurezas, por exemplo), que quebram a simetria translacional do metal. Dessa forma, a resistividade a altas temperaturas ($T \lesssim \theta_D$ onde θ_D é a temperatura de Debye) é dominada pelos fônons ($\sim T^5$) e a baixas temperaturas ($T \rightarrow 0K$) tende para o valor residual devido aos defeitos na rede (Fig. 1 (a)).

Amostras de metais de transição não magnéticos como o Au, Pt, Cu, Ag quase que invariavelmente contêm impurezas magnéticas (tais como Cr, Mn, Fe). Há algumas décadas mostrou-se em laboratório que tais impurezas fazem surgir um mínimo nas medidas de resistividade dessas ligas diluídas em uma temperatura característica, conhecida como T_K (nominalmente *temperatura Kondo*, como veremos a seguir), dependente da concentração das impurezas (Fig. 2); dessa forma, infere-se que a impureza contribui para a resistividade uma parcela indicada esquematicamente na Fig. 1 (b). Mais especificamente, são os momentos magnéticos localizados das impurezas, devido a orbitais d parcialmente

preenchidos, que aumentam a resistividade nas ligas a baixas temperaturas.

FIG. 1. Representação gráfica da contribuição para a resistividade em função da temperatura nas ligas magnéticas diluídas devida (a) aos fônons e defeitos na rede (b) às impurezas magnéticas.

FIG. 2. Resistividade para três concentrações de Fe em Cu: 0.05, 0.1 e 0.2%. (Ref. [1])

Conclui-se que o momento magnético das impurezas diluídas em ligas metálicas mostra um comportamento característico dependente da temperatura: quando $T \gg T_K$ identificam-se resultados de um spin livre, o que concorda com a lei de Curie, a suscetibilidade magnética χ variando com T^{-1} , e assim para temperaturas altas χ se aproxima de zero. Para $T \ll T_K$ encontramos o momento magnético fortemente acoplado aos

níveis da banda de condução, num estado singlete ($S=0$), determinando uma contribuição constante para a suscetibilidade magnética devido à impureza. Esses resultados aparecem nas curvas de calor específico e suscetibilidade de ligas magnéticas diluídas (Fig. 3), verificando-se ainda que nas temperaturas $T \approx T_K$ temos o regime de *crossover*, de desvio dos comportamentos indicados acima.

FIG. 3. Contribuição do Fe em compostos CuFe nas curvas de: (a) calor específico para três concentrações (0.05, 0.1 e 0.2%) e (b) suscetibilidade magnética para vários campos magnéticos. Nesta identifica-se o comportamento de spin livre em altas temperaturas (susceptibilidade nula), acoplamento forte para baixas temperaturas (susceptibilidade constante) e o regime de *crossover* entre esses estados (Ref. [1]).

Mínimos nas curvas de resistividade surgem—mesmo inexistindo impurezas magnéticas—nos compostos de Terras Raras denominados férmions pesados (*heavy fermions*) (Fig. 4), sendo nesse caso devido a orbitais f bem localizados que se comportam como momentos magnéticos. Tais materiais apresentam uma grande correlação entre os momentos (representados pelos orbitais f) para temperaturas próximas a 0 K, com uma forte interação entre estes. Nessa escala de temperatura alguns se tornam antiferromagnéticos (UAgCu₄, UCu₅, UCd₁₁), supercondutores (UPt₃, UBe₁₃) ou permanecem como férmions pesados mesmo (CeAl₃, UAl₂). A baixas temperaturas, nas curvas do calor específico C desses materiais, os coeficientes $\gamma = C/T$ são cerca de 100 vezes maiores que os dos metais comuns e dependem fortemente (assim como a resistividade) da concentração de

Terras Raras, como a Fig. 4 indica.

FIG. 4. Curvas da resistividade do $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Pb}_3$ para várias concentrações de Ce. A temperaturas acima de 30 K vemos o característico termo $\log(1/T)$.

Deve-se salientar que o estudo dos férmions pesados está relacionado ao da valência flutuante. Materiais como o SmS e o Eu_3S_4 apresentam valência intermediária, respectivamente para o Sm e o Eu, entre +2 e +3 devido a flutuação de carga na ocupação dos orbitais f . No caso do SmS este, na temperatura ambiente, comporta-se como semicondutor a pressões abaixo de 6.5 kbar e como metal a pressões acima desse valor. Associa-se a perda de 20 % do volume no SmS , numa transição descontínua a 6.5 kbar, à transferência de elétrons do orbital $4f$ para a banda de condução, caracterizando a valência flutuante pela hibridização de orbitais localizados (nesse caso orbitais f) e banda de condução.

No decorrer do presente trabalho identifica-se o orbital localizado como impureza, mas fica explícito que o termo se aplica ao orbital f dos férmions pesados, salvo considerações em contrário.

O problema do mínimo na resistividade, devido aos momentos localizados, foi explicado pela primeira vez por Kondo [2], que calculou perturbativamente a contribuição à resistividade de inversões (*flips*) sucessivas dos momentos de spin da impureza por intermédio da banda de condução. Tais *flips* contribuem para a resistividade uma parcela proporcional a $\log(1/T)$, justificando a existência do mínimo nos modelos de metais com

momentos localizados. Em homenagem ao pesquisador, a temperatura característica em que o mínimo ocorre é chamada de *Temperatura Kondo*, ou T_K .

No entanto tal contribuição, apesar de responder ao problema do mínimo, diverge para temperaturas próximas a 0 K (o que evidentemente não concorda com os dados experimentais), indicando que o cálculo perturbativo de Kondo é inadequado nesse regime de temperatura. A divergência surge porque, à medida que a temperatura se reduz, o cálculo perturbativo se torna impreciso quando $T \approx T_K$; em particular, ele ignora a transição de comportamentos entre $T \gg T_K$ e $T \ll T_K$. Por isso outros métodos devem ser empregados para explicar o comportamento na região de *crossover* e a temperaturas inferiores, como a Seção 1.3 irá indicar. Na seção seguinte vamos descrever um modelo cuja origem histórica se distancia do problema das ligas metálicas diluídas, mas que acaba convergindo para ele.

1.2 - O MODELO DE FALICOV E KIMBALL

Na natureza encontramos metais como o Au e o Cu com alta condutividade elétrica [$\approx 10^5(\Omega \cdot m)^{-1}$] em temperatura ambiente, enquanto outros elementos, como o composto NaCl, possuem baixa condutividade [$\approx 10^{-11}(\Omega \cdot m)^{-1}$]. Tal diferença na teoria das bandas é devida ao preenchimento parcial de algumas bandas, no caso de metais, em contraste com os maus condutores (ou isolantes) que as têm completamente cheias ou vazias, sendo necessário fornecer uma energia da ordem do *gap* —diferença de energia entre o mais alto nível ocupado na banda de valência e o nível mais baixo vazio na banda de condução—para que um elétron passe a banda de condução (Fig. 5).

Os semicondutores são um caso intermediário entre os isolantes e os metais pois a temperaturas próximas de zero são isolantes e, à temperatura ambiente, têm condutividades apenas algumas ordens de grandeza inferiores à dos metais; isso é devido a energia do *gap* nos semicondutores ser menor que a dos materiais isolantes; assim excitações da ordem de $k_B T$ podem ser suficientes para mover os elétrons. Alguns semicondutores (como os óxidos V_2O_3, VO, VO_2) sofrem uma transição e passam a ser metais a partir de determinadas temperaturas [3], sendo em geral as transições de primeira ordem (Fig. 6). Experimentalmente verifica-se que nas transições semicondutor-metal, os momentos lo-

calizados são importantes.

FIG. 5. Representação esquemática da mínima energia para mover um elétron para o estado não preenchido mais próximo. (a) Um isolante, com a banda de condução vazia. (b) Um metal, com a banda de condução parcialmente preenchida.

FIG. 6. Condutividade de vários óxidos em função do inverso da temperatura. Nesta escala, para 2.000 K^{-1} (equivalente a $T \sim 500 \text{ K}$), teremos um comportamento de condutor. Verifica-se uma região de transição entre os estados semicondutor e condutor (que no caso do óxido V_2O_3 do gráfico seria $T \approx 160 \text{ K}$) sendo a transição em geral de primeira ordem (Ref. [3]).

Falicov e Kimball [4] propuseram um modelo que, com base na teoria de Landau sobre líquido de Fermi, relacionava a transição semicondutor-metal com uma interação coulombiana elétron-buraco entre os estados de condução e níveis localizados, obtendo

com o mesmo transições de primeira ordem. O modelo é descrito pelo Hamiltoniano

$$H = \sum_{\nu, \mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\nu}(\mathbf{k}) c_{\nu, \mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\nu, \mathbf{k}, \sigma} + \sum_{i, \sigma} E b_{i\sigma}^{\dagger} b_{i\sigma} - G \sum_{i, \sigma} \sum_{\nu, \mathbf{k}, \sigma'} b_{i\sigma}^{\dagger} c_{\nu, \mathbf{k}, \sigma'}^{\dagger} c_{\nu, \mathbf{k}, \sigma'} b_{i\sigma}, \quad (1.1)$$

onde $c_{\nu, \mathbf{k}, \sigma}$ destrói um estado de Wannier $(\nu, \mathbf{k}, \sigma)$ associado com os elétrons da banda de condução e $b_{i, \sigma}$ destrói um buraco de spin σ em um nível localizado i . Na descrição por líquido de Fermi, o sistema é representado por quase-partículas—análogas às partículas de um gás de Fermi não interagente—que incorporam os estados mais as interações destes com outros. Esse comportamento é comum a temperaturas próximas de 0 K, nas quais os pares elétron-buraco do sistema se localizam próximo ao nível de Fermi.

Com algumas aproximações nesse modelo, Falicov e Kimball determinaram a energia de gap (Δ) e o G crítico para vários compostos. No caso do SmB_6 , supondo que, antes da transição do elétron para a banda de condução, teria um íon Sm^{++} com momento angular total $J = 0$ (sem momento localizado) e após estaria com um íon Sm^{+++} com $J = 7/2$ (com momento localizado), encontraram

$$\Delta = 0.0044\text{eV} \quad \text{e} \quad G = 0.0018\text{eV},$$

em razoável concordância com o valor $G = 0.0022\text{eV}$ obtido experimentalmente; em especial no resultado acima para o SmB_6 , o valor pequeno obtido para Δ pode determinar uma transição de segunda ordem.

Posteriormente [5] o modelo foi indicado como sendo de Ramirez-Falicov-Kimball, criando uma nova identidade para o mesmo. No presente trabalho faz-se referência a primeira denominação [4], sendo válido ressaltar que ambas são utilizadas [6, 7] para identificar o Hamiltoniano definido pela Eq. (1.1).

Esse modelo não apresenta um termo de hibridização entre os orbitais dos níveis localizados e banda de condução, conservando a carga das impurezas. No estudo de compostos com valência flutuante como o SmS verificou-se que a transição semicondutor-metal pode ocorrer pela transferência de elétrons dos orbitais localizados para a banda de condução; por isso, alguns trabalhos [7] incluíram o termo de hibridização entre os elétrons localizados e os itinerantes, complementando o modelo.

Recomenda-se ao leitor mais interessado no assunto as Ref. [3, 5, 6]. Veremos no Capítulo 3 a aplicação desse modelo que nos interessa.

1.3 - MODELO KONDO - UMA IMPUREZA

Como foi visto ao final da seção 1.1, o termo $\log(1/T)$ encontrado por Kondo para o mínimo de resistividade indicava uma divergência em $T = 0$. Esse problema permaneceu sem solução até o trabalho de Wilson [8] que, usando grupo de renormalização numérico, calculou as curvas de suscetibilidade (Fig. 7) e calor específico para $T \rightarrow 0$. O Hamiltoniano utilizado foi

$$H = \sum_{\mathbf{k}, s} \sigma \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}s}^\dagger a_{\mathbf{k}s} - J \mathbf{s} \cdot \mathbf{S}, \quad (1.2)$$

onde s é o spin da função de Wannier associada aos estados da banda de condução e S o spin do momento localizado. Nesse modelo considera-se somente o espalhamento, devido ao spin da impureza, dos orbitais s da banda de condução. Wilson mostrou ainda que T_K é dado por

$$T_K \approx |J\rho|^{1/2} \exp(-1/|J\rho|). \quad (1.3)$$

onde ρ determina a densidade de estados do modelo.

FIG. 7. Gráfico do inverso da suscetibilidade $[\chi^{-1}(T)]$ com a temperatura (T/T_K) no modelo Kondo - uma impureza. As cruzes indicam os resultados para dois valores de $J\rho$ (0.024 e 0.02412). Os desvios para $T \rightarrow 0$ são devidos a erro de truncamento (Ref. [8]).

Esta solução trouxe um grande avanço no tratamento do modelo, além de ajudar a definir uma nova metodologia para obter resultados de Hamiltonianos de muitos corpos, especificamente no cálculo de parâmetros termodinâmicos (susceptibilidade, calor específico) e de propriedades dinâmicas (fotoemissão, absorção de raio-X) desse e de modelos semelhantes, como o modelo de Anderson. Maiores detalhes sobre o método estão exemplificados nos capítulos subsequentes deste trabalho, especialmente no Capítulo 2.

O cálculo da curva de calor específico para $T > 0$, com o grupo de renormalização numérico, exigia um tempo de computação relativamente alto para a época. Um significativo avanço no tratamento do modelo Kondo surgiu no trabalho de Vigman e Finkelshstein [9], paralelamente com o de Schlottmann [10], que de uma maneira objetiva apresentaram um Hamiltoniano equivalente ao da Eq. (1.2). Esse modelo, numa forma associada a ambos os trabalhos, pode ser descrito como

$$H = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k + (G/4) \sum_k (bb^\dagger - b^\dagger b)(c_k^\dagger c_k - \frac{1}{2}) + V \sum_k (b^\dagger c_k + c_k^\dagger b), \quad (1.4)$$

onde c_k é um operador que destrói um elétron no nível k da banda de condução; b destrói um elétron em um nível localizado; V representa um termo de hibridização entre banda de condução e nível localizado enquanto G determina um potencial espalhador para os níveis da banda de condução, dependente da ocupação do nível localizado. Esse modelo traz simplificações em relação ao Hamiltoniano Kondo, pois trata-se de um modelo sem spins, cuja análise numérica é mais simples. Devido às aproximações feitas [10], o Hamiltoniano descrito pela Eq. (1.2) não é diretamente relacionado ao da Eq. (1.4); no entanto, para dado J , escolhendo apropriadamente os parâmetros G e V , consegue-se deste as propriedades termodinâmicas daquele, como veremos no Capítulo 2. Utilizando esse modelo, Oliveira e Wilkins [12] obtiveram o calor específico para o modelo Kondo (Fig. 8).

As curvas obtidas confirmam o caráter universal do modelo Kondo de uma impureza, onde a baixa temperaturas existe somente dependência em T_K , como foi previsto nos trabalhos de Wilson [8] e Nozières [14], que descreveram o comportamento das curvas da susceptibilidade e do calor específico a baixas temperaturas ($T \rightarrow 0$ K) por meio da teoria de líquido de Fermi. Outro fato importante aparece na comparação dos resultados experimentais de ligas metálicas diluídas (ver Fig. 3), para pequenas concentrações

de impurezas magnéticas (abaixo de 1 %), com as curvas obtidas para uma impureza, onde verifica-se uma grande similaridade, conduzindo a uma conclusão importante: o predomínio do efeito Kondo (caracterizado pela interação impureza-banda de condução) sobre qualquer outra interação existente.

FIG. 8. Curvas de calor específico e suscetibilidade obtidas por meio do grupo de renormalização numérico. As curvas mostradas são ajustadas por uma função determinada pelo Hamiltoniano de modelo ressonante (situação em que, na Eq. (1.4), temos $G = 0$). No quadro menor a temperatura relativa T/T_K não está em escala logarítmica (Ref. [12]).

A solução exata para o problema veio com o método do Bethe ansatz [15], confirmando os valores obtidos nos trabalhos anteriores. Veremos a seguir um modelo mais realista, intermediário entre o que foi mostrado nesta seção e a rede Kondo.

1.4 - MODELO KONDO - DUAS IMPUREZAS

Os resultados obtidos para uma impureza são expressivos, como vimos ao final da seção anterior, mas não representam o modelo mais realístico de uma rede Kondo (com várias impurezas), em que poderíamos associar uma menor/maior concentração de momentos localizados a uma diminuição/aumento da quantidade de impurezas no modelo. O tratamento, por meio do grupo de renormalização numérico, do modelo com várias impurezas ainda não foi viabilizado; no entanto, uma proposta intermediária, e não menos importante, é o estudo para duas impurezas, cujo Hamiltoniano é uma extensão

da Eq. (1.2), complementada por um termo de interação entre os estados da banda de condução com outra impureza. Alguns trabalhos [16–18] acrescentaram um termo de interação explícito I_0 entre impurezas, enquanto em outros [22, 23] tal interação aparece apenas via banda de condução. Dessa forma, o modelo pode ser definido como

$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} - J[s_1(-\frac{1}{2}\mathbf{R}) \cdot \mathbf{S}_1 + s_2(+\frac{1}{2}\mathbf{R}) \cdot \mathbf{S}_2] + I_0 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2, \quad (1.5)$$

onde $a_{k\sigma}^\dagger$ cria um estado k com spin σ na banda de condução, enquanto $(-\frac{1}{2}\mathbf{R}, +\frac{1}{2}\mathbf{R})$ determinam as posições das impurezas. $\mathbf{R}$ indica a distância entre estas; s_1 e s_2 são as projeções dos estados da banda de condução sobre cada impureza e $\mathbf{S}_1$ e $\mathbf{S}_2$ operadores de spin dos momentos localizados.

Esse modelo é importante pelo estudo de duas situações que competem nas escalas mais baixas de temperatura nos férmions pesados e nas ligas metálicas diluídas: (a) as interações banda de condução-spin de impureza, que determinam o efeito Kondo e (b) as interações spin-spin de impureza (termo I_0), que determinam interações denominadas RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida), interações estas entre momentos localizados que ocorrem via banda de condução. No modelo de uma impureza inexistente tal competição.

Sendo o estado singleto o estado fundamental do modelo Kondo de uma impureza, presume-se o mesmo para o modelo de duas impurezas; assim, estudando várias escalas de energias I_0 e T_K , acompanha-se o comportamento do sistema definido pela Eq. (1.5) à medida que a temperatura se aproxima de 0 K, para distinguir a formação de um par singleto entre impurezas da formação de singleto entre cada impureza com a banda de condução.

Um dos primeiros trabalhos a estudar este comportamento foi o de Jayaprakash *et al.* [16], obtendo resultados para situações em que os momentos localizados interagem ferromagneticamente ($I_0 > 0$) ou antiferromagneticamente ($I_0 < 0$), nas situações $I_0 \gg T_K$ e $I_0 \ll T_K$. As conclusões relevantes sobre essas situações serão apresentadas mais adiante; no entanto, na situação em que $I_0 \ll T_K$ (a interação entre momentos ser muito menor que a energia determinada pela Temperatura Kondo), os autores sugeriram ser possível interpretar o sistema como dois modelos Kondo separados. No trabalho de Varma [19], usando teoria de perturbação, verifica-se ser isso incorreto, de-

vido ao surgimento de divergências logarítmicas no cálculo da interação entre momentos, indicando que as interações I_0 , por menor que sejam, não podem ser ignoradas.

Tentando esclarecer a controvérsia, visto que os cálculos perturbativos não são confiáveis a baixas temperaturas (devido a divergências), Jones *et al.* [17] verificaram, por meio do grupo de renormalização numérico, que mesmo na situação $I_0 \ll T_K$ existe uma correlação entre os spins dos momentos localizados [Fig. 9 (a)], sendo incorreto descrever o problema como o de dois modelos Kondo separados, a não ser no caso limite $I_0 = 0$.

Em trabalhos complementares, Jones *et al.* [18] identificaram um ponto crítico, indicado por uma mudança de regime (comportamento Kondo para não Kondo), de natureza instável e posicionado em $I_0/T_K \approx -2.2$. De acordo com esses trabalhos, podemos definir o comportamento dos momentos localizados em várias situações [Fig. 9 (b)]: (a) No regime ferromagnético ($I_0 > 0$) vemos que estes têm tendência a formar um estado tripleto ($S = 1$) mas, mesmo nestas circunstâncias, ocorre uma ligação singleto entre momento localizado e banda de condução; assim, ocorre o efeito Kondo, que pode acontecer muito rapidamente na medida em que I_0 torna-se maior em relação a T_K . (b) No regime antiferromagnético fraco ($I_0/T_K > -2.2$) o estado singleto entre momentos, formados pela interação antiferromagnética, ainda permitem o espalhamento dos níveis da banda de condução em cada impureza, o que conduz ao efeito Kondo. (c) No regime antiferromagnético forte ($I_0 \ll T_K$) verifica-se a existência do estado singleto entre momentos localizados, predominando a interação RKKY sobre o efeito Kondo. O estado singleto entre momentos ($S = 0$) somente é encontrado no limite extremo desse regime [Fig. 9 (a)].

Assim, ao que tudo indica, o parâmetro relevante no problema Kondo—duas impurezas, é a razão I_0/T_K , não mais havendo universalidade em relação a T_K (como no modelo

com uma impureza).

FIG. 9. (a) Correlação spin-spin entre momentos localizados para 3 valores de $J\rho$: $J\rho = -0.15$ (linha tracejada), $J\rho = -0.25$ (linha cheia) e $J\rho = -0.35$ (linha tracejada com pontos) [Ref. [18]]. (b) Gráfico comparativo da razão I_0/T_K , na determinação do regime que predomina para temperaturas próximas de 0 K. Existe um ponto crítico instável que ocorre na situação $I_0/T_K \approx -2.2$ (Ref. [18]).

1.5 - MÉTODOS PARA ESTUDO DOS MODELOS

Vários trabalhos têm surgido com o intuito de tratar o Modelo Kondo de maneira mais completa e que não utilizam o grupo de renormalização numérico. Especificamente em relação ao modelo Kondo com duas impurezas, destacamos os seguintes métodos: teoria de perturbação, Monte Carlo quântico e expansões $1/N$.

Teoria de perturbação para mais altas ordens tem demonstrado que divergências logarítmicas surgem sem associação com termos de ordens inferiores, indicando que as interações entre momentos localizados (do tipo RKKY), conjuntamente com a interação momento-banda de condução (efeito Kondo), interferem [19]. Monte Carlo quântico, aplicável a esse problema devido a simetria partícula-buraco do modelo, obteve curvas de suscetibilidade e correlação spin-spin (Fig. 10) [21]; no entanto, por características do

método, não se consegue atingir temperaturas próximas de 0 K (acessíveis pelo grupo de renormalização numérico). Expansões $1/N$ (que são expansões analíticas em que se supõe alta a degenerescência (N) dos níveis de impureza), apesar do sucesso no estudo do modelo de uma impureza, produziu resultados menos satisfatórios em comparação com o grupo de renormalização para duas impurezas [23].

FIG. 10. Curvas de suscetibilidade uniforme (círculos abertos), suscetibilidade *staggered* (cruzes) e momentos desacoplados ($k_F R = \infty$) para duas situações: (a) $k_F R = 1.0$ e (b) $k_F R = 1.5$ (Ref. [21]).

Outros métodos merecem destaque: Campo Médio funciona bem para altas dimensionalidades, não servindo para o problema de duas impurezas. O Bethe ansatz obteve ótimos resultados para o problema de uma impureza, mas não pôde ser aplicado para um número maior de impurezas pois não existe ainda uma maneira de introduzir nesse método as interações entre momentos localizados. Invariância conforme mostra ser um método promissor, mas no momento tem resultados somente para o modelo Kondo de uma impureza [20].

Verificamos então que cada método apresenta suas limitações, mas em geral, um complementa o que é obtido por outro; o conjunto das várias abordagens define então um caminho mais seguro para a compreensão geral dos momentos localizados nos metais.

1.6 - ORGANIZAÇÃO GERAL DO TRABALHO

Este capítulo fez um histórico geral do estudo dos momentos localizados em metais, assim como de alguns modelos de muitos corpos idealizados para interpretar os resultados obtidos. Também foram apresentados os conceitos gerais de que precisaremos nos capítulos seguintes, em que discutiremos os resultados do presente trabalho.

O Capítulo 2 traz a aproximação detalhada do modelo Kondo de uma impureza com o Hamiltoniano apresentado no trabalho de Vigman-Finkelshtein, descrevendo a associação entre os parâmetros de ambos os modelos; também é feita uma descrição do método do grupo de renormalização numérico.

O Capítulo 3 mostra o procedimento de diagonalização do modelo Falicov e Kimball, por meio do grupo de renormalização numérico, com duas impurezas. Alguns casos especiais deste modelo são discutidos. Ao final calcula-se o expoente da taxa de transição de um elétron do nível localizado para a banda de condução.

O Capítulo 4 descreve a associação entre o modelo de Falicov e Kimball, tratado com duas impurezas, e o modelo Kondo de duas impurezas, mostrando resultados para dois casos específicos: (a) duas impurezas localizadas num mesmo ponto ($R = 0$) e (b) duas impurezas infinitamente separadas ($R = \infty$).

O Capítulo 5 traz as conclusões gerais, bem como mostra sugestões de trabalhos complementares aos resultados obtidos neste trabalho.

Capítulo 2

2.1 - MODELOS VIGMAN-FINKELSSTEIN E KONDO

A utilização de modelos sem spins equivalentes a modelos com degenerescência de spin pode simplificar a obtenção das propriedades físicas destes. Neste capítulo discute-se a correspondência entre os parâmetros do modelo de Vigman-Finkelshtein [Eq. (1.4)] e os do modelo Kondo [Eq. (1.2)]. Inicialmente a discussão é qualitativa, de modo que o leitor tenha um conhecimento geral; em seguida definem-se com mais detalhes as relações entre os modelos. Os conceitos básicos da teoria do grupo de renormalização numérico, exemplificado no modelo sem spins, são apresentados no final deste capítulo.

O modelo Kondo pode ser reescrito da Eq. (1.2) como

$$H_K = \sum_{\mathbf{k}, \mu} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\mu}^\dagger \epsilon_{\mathbf{k}\mu} - (J_{\parallel}/2) \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow} - c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow}) S_z - (J_{\perp}/4) \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow} S_- + c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow} S_+) \quad , \quad (2.1)$$

e para uma melhor comparação, temos o Hamiltoniano de Vigman-Finkelshtein

$$H_{VF} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + (G/4)(bb^\dagger - b^\dagger b)(f_0^\dagger f_0 - f_0 f_0^\dagger) + \sqrt{2}V(b^\dagger f_0 + f_0^\dagger b), \quad (2.2)$$

onde $f_0 = 1/\sqrt{2} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}$, sendo f_0 estado de Wannier centrado na origem. Analisando as semelhanças entre os modelos vemos que o parâmetro G de H_{VF} atua como um potencial espalhador, produzindo defasagens de valor $\pm \delta_G$ nos elétrons de condução, dependendo da ocupação na impureza. Assim como o Hamiltoniano H_{VF} , o termo associado a G tem simetria partícula-buraco, verificada trocando-se $c_{\mathbf{k}}$ por $c_{\mathbf{k}}^\dagger$ e b por $-b^\dagger$. Este termo corresponde ao termo com $J_{\parallel}$ no modelo H_K , responsável pelo espalhamento dos elétrons de condução. Já o termo proporcional a V no modelo H_{VF} , associado à hibridização dos

níveis de impureza e banda de condução, corresponde ao termo proporcional a $J_{\perp}$ do modelo H_K , responsável pela inversão dos momentos de spins na banda de condução e nível de impureza. Identificam-se os spins alto/baixo do modelo H_K com orbital ocupado/vazio no modelo H_{VF} (Fig. 1).

FIG. 1. Esquema pictórico com configurações da banda de condução e impureza indicada nos modelos Kondo (esquerda) e Vigman-Finkelstein (direita) quando $J_{\perp} \approx 0$ e $V \approx 0$ respectivamente. Numa forma didática, a comparação considera um único elétron na banda de condução no nível de Fermi em cada caso.

No entanto, a associação quantitativa de um modelo com outro requer uma análise mais cuidadosa. Em 1979, Vigman e Finkelstein [9] mostraram que a função de partição de ambos os modelos seriam iguais quando os parâmetros G do modelo H_{VF} e $J_{\parallel}$ do modelo H_K fossem relacionados por

$$(1 - 2\frac{\delta_G}{\pi})^2 = 2(1 - 2\frac{\delta_{J_{\parallel}}}{\pi})^2, \quad (2.3)$$

onde

$$\delta_G = \arctan(\frac{\pi\rho G}{4}) \quad \text{e} \quad \delta_{J_{\parallel}} = \arctan(\frac{\pi\rho J_{\parallel}}{4}), \quad (2.4)$$

e ρ é a densidade de estados. Usando uma aproximação de tempo longo—que consiste em calcular a função de Green dependente do tempo dos elétrons de condução para tempos

$t \gg \hbar/D$ —associaram a função partição de ambos os modelos e determinaram uma correspondência entre V e $J_{\perp}$; assim, tomando expansões da função de partição em V (no caso do modelo H_{VF}) e em $J_{\perp}$ (no modelo H_K) mostraram a equivalência quando

$$\frac{V}{\tau^{1/2}} \cos^2(\delta_G) = \frac{J_{\perp}}{2} \cos^2(\delta_{J_{\perp}}) \quad , \quad (2.5)$$

em que τ identifica um parâmetro de corte indefinido. Esta aproximação, no entanto, pode resultar em resultados incorretos (como já fora indicado no trabalho de Emery e Luther [11] onde um modelo com bósons, cuja função partição foi associada a do modelo Kondo pela mesma aproximação, mostrou propriedades à temperatura zero diferentes deste último modelo); assim Oliveira e Wilkins [12] verificaram que uma associação mais precisa entre V e $J_{\perp}$ pode ser obtida mapeando-se a suscetibilidade no modelo H_{VF} com os resultados conhecidos para a mesma propriedade física no modelo H_K . Em particular, na determinação de V para o caso isotrópico, no qual $J = J_{\parallel} = J_{\perp}$, tem-se que nos dois modelos [8]

$$T \chi_{\text{imp}})_{T=T_K} = 0.07 \frac{(g\mu_B)^2}{k_B} \quad , \quad (2.6)$$

onde

$$T_K = 0.85 D \sqrt{\rho} |J| \exp\left(-\frac{1}{\rho J}\right) [1 + O(\rho J)] \quad , \quad (2.7)$$

em que χ_{imp} indica a correção na suscetibilidade devida a impureza, g o fator de Landé, μ_B magneton de Bohr, D define a largura da banda de condução (preenchida pela metade com extremos em $-D$ e D) e ρ a densidade de estados (sendo $\rho = 1/D$); o termo à direita na Eq. (2.6) é obtido da curva de suscetibilidade no modelo Kondo calculada por Wilson (Fig. 7 - Capítulo 1).

Mais especificamente, o ajuste foi feito calculando a curva de suscetibilidade para vários valores de V no modelo H_{VF} e identificando, graficamente (Fig. 2), aquela que se aproxima do valor conhecido pela Eq. (2.6); dessa forma, pôde-se obter um ajuste numérico de V com $J_{\perp}$ com a precisão que se desejava. Alguns resultados estão exemplificados na Tabela I e servirão como referência nos cálculos do modelo Kondo com duas impurezas desacopladas, como veremos no Capítulo 4.

O trabalho de Oliveira e Wilkins teve como objetivo obter a curva do calor específico com a temperatura no modelo Kondo de uma impureza (resultado visto na Fig. 8 - Capítulo 1). No presente trabalho, na seção seguinte, faz-se uso do modelo H_{VF} para compreender o uso de alguns princípios do grupo de renormalização numérico.

TABELA I. Alguns valores para os parâmetros dos Hamiltonianos H_K e H_{VF} , em que existe equivalência dos resultados obtidos. As temperaturas T_K e T_{VF} mostram uma igualdade dentro da margem de erro em que foram medidas ($\approx 10\%$). (Ref. [13])

Λ^a	ρJ	G^b	V	T_{VF}	T_K
3.0	-0.08	0.80164	0.066	$3.4 \cdot 10^{-7}$	$2.5 \cdot 10^{-7}$
3.0	-0.12	0.72521	0.090	$2.7 \cdot 10^{-5}$	$3.0 \cdot 10^{-5}$
3.0	-0.16	0.65295	0.120	$4.2 \cdot 10^{-4}$	$3.4 \cdot 10^{-4}$
3.0	-0.20	0.58440	0.140	$1.6 \cdot 10^{-3}$	$1.5 \cdot 10^{-3}$
3.0	-0.24	0.51916	0.160	$4.4 \cdot 10^{-3}$	$4.1 \cdot 10^{-3}$

^a O parâmetro Λ corresponde a um fator de escala de energia característico no grupo de renormalização numérico [8].

^b O parâmetro G foi ajustado de acordo com a Eq. (2.3).

FIG. 2. Determinação numérica de V para o caso em que $\rho J = -0.24$ ($J = J_{\parallel} = J_{\perp}$). Da Ref. [8] temos que quando $T = T_K$, $T\chi_{\text{imp}} = 0.07(g\mu)^2$ e no gráfico está assinalado a temperatura em que cada curva, obtida para 4 valores de V (0.12, 0.16, 0.20 e 0.24 D), atinge este valor. Assim, verificamos que $V = 0.16$ D corresponde ao melhor ajuste neste caso. A porção hachurada em torno de T_K indica a incerteza no valor de T (Ref. [12])

2.2 - GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO

A correspondência entre os resultados obtidos de um modelo matemático com valores medidos em laboratório determina a aceitação do mesmo pela comunidade científica. Infelizmente os Hamiltonianos de alguns modelos não têm ainda uma solução analítica; nesses casos são necessários métodos numéricos. Neste trabalho, das várias técnicas mencionadas ao final do Capítulo 1, recorre-se ao grupo de renormalização numérico, na forma definida por Wilson [8]. As vantagens em utilizá-lo vão ficar evidentes nos resultados mostrados neste e nos capítulos seguintes deste trabalho; ressalta-se que o mesmo não possui as limitações de outros métodos como o Monte Carlo (que exige Hamiltonianos com simetria partícula-buraco), expansões $1/N$ (sem bons resultados para duas impurezas) e Bethe-ansatz (que até o momento limita-se ao problema de uma impureza). Uma

explicação detalhada do método com exemplos aplicados a Hamiltonianos quadráticos encontra-se no trabalho de Yoshida *et al.* [24], servindo como um texto complementar ao aqui apresentado.

Como vimos no Capítulo 1, um metal possui bandas parcialmente preenchidas, em que a energia do sistema depende da disposição dos elétrons nos diversos níveis; em especial, denomina-se *estado fundamental* aquele em que todos os níveis de energia mais baixa estão preenchidos e chama-se *nível de Fermi* ao nível de mais alta energia ocupado no estado fundamental. Pode-se estudar um metal identificando seu comportamento em várias escalas de energia associadas com a temperatura (mais precisamente $k_B T$), pois à temperatura 0 K o sistema estaria no estado fundamental e em escalas gradativamente maiores de energia (relacionadas com temperaturas mais altas) surgiriam estados ocupados acima do nível de Fermi e buracos abaixo deste, num limite de energia de $2k_B T$ (Fig. 3); dessa forma, para temperaturas próximas de 0 K os estados mais próximos do nível de Fermi seriam importantes e para temperaturas mais altas os estados mais afastados deste se tornariam relevantes. A relação entre escalas de energia e temperaturas é apenas um exemplo, pois o método também é válido no estudo de absorção de raio-X e fotoemissão, em que as escalas se relacionam com frequência de excitação [13, 27].

FIG. 3. Representação esquemática na banda de condução de escalas sucessivas de temperatura com alguns estados acessíveis no limite $2k_B T$ em torno do nível de Fermi.

Em cada escala de energia, os níveis acessíveis são numerosos, não sendo possível, numericamente, trabalhar com todos eles; assim, a seleção de alguns níveis é necessária para qualquer procedimento computacional, onde a escolha adequada do processo de seleção minimiza os erros dos resultados. A discretização, ou escolha de estados, em princípio, poderia ser linear, mas vimos há pouco que num metal, para cada escala de temperatura, surgem estados mais relevantes que outros na banda de condução. Wilson [8]

definiu na aplicação do grupo de renormalização para o problema Kondo uma discretização logarítmica da banda de condução, concentrando os estados selecionados na proximidade do nível de Fermi e fazendo o procedimento gerar uma descrição mais detalhada dessa vizinhança à medida que trabalha com escalas mais próximas àquele nível (na associação com temperatura, isso significa uma descrição mais detalhada à medida que $T \rightarrow 0$ K).

Num processo de transformação de escala (Fig. 4) feito em torno do nível de Fermi, como o descrito acima, temos uma ampliação gradativa por um fator (por exemplo λ) onde, para cada transformação, os níveis mais próximos do nível de Fermi se tornam relevantes (da mesma maneira que um microscópio, de acordo com o fator de ampliação utilizado, deixa visualizar objetos cada vez menores), permitindo pensar que, em cada transformação, reduz-se a temperatura do sistema.

FIG. 4. Esquema indicando seqüências de transformações de escala (fator λ) para um conjunto de níveis de uma banda. Mesmo mostrando somente alguns níveis em cada escala, verifica-se que surgem energias que, relativamente ao nível de Fermi, são equivalentes a energias de escalas anteriores, bem como outras que não apresentam correspondência.

Durante transformações de escala, podem surgir níveis de escalas anteriores que se repetem após esta; nesse caso temos um Hamiltoniano invariante por transformação de escala. Níveis invariantes por transformação de escala definem o que se conhece como ponto fixo na teoria do grupo de renormalização, que são importantes porque possuem interpretação simples e permitem encontrar expressões analíticas para as grandezas físicas, mesmo nas regiões inacessíveis às técnicas perturbativas, como vimos nos resultados

obtidos por Wilson [8] no cálculo da suscetibilidade para $T \rightarrow 0$ K. Pode acontecer o caso oposto, quando surgem níveis anteriormente inexistentes, indicando que o sistema encontra-se num regime de *crossover* (transição). Discutiremos melhor essas possibilidades na Seção 2.4.

Define-se a banda de condução (ou a porção desta a ser estudada) com um intervalo de energia $[-D, D]$ relativo ao nível de Fermi; com a banda preenchida pela metade, teremos $\epsilon_F = 0$ e, no interesse de determinar propriedades próximas ao nível de Fermi, podem-se linearizar as energias compreendidas nesse intervalo, fazendo-as diretamente proporcionais a k e descritas pela relação de dispersão

$$\epsilon_k = V_F k \cong V_F k \equiv Dk \quad , \quad (2.8)$$

onde k é medido em relação a k_F e trabalha-se num sistema de unidades em que $V_F = D$ (V_F é a velocidade de Fermi). A discretização da banda de condução obedece uma escala determinada por um fator Λ , em que $\Lambda > 1$ (a discretização se aproxima do contínuo para $\Lambda \rightarrow 1$). Na representação da banda de condução em função de k (definida com limites $[-1, 1]$) tomamos os primeiros intervalos como sendo $[-1, -\Lambda^{-z}]$, $[\Lambda^{-z}, 1]$, $[-\Lambda^{-z}, -\Lambda^{-z-1}]$ e $[\Lambda^{-z-1}, \Lambda^{-z}]$ e os subsequentes surgem de sucessivas divisões dos intervalos mais internos por Λ (por exemplo: $[-\Lambda^{-z-1}, -\Lambda^{-z-2}]$, $[\Lambda^{-z-2}, \Lambda^{-z-1}]$) (Fig. 5); dessa forma, a banda define uma discretização logarítmica que será discutida abaixo. O parâmetro z proporciona maior flexibilidade ao procedimento: variando-o entre 0 e 1 podemos fazer qualquer nível dado do contínuo da banda de condução coincidir com um nível da banda discretizada.

FIG. 5. Representação da banda de condução discretizada logaritmicamente por um parâmetro Λ , onde vemos a concentração de níveis em torno de $\epsilon_F = 0$. Para $\Lambda \rightarrow 1$, os níveis assumem valores próximos do contínuo. O parâmetro z tem sempre valor positivo e $z = 1$ repete a discretização encontrada na Ref. [8].

Define-se para cada intervalo entre níveis funções ortonormais, que formam um conjunto completo descrito por

$$\Phi_l^{(\pm)}(k) = \begin{cases} \frac{1}{(1-\Lambda^{-z})^{1/2}} \exp(\pm \frac{2\pi i}{1-\Lambda^{-z}} \ell k) & \Lambda^{-z} < \pm k < 1 \\ 0 & \text{fora do intervalo} \end{cases} \quad (2.9)$$

$$\Psi_{lm}^{(\pm)}(k) = \begin{cases} \frac{\Lambda^{\frac{m+z}{2}}}{(1-\Lambda^{-1})^{1/2}} \exp(\pm \frac{2\pi i \Lambda^{m+z}}{1-\Lambda^{-1}} \ell k) & \Lambda^{-(m+z+1)} < \pm k < \Lambda^{-(m+z)} \\ 0 & \text{fora do intervalo} \end{cases} \quad (2.10)$$

onde m tem valores não negativos. Para as funções acima relacionamos os operadores fermiônicos

$$\begin{aligned} a_l &= \int_{-1}^1 dk (\Phi_l^{(+)}(k))^* c_k & b_l &= \int_{-1}^1 dk (\Phi_l^{(-)}(k))^* c_k \\ a_{lm} &= \int_{-1}^1 dk (\Psi_{lm}^{(+)}(k))^* c_k & b_{lm} &= \int_{-1}^1 dk (\Psi_{lm}^{(-)}(k))^* c_k, \end{aligned} \quad (2.11)$$

nas quais cada operador cria um elétron com energia média relativa ao intervalo associado (exemplo: o operador a_{lm} cria um elétron com energia média $\frac{1+\Lambda^{-1}}{2} D \Lambda^{-m-z}$ no intervalo $\Lambda^{-(m+z+1)} < k < \Lambda^{-(m+z)}$). Reescrevendo o Hamiltoniano descrito pela Eq. (2.2), utilizando o operador fermiônico $f_0 = 1/\sqrt{2} \sum_k c_k$ e com a linearização definida na Eq. (2.8) para $\epsilon(k)$, temos

$$\begin{aligned} H_{VF} &= D \sum_k k c_k^\dagger c_k + (G/4)(bb^\dagger - b^\dagger b)(f_0^\dagger f_0 - f_0 f_0^\dagger) + \\ &+ \sqrt{2}V(b^\dagger f_0 + f_0^\dagger b) \end{aligned} \quad (2.12)$$

Descrevendo f_0 em termo dos operadores definidos em (2.11) teremos que

$$f_0 = \left(\frac{1-\Lambda^{-z}}{2}\right)^{1/2} (a_0 + b_0) + \left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2}\right)^{1/2} \sum_{m=0}^{\infty} \Lambda^{-(\frac{m+z}{2})} (a_{0m} + b_{0m}). \quad (2.13)$$

Quanto ao primeiro termo de H_{VF} , definido como H_{bc} , podemos inverter as equações de (2.11) e expressá-lo como

$$\begin{aligned} H_{bc} &= \frac{1+\Lambda^{-z}}{2} \sum_l (a_l^\dagger a_l - b_l^\dagger b_l) + \frac{1+\Lambda^{-1}}{2} \sum_{lm} \Lambda^{-(m+z)} (a_{lm}^\dagger a_{lm} - b_{lm}^\dagger b_{lm}) + \\ &+ \frac{1-\Lambda^{-z}}{2\pi i} \sum_m \sum_{l \neq l'} (a_l^\dagger a_{l'} - b_l^\dagger b_{l'}) \exp\left[\frac{2\pi i}{1-\Lambda^{-z}}(\ell - \ell')\right] + \\ &+ \frac{1-\Lambda^{-1}}{2\pi i} \sum_m \sum_{l \neq l'} \Lambda^{-(m+z)} (a_{lm}^\dagger a_{l'm} - b_{lm}^\dagger b_{l'm}) \exp\left[\frac{2\pi i}{1-\Lambda^{-1}}(\ell - \ell')\right]. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Como vemos na expressão, o terceiro e o quarto termo tendem a zero no limite em que $\Lambda \rightarrow 1$ (limite do contínuo), enquanto f_0 , descrito pela Eq. (2.13), somente se acopla com termos envolvendo $\ell = 0$; com isto, podemos simplificar a Eq. (2.14) considerando-a no limite em que $\Lambda \rightarrow 1$ e desprezando os termos que envolvem $\ell \neq 0$. Na prática não é possível utilizar $\Lambda \cong 1$, no entanto, mesmo para $\Lambda = 3$ os procedimentos acima são válidos: isto se justifica visto que no cálculo de parâmetros termodinâmicos os resultados convergem rápido para o contínuo [26].

Por outro lado, a expressão restante envolve uma série infinita de termos, o que não é possível tratar numericamente. Um truncamento na série poderia afetar os resultados do acoplamento banda de condução-impureza; no entanto, uma nova base pode ser definida usando uma construção de Lanczos [25] (ver Apêndice A) na qual associamos operadores f_n 's, contendo f_0 descrito exatamente em termos de c_k e pela Eq. (2.13). Dessa forma, chegamos a

$$H_{bc} = \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} D \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n^z (f_n^\dagger f_{n+1} + f_{n+1}^\dagger f_n) \quad , \quad (2.15)$$

onde ϵ_N^z é calculado numericamente [24], com expressões analíticas para os casos

$$\begin{aligned} \epsilon_n^z &= \frac{(1-\Lambda^{-1})(1-\Lambda^{-(n+1)})\Lambda^{-n/2}}{[1-\Lambda^{-(2n+3)}]^{1/2}} [1 - \Lambda^{-(2n+1)}]^{1/2} & (z = 1) \\ \epsilon_n^z &\cong \Lambda^{1-z-\frac{n}{2}} & (n \gg 1) \end{aligned} \quad (2.16)$$

Novamente, devido ao tratamento numérico, existe a necessidade de truncar a série no Hamiltoniano, mas neste caso não será afetado o acoplamento com entre banda de condução e impureza, visto que este só envolve o termo f_0 , que é preservado no truncamento. Teremos então que qualquer aproximação envolverá somente a banda de condução, sem interferir na impureza. A diagonalização é feita iterativamente, como veremos na seção seguinte.

2.3 - DIAGONALIZAÇÃO ITERATIVA

No método de diagonalização iterativa por meio do grupo de renormalização numérico, diagonaliza-se o Hamiltoniano da iteração anterior acrescido de uma perturbação, que corresponde a um termo complementar à série truncada. O processo é repetido até que a perturbação acrescentada não interfira nos resultados, indicando um comportamento

de ponto fixo estável. Nesta seção descrevem-se os procedimentos necessários, utilizando o modelo de Vigman-Finkelstein. Como foi visto na seção anterior, temos o seguinte Hamiltoniano H_{VF} truncado

$$H'_N = \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} D \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_n^z (f_n^\dagger f_{n+1} + f_{n+1}^\dagger f_n) + (G/4)(bb^\dagger - b^\dagger b)(f_0^\dagger f_0 - f_0 f_0^\dagger) + \sqrt{2}V(b^\dagger f_0 + f_0^\dagger b) \quad , \quad (2.17)$$

no qual, utilizando a base de f_n 's, as aproximações são controladas e ocorrem na banda de condução; a impureza é tratada exatamente com a permanência do operador f_0 . O acoplamento entre os operadores f_n e f_{n+1} é feito por energias ϵ_n^z sucessivamente menores, determinadas numericamente (ver Apêndice A). A escolha do limite N para o truncamento da série depende de uma determinada energia ϵ' (que pode relacionar-se, por exemplo, com a temperatura: $k_B T = \epsilon'/D$): sendo $\epsilon_N^z \cong \Lambda^{1-z-\frac{N}{2}}$ [Eq. (2.16)], para N grandes adquire-se a precisão necessária no truncamento quando $\epsilon_N^z \ll \epsilon'$.

Na escala determinada por N em cada iteração, será conveniente fazer com que o menor termo na banda de condução tenha valor unitário; dessa forma, pode-se definir um novo H_N em que

$$H_N = \frac{2}{(1 + \Lambda^{-1})D} \frac{1}{\Lambda^{1-z-\frac{N-1}{2}}} H'_N \quad , \quad (2.18)$$

ficando a Eq. (2.17) como

$$H_N = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \left\{ \Lambda^{z-1} \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_n^z (f_n^\dagger f_{n+1} + f_{n+1}^\dagger f_n) + (\tilde{G}/4)(bb^\dagger - b^\dagger b)(f_0^\dagger f_0 - f_0 f_0^\dagger) + \sqrt{2}\tilde{V}(b^\dagger f_0 + f_0^\dagger b) \right\} \quad , \quad (2.19)$$

onde

$$\tilde{G} = \frac{2G}{(1 + \Lambda^{-1})D} \frac{1}{\Lambda^{1-z}} \quad \text{e} \quad \tilde{V} = \frac{2V}{(1 + \Lambda^{-1})D} \frac{1}{\Lambda^{1-z}} \quad (2.20)$$

Uma relação recorrente para o Hamiltoniano pode então ser obtida para cada nova iteração, em que

$$H_{N+1} = \Lambda^{1/2} H_N + \xi_N^z (f_N^\dagger f_{N+1} + f_{N+1}^\dagger f_N) \quad , \quad (2.21)$$

na qual $\xi_N^z = \Lambda^{z-1+\frac{N}{2}} \epsilon_N^z$.

Os passos até agora descritos dão uma idéia geral do processo de diagonalização iterativa por meio do grupo de renormalização numérico. Do Hamiltoniano definido pela Eq. (2.19), pode-se definir H_0 como o mesmo sem o primeiro termo à direita na Eq. (2.19); dessa forma temos

$$H_0 = \Lambda^{-\frac{1}{2}} \{ (\tilde{G}/4)(bb^\dagger - b^\dagger b)(f_0^\dagger f_0 - f_0 f_0^\dagger) + \sqrt{2\tilde{V}}(b^\dagger f_0 + f_0^\dagger b) \} \quad , \quad (2.22)$$

onde a base adequada para diagonalizar H_0 pode ser escolhida como sendo

$$\begin{aligned} |0\rangle \quad , \quad b^\dagger |0\rangle \quad , \\ f_0^\dagger |0\rangle \quad \text{e} \quad f_0^\dagger b^\dagger |0\rangle \quad ; \end{aligned} \quad (2.23)$$

em que $|0\rangle$ representa o vácuo.

Uma simetria que simplifica a diagonalização resulta de definir-se um operador de carga

$$Q = \sum_{n=0}^{\infty} (f_n^\dagger f_n) + (b^\dagger b) \quad , \quad (2.24)$$

que comuta com H_0 e H_N em geral, diminuindo a ordem das matrizes a serem diagonalizadas; assim, utilizando a base definida por (2.23), pode-se diagonalizar H_0 , que é uma matriz de ordem 4, por matrizes de ordem menor (ver Tabela II).

TABELA II. Autovalores e autovetores de H_0 no processo de diagonalização iterativa do Hamiltoniano de Vigman-Finkel'shtein. O estado $|0\rangle$ corresponde ao vácuo.

Carga ^a	Autovalores	Autovetores
-1	$(\tilde{G}/2 + \sqrt{2\tilde{V}})/\Lambda^{1/2}$	$ 0\rangle$
0	$(2\sqrt{2\tilde{V}})/\Lambda^{1/2}$	$(1/\sqrt{2})(f_0^\dagger + b^\dagger) 0\rangle$
0	0	$(1/\sqrt{2})(f_0^\dagger - b^\dagger) 0\rangle$
1	$(\tilde{G}/2 + \sqrt{2\tilde{V}})/\Lambda^{1/2}$	$f_0^\dagger b^\dagger 0\rangle$

^a O índice de carga zero indica o subespaço com o menor autovalor. Os subespaços diferentes de zero assumem valores relativos a este.

Na diagonalização do Hamiltoniano H_{N+1} escolhe-se uma base formada pelos autoestados da diagonalização de H_N combinados com o operador f_{N+1} que surge do segundo termo da Eq. (2.21). Por praticidade, a nova base é identificada pelo tipo—indicado por conter o operador f_{N+1} (tipo = 1) ou não (tipo = 0)—pela carga e pela iteração envolvida. Denominando $|Q, N\rangle_l$ o l -ésimo autoestado de carga Q em H_N , cada elemento da base para diagonalizar H_{N+1} será definido por

$$\begin{aligned} |\text{tipo}=0, Q, N+1\rangle_l &= |Q, N\rangle_l \quad \text{e} \\ |\text{tipo}=1, Q, N+1\rangle_l &= f_{N+1}^\dagger |Q, N\rangle_l \end{aligned} \quad (2.25)$$

Para diagonalizar H_1 do Hamiltoniano descrito pela Eq. (2.19) a base conterà 8 elementos formados da expressão (2.25) (ver Tabela III); dessa forma, os elementos de matriz são obtidos por $\langle t, Q, N+1 | H_{N+1} | t', Q, N+1 \rangle$ utilizando a Eq. (2.21), sendo a matriz diagonalizada numericamente. Repete-se os procedimentos a cada iteração $N+1$ até o limite desejado.

TABELA III. Base para diagonalizar o Hamiltoniano H_1 no processo de diagonalização iterativa do Hamiltoniano de Vigman-Finkel'shtein. Na representação por índice tem-se $|\text{tipo}, \text{carga}, \text{iteração}\rangle$ e o estado $|0\rangle$ corresponde ao vácuo.

Carga	Índices	Base
0	$ 0, 0, 1\rangle_1$	$ 0\rangle$
	$ 0, 1, 1\rangle_1$	$(1/\sqrt{2})(f_0^\dagger + b^\dagger) 0\rangle$
1	$ 0, 1, 1\rangle_2$	$(1/\sqrt{2})(f_0^\dagger - b^\dagger) 0\rangle$
	$ 1, 1, 1\rangle_1$	$f_1^\dagger 0\rangle$
2	$ 0, 2, 1\rangle_1$	$f_0^\dagger b^\dagger 0\rangle$
	$ 1, 2, 1\rangle_1$	$(1/\sqrt{2})f_1^\dagger(f_0^\dagger + b^\dagger) 0\rangle$
	$ 1, 2, 1\rangle_2$	$(1/\sqrt{2})f_1^\dagger(f_0^\dagger - b^\dagger) 0\rangle$
3	$ 1, 3, 1\rangle_1$	$f_1^\dagger f_0^\dagger b^\dagger 0\rangle$

É importante considerar que em cada iteração o número de estados é duplicado, de modo que na N -ésima iteração teremos 2^{N+2} elementos; em termos práticos, na iteração 7 tem-se uma matriz 512×512 para diagonalizar. É certo que a simetria determinada por (2.24) diminui consideravelmente a ordem das matrizes, mas, sendo o número de iterações N normalmente superior a 20, as diagonalizações para alguns subespaços se tornam impraticáveis. A solução está em desprezar as energias mais altas que uma energia ϵ_{max} relativa ao nível de Fermi. Esta aproximação é adequada pois estamos interessados nas propriedades do sistema a temperaturas próximas de zero, e devido ao fator de Boltzmann, energias altas pouco contribuem para médias termodinâmicas.

A descrição do processo de diagonalização facilita compreender como os resultados foram obtidos. A próxima seção discute alguns resultados do modelo de Vigman-Finkelstein associado ao modelo Kondo de uma impureza.

2.4 - RESULTADOS

Foi descrito na seção anterior o processo de diagonalização numérica do modelo Vigman-Finkelstein, realizado iterativamente e que resulta em pontos fixos após um número grande de iterações. Nesta seção veremos resultados qualitativos do trabalho de Wilson [8] sobre o modelo Kondo de uma impureza, e assim, ao final desta, entendermos os resultados com o Hamiltoniano H_{VP} .

Para melhor compreender os valores obtidos é bom acompanharmos o que acontece fisicamente com um modelo idealizado, muito próximo do real, de uma liga metálica diluída, ao mesmo tempo que analisamos os dados numéricos. Num modelo de liga magnética diluída, vimos que em temperaturas altas—o que corresponde às iterações iniciais na renormalização numérica—a suscetibilidade magnética devida à impureza indica resultados de momento livre (lei de Curie), ou seja, $J = 0$ no modelo Kondo. Nos resultados numéricos para os autovalores, vemos um conjunto de pontos que convergem nas iterações iniciais. No trabalho de Wilson, o conjunto destes é chamado de *ponto fixo para $J = 0$* .

Reduzindo a temperatura—aumentando o número de iterações na renormalização numérica—vemos que gradativamente a suscetibilidade magnética desvia-se da lei de

Curie, indicando uma interação dos momentos magnéticos com a banda de condução, correspondente a $J \neq 0$. Numericamente vemos que os pontos passam a desviar-se dos pontos iniciais, sem uma convergência específica; esta é a região de *crossover*, intermediária entre pontos fixos de caráter distintos.

Para temperaturas baixas, especificamente $T \ll T_K$, o valor da suscetibilidade fica constante, indicando que o momento magnético está sob forte interação, com um comportamento constante; isto ocorre devido ao acoplamento singleto entre banda de condução e momento localizado, não permitindo interação deste com campos magnéticos externos. Os resultados numéricos mostram um novo ponto fixo, diferente dos obtidos nas primeiras iterações, e que permanecem indefinidamente pelas iterações seguintes. Wilson o denominou *ponto fixo* para $J = -\infty$.

Os resultados na região de *crossover* surgem para temperaturas próximas de T_K , onde há décadas é conhecido o efeito Kondo para resistividade em ligas magnéticas diluídas; esta região é intermediária entre as regiões de acoplamento fraco ($J = 0$) e forte ($J = -\infty$). A visão do grupo de renormalização numérico pode ser mais detalhada: na região de acoplamento fraco as autovalores indicam um comportamento de pontos fixos. Na região de *crossover*, J surge nos resultados multiplicando um operador *relevante*: para cada iteração sua interferência nos resultados é maior; paralelamente, com a redução da temperatura, visualizam-se escalas de energia mais próximas do nível de Fermi, limitadas pela energia adimensional ϵ_{max} (definida na pág 29); sendo o termo associado a J característico de acoplamento, ele transforma f_0 e b em um nível ligante e outro anti-ligante; com isto, no momento em que o nível anti-ligante sair da abrangência da escala (isto é, para T tais que sua energia seja muito superior a $k_B T$), tem-se o comportamento obtido para $J = -\infty$, região de acoplamento forte.

Os resultados numéricos são melhor acompanhados no modelo Kondo para valores de J pequenos (Wilson utilizou $J = 0.055D$) e $\Lambda \leq 3$; utilizar J e Λ maiores aceleram a passagem entre os acoplamentos forte e fraco, dificultando a interpretação (um fator Λ maior indica um aumento na escala em que a temperatura diminui a cada iteração).

O Hamiltoniano de Vigman-Finkel'shtein, quando associado ao modelo Kondo, embora mostrando um comportamento semelhante ao descrito acima, permite reduzir o tempo de

computação. Características particulares dos resultados serão vistas na Seção 4.2 (onde estes são reproduzidos através de outro modelo, com parâmetros adequados), após o estudo de pontos fixos, que veremos no próximo capítulo. A Fig. 6 mostra os resultados obtidos pela diagonalização de H_{VF} usando a última sequência de parâmetros indicada na Tabela I, pág. 19; a Tabela IV mostra os autovalores obtidos na iteração $N = 21$, com os mesmos parâmetros, em que as energias são medidas relativas ao estado fundamental, os estados de muitos corpos são obtidos preenchendo-se níveis discretos, como veremos em exemplos a partir da Seção 3.3.a.

FIG. 6. Resultados numéricos obtidos pela diagonalização do Hamiltoniano de Vigman-Finkel'shtein, no qual $V = 0.16D$, $G = 0.51916D$ e $\Lambda = 3$, para o primeiro nível de energia do subespaço $Q = -1$; somente as iterações ímpares são mostradas. Da mesma forma que no modelo Kondo, podem-se distinguir as regiões de acoplamento fraco (iteração $N \leq 3$), *crossover* ($3 < N < 15$) e acoplamento forte ($N \geq 15$).

TABELA IV. Alguns autovalores na diagonalização do H_{VF} para a iteração $N = 21$ com $V = 0.16D$, $G = 0.51916D$ e $\Lambda = 3$. As energias são construções de muitos corpos dos níveis obtidos e estão com valor relativo ao estado fundamental da iteração, indicado pela carga zero (Ref. [13]).

Carga	Autovalores					
-1	1.69382	5.17974	6.87357	8.56739	12.05331	15.44270
0	0.00000	1.69382	3.38765	5.17974	6.87357	6.87357
1	0.00000	1.69382	3.38765	5.17974	6.87357	6.87357
2	1.69382	5.17974	6.87357	8.56739	12.05331	15.44270

A descrição detalhada neste capítulo da associação do modelo Kondo de uma impureza com o modelo de Vigman-Finkelshtein foi importante pois, além de indicar o caminho para uma nova associação (desta vez entre o Hamiltoniano Kondo de duas impurezas com o Hamiltoniano de Falicov e Kimball para obter resultados em alguns casos especiais, como veremos no Capítulo 4), mostrou os procedimentos necessários para a diagonalização por meio do grupo de renormalização, que serão necessários no capítulo seguinte para outro modelo.

Capítulo 3

3.1 - MODELO DE FALICOV E KIMBALL RESTRITO

Atualmente somente alguns modelos de muitos corpos são resolvidos exatamente e assim é comum utilizarem-se processos numéricos na obtenção de propriedades físicas dos modelos existentes. Este Capítulo descreve o processo para a diagonalização, por meio do grupo de renormalização numérico, do modelo de Falicov e Kimball restrito a duas impurezas; resultados para alguns casos especiais são discutidos.

Um dos interesses atuais no modelo é o estudo da valência flutuante [7] em compostos de Terras Raras como SmS , onde ocorre a hibridização de orbitais s com orbitais f . O modelo considera também a interação coulombiana entre elétrons de condução e buracos localizados, o que Hamiltonianos como o de Anderson desprezam. Em especial, neste trabalho, vamos associá-lo ao modelo Kondo de duas impurezas, o que será visto no Capítulo 4.

Vimos no Capítulo 1 que o Hamiltoniano de Falicov e Kimball foi definido com uma banda de condução e vários níveis localizados, que interagem com os elétrons de condução sem possibilitar transferência. Complementando o modelo original foi acrescentado um termo de hibridização entre nível localizado e banda de condução—como o termo associado ao parâmetro V no modelo H_{VF} do capítulo anterior—o que possibilita o estudo da valência flutuante (não tratado especificamente neste trabalho). Também restringem-se os níveis localizados a dois, o que juntamente com a hibridização de níveis localizados e elétrons de condução, viabiliza a associação com o modelo Kondo de duas impurezas. Com esta definição, a menos do termo de interação coulombiana entre impureza e banda de condução, o Hamiltoniano assume uma identidade com o modelo de Anderson quando

neste o potencial de interação entre elétrons no nível localizado é infinito.

Ao considerar no modelo a banda de condução composta de orbitais s e as impurezas por orbitais d ou f , estabelece-se uma simetria esférica em volta de cada nível localizado; dessa forma, o Hamiltoniano de Falicov e Kimball restrito a duas impurezas, tratado neste trabalho, pode ser descrito como

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} + V \sum_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}}^{\dagger} \exp^{i\mathbf{k}\mathbf{R}/2} d_1 + c_{\mathbf{k}}^{\dagger} \exp^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}/2} d_2 + \text{H.c.}) + \\ + \epsilon_d (d_1^{\dagger} d_1 + d_2^{\dagger} d_2) + \\ + G \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} (c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} \exp^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}/2} d_1 d_1^{\dagger} + c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'} \exp^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}/2} d_2 d_2^{\dagger}) \quad , \quad (3.1)$$

onde os operadores d_1 e d_2 destroem elétrons nos níveis localizados em $-\frac{\mathbf{R}}{2}$ e $\frac{\mathbf{R}}{2}$ respectivamente e $c_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ cria um elétron no estado $\mathbf{k}$ na banda de condução. Com os níveis da banda de condução podemos definir estados de Wannier associados a cada impureza; assim

$$\Psi(\mathbf{R}/2) = \sum_{\mathbf{k}} \exp^{i\mathbf{k}\mathbf{R}/2} c_{\mathbf{k}} \quad \text{e} \quad \Psi(-\mathbf{R}/2) = \sum_{\mathbf{k}} \exp^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}/2} c_{\mathbf{k}}, \quad (3.2)$$

ficando então a Eq. (3.1) como sendo

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} + V [\Psi^{\dagger}(-\mathbf{R}/2) d_1 + \Psi^{\dagger}(\mathbf{R}/2) d_2 + \text{H.c.}] + \\ + \epsilon_d (d_1^{\dagger} d_1 + d_2^{\dagger} d_2) + \\ + G [\Psi^{\dagger}(-\mathbf{R}/2) \Psi(-\mathbf{R}/2) d_1 d_1^{\dagger} + \Psi^{\dagger}(\mathbf{R}/2) \Psi(\mathbf{R}/2) d_2 d_2^{\dagger}] \quad . \quad (3.3)$$

Nesse modelo com duas impurezas, não é possível manter a simetria esférica para uma base centrada fixa em uma das impurezas, como a utilizada no modelo de Vigman e Finkelshtein. É necessário encontrar outra simetria que represente adequadamente a Eq. (3.3); com esse intuito, definem-se os operadores fermiônicos

$$f_{0\pm} = \frac{1}{2^{3/2} A_{\pm}} [\Psi(\mathbf{R}/2) \pm \Psi(-\mathbf{R}/2)] \quad (3.4) \\ = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{\exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}/2) \pm \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{R}/2)}{2A_{\pm}} \right] c_{\mathbf{k}} \\ = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}}^{(\pm)} \quad ,$$

onde

$$C_{\mathbf{k}}^{(+)} = \frac{1}{A_{+}} \int \frac{d\Omega}{4\pi} \cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}{2}\right) c_{\mathbf{k}} \quad \text{e} \quad (3.5)$$

$$C_{\mathbf{k}}^{(-)} = \frac{i}{A_{-}} \int \frac{d\Omega}{4\pi} \sin\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}{2}\right) c_{\mathbf{k}} \quad , \quad (3.6)$$

em que $A_{\pm}$ são coeficientes de normalização, determinados no cálculo dos anticomutadores:

$$\{C_k^{(\pm)}, C_{k'}^{(\pm)\dagger}\} = \frac{1}{2A_{\pm}^2} [1 \pm \frac{\text{sen}(kR)}{kR}] \delta(k - k') \quad , \quad (3.7)$$

o que impõe

$$A_{\pm}^2 = \frac{1}{2} [1 \pm \frac{\text{sen}(k_F R)}{k_F R}] \quad (3.8)$$

Como nosso interesse está nas propriedades do sistema em baixas energias, e seguindo precedentes empregados em outros trabalhos [17, 27], substitui-se k pelo momento de Fermi (ou k_F) no lado direito da igualdade; dessa forma

$$\begin{aligned} f_{0+} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k C_k^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{2}A_+} \sum_k \int \frac{d\Omega}{4\pi} \cos(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}{2}) c_k \Big|_{k=k_F} \quad e \\ f_{0-} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k C_k^{(-)} = \frac{i}{\sqrt{2}A_-} \sum_k \int \frac{d\Omega}{4\pi} \text{sen}(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}{2}) c_k \Big|_{k=k_F} \end{aligned} \quad (3.9)$$

Invertendo a Eq. (3.5) obtemos

$$\begin{aligned} \Psi(R/2) &= \sqrt{2}(A_+ f_{0+} + A_- f_{0-}) \quad e \\ \Psi(-R/2) &= \sqrt{2}(A_+ f_{0+} - A_- f_{0-}) \quad , \end{aligned} \quad (3.10)$$

sendo então possível reescrever o Hamiltoniano do modelo, após algumas simplificações, como

$$\begin{aligned} H &= \sum_k \epsilon(k) c_k^\dagger c_k + \\ &+ \sqrt{2}V[A_+ f_{0+}^\dagger (d_1 + d_2) + A_- f_{0-}^\dagger (d_1 - d_2) + \text{H.c.}] + \\ &+ \epsilon_d(d_1^\dagger d_1 + d_2^\dagger d_2) + \\ &+ 2G[(A_+^2 f_{0+}^\dagger f_{0+} + A_-^2 f_{0-}^\dagger f_{0-})(d_1 d_1^\dagger + d_2 d_2^\dagger) + \\ &+ A_+ A_- (f_{0+}^\dagger f_{0-} + f_{0-}^\dagger f_{0+})(d_1 d_1^\dagger - d_2 d_2^\dagger)] \end{aligned} \quad (3.11)$$

Ao inverter a Eq. (3.6), representa-se a banda de condução em termo dos operadores $C_k^{(\pm)}$, e obtém-se

$$\begin{aligned} c_k &= \frac{1}{A_+} \int \frac{d\Omega}{4\pi} \cos(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}{2}) C_k^{(+)} + \\ &\frac{i}{A_-} \int \frac{d\Omega}{4\pi} \text{sen}(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}{2}) C_k^{(-)} \end{aligned} \quad (3.12)$$

Dessa forma, temos o termo cinético da Eq. (3.11) como

$$\sum_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k}) \mathbf{c}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \mathbf{c}_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k}) \int \frac{d\Omega}{4\pi} \left(\frac{1}{A_+^2} \cos^2\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}{2}\right) C_{\mathbf{k}}^{(+)\dagger} C_{\mathbf{k}}^{(+)} + \right. \quad (3.13)$$

$$\left. + \frac{1}{A_-^2} \sin^2\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}{2}\right) C_{\mathbf{k}}^{(-)\dagger} C_{\mathbf{k}}^{(-)} + \dots \right) \quad (3.14)$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k}) (C_{\mathbf{k}}^{(+)\dagger} C_{\mathbf{k}}^{(+)} + C_{\mathbf{k}}^{(-)\dagger} C_{\mathbf{k}}^{(-)}) \quad (3.15)$$

Como vimos no Capítulo 2, será conveniente trabalhar com a banda de condução de acordo com o método definido por Wilson [8], em que esta é discretizada logaritmicamente utilizando um parâmetro Λ e associada a uma construção de Lanczos que, de acordo com a nova simetria, compreende uma representação distinta em termos de $f_{n\pm}$'s (ver Apêndice A). Para expressar as impurezas, podemos associá-las a operadores fermiônicos $d_{\pm} = (d_1 \pm d_2)/\sqrt{2}$, e assim o Hamiltoniano passa a ser descrito como

$$\begin{aligned} H = & \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} D \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n^2 (f_{n+}^{\dagger} f_{(n+1)+} + f_{n-}^{\dagger} f_{(n+1)-} + \text{H.c.}) + \\ & + 2V(A_+ f_{0+}^{\dagger} d_+ + A_- f_{0-}^{\dagger} d_- + \text{H.c.}) + \epsilon_d(d_+^{\dagger} d_+ + d_-^{\dagger} d_-) + \\ & + 2G[(A_+^2 f_{0+}^{\dagger} f_{0+} + A_-^2 f_{0-}^{\dagger} f_{0-})(d_+ d_+^{\dagger} + d_- d_-^{\dagger}) + \\ & + A_+ A_- (f_{0+}^{\dagger} f_{0-} + f_{0-}^{\dagger} f_{0+})(d_+ d_-^{\dagger} + d_- d_+^{\dagger})] \end{aligned} \quad (3.16)$$

Analisando a Eq. (3.16), vemos que, sendo a base centrada entre as impurezas, o Hamiltoniano tem simetria de paridade, demonstrada trocando $-\mathbf{R}/2$ por $\mathbf{R}/2$ e vice-versa. Assim é possível ver o modelo como duas partes distintas, nominalmente de paridade negativa e positiva. A transferência de elétrons de uma impureza a outra seria realizada sempre via banda de condução pelo termo associado ao parâmetro V , que hibridiza os níveis de condução e impureza de mesma paridade. Os termos associados a G indicam um potencial espalhador das funções de onda dos elétrons de condução, sendo que o último termo mostra que uma inversão de paridade na banda de condução é acompanhada por uma inversão na impureza. Este é um modelo de muitos corpos cuja diagonalização analítica ainda não foi possível; no entanto, ele pode ser tratado numericamente com o grupo de renormalização, o que veremos na próxima seção.

3.2 - DIAGONALIZAÇÃO ITERATIVA

Foi visto no Capítulo 1 o processo de diagonalização iterativa pelo grupo de renormalização numérico com o Hamiltoniano de Vigman-Finkel'shtein. Nesta seção, o mesmo

procedimento será utilizado para o Hamiltoniano definido pela Eq. (3.16) onde, devido à maior complexidade deste, alguns detalhes complementares serão mostrados. O objetivo do procedimento é obter pontos fixos para interpretar os resultados do modelo; posteriormente, estes pontos fixos poderão auxiliar no cálculo de médias termodinâmicas ou na medida de propriedades dinâmicas como fotoemissão. De acordo com o método, define-se um Hamiltoniano H_N para diagonalização iterativa; assim, pela Eq. (3.16), temos

$$H_N = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \left\{ \Lambda^{z-1} \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_n^z (f_{n+}^\dagger f_{(n+1)+} + f_{n-}^\dagger f_{(n+1)-} + \text{H.c.}) + \right. \\ + 2\tilde{V}(A_+ f_{0+}^\dagger d_+ + A_- f_{0-}^\dagger d_- + \text{H.c.}) + \tilde{\epsilon}_d (d_+^\dagger d_+ + d_-^\dagger d_-) + \\ + 2\tilde{G}[(A_+^2 f_{0+}^\dagger f_{0+} + A_-^2 f_{0-}^\dagger f_{0-})(d_+ d_+^\dagger + d_- d_-^\dagger) + \\ \left. + A_+ A_- (f_{0+}^\dagger f_{0-} + f_{0-}^\dagger f_{0+})(d_+ d_-^\dagger + d_- d_+^\dagger)] \right\} \quad , \quad (3.17)$$

em que

$$\tilde{V} = \frac{2V}{(1 + \Lambda^{-1})D} \frac{1}{\Lambda^{1-z}} \quad , \\ \tilde{G} = \frac{2G}{(1 + \Lambda^{-1})D} \frac{1}{\Lambda^{1-z}} \quad \text{e} \\ \tilde{\epsilon}_d = \frac{2\epsilon_d}{(1 + \Lambda^{-1})D} \frac{1}{\Lambda^{1-z}} \quad (3.18)$$

O Hamiltoniano recursivo H_{N+1} , definido a partir de H_N , contém um termo complementar aos dois conjuntos de operadores f_{n+} 's e f_{n-} 's da banda de condução, definidos na Eq. (3.17):

$$H_{N+1} = \Lambda^{1/2} H_N + \xi_N^z (f_{N+}^\dagger f_{(N+1)+} + f_{N-}^\dagger f_{(N+1)-} + \text{H.c.}) \quad , \quad (3.19)$$

em que $\xi_N^z = \Lambda^{z-1+\frac{N}{2}} \epsilon_N^z$.

A Eq. (3.17) comuta com operadores Q e P que determinam carga total e paridade relativa definidos por

$$Q = \sum_{n=0}^{\infty} (f_{n+}^\dagger f_{n+} + f_{n-}^\dagger f_{n-}) + (d_+^\dagger d_+ + d_-^\dagger d_-) \quad \text{e} \quad (3.20)$$

P sendo o sinal da multiplicação de índice dos operadores em cada elemento da base; analiticamente poderia ser definido como a somatória da combinação dos operadores número $\{ d_{\pm}^\dagger d_{\pm}, f_{0\pm}^\dagger f_{0\pm}, f_{1\pm}^\dagger f_{1\pm}, \dots \}$ em grupos de um, dois, $\dots$, N termos, com $N \rightarrow \infty$; o vácuo, por definição, tem sinal positivo. A comutação da Eq. (3.18) com Q

e P diminui a ordem das matrizes na diagonalização, como podemos ver no exemplo a seguir: o processo de diagonalização inicia com a definição de H_0 e a escolha da base para diagonalizá-lo; sendo H_0 o Hamiltoniano sem o termo cinético da banda de condução, temos

$$\begin{aligned}
 H_0 = \Lambda^{-\frac{1}{2}} \{ & 2\tilde{V}(A_+ f_{0+}^\dagger d_+ + A_- f_{0-}^\dagger d_- + \text{H.c.}) + \tilde{\epsilon}_d(d_+^\dagger d_+ + d_-^\dagger d_-) + \\
 & + 2\tilde{G}[(A_+^2 f_{0+}^\dagger f_{0+} + A_-^2 f_{0-}^\dagger f_{0-})(d_+ d_+^\dagger + d_- d_-^\dagger) + \\
 & + A_+ A_- (f_{0+}^\dagger f_{0-} + f_{0-}^\dagger f_{0+})(d_+ d_-^\dagger + d_- d_+^\dagger)] \} \quad (3.21)
 \end{aligned}$$

Projeta-se o Hamiltoniano numa base de 16 elementos construída com os operadores f_{0+} , f_{0-} , d_+ e d_- e, auxiliado das simetrias determinadas pelos operadores Q e P , diagonaliza-se em cada subespaço. A Tabela I mostra os autovalores obtidos.

TABELA I. Autovalores de H_0 no processo de diagonalização iterativa do Hamiltoniano de Falicov e Kimball. A paridade mostrada na tabela indica o sinal obtido ao utilizar o operador P [definido pela Eq. (3.20)] no subespaço analisado.

Carga	Paridade	Autovalores ^a
0	+	0
1	+	$[4\tilde{G}A_+^2 + \tilde{\epsilon}_d \pm \sqrt{(4\tilde{G}A_+^2 - \tilde{\epsilon}_d)^2 + 16\tilde{V}^2 A_+^2}]/(2\Lambda^{1/2})$
	-	$[4\tilde{G}A_-^2 + \tilde{\epsilon}_d \pm \sqrt{(4\tilde{G}A_-^2 - \tilde{\epsilon}_d)^2 + 16\tilde{V}^2 A_-^2}]/(2\Lambda^{1/2})$
2	+	$[2\tilde{G} + 2\tilde{\epsilon}_d \pm \sqrt{(2\tilde{G}(A_+^2 - A_-^2)^2 + 16\tilde{G}^2 A_+ A_-}]/(2\Lambda^{1/2})$
	-	$\epsilon_1, \quad \epsilon_2, \quad \epsilon_3, \quad \epsilon_4$
3	+	$[2\tilde{G} + 3\tilde{\epsilon}_d \pm \sqrt{(2\tilde{G} - \tilde{\epsilon}_d)^2 + 16\tilde{V}^2 A_+^2}]/(2\Lambda^{1/2})$
	-	$[2\tilde{G} + 3\tilde{\epsilon}_d] \pm \sqrt{(2\tilde{G} - \tilde{\epsilon}_d)^2 + 16\tilde{V}^2 A_-^2}]/(2\Lambda^{1/2})$
4	+	$2\tilde{\epsilon}_d/(2\Lambda^{1/2})$

^a Os autovalores ϵ_1 , ϵ_2 , ϵ_3 e ϵ_4 são obtidos na diagonalização numérica de uma matriz 4x4.

O Hamiltoniano H_1 é gerado usando a expressão (3.19), e novamente escolhe-se uma base para diagonalizá-lo. A base conterà 64 estados, formados combinando-se os autoestados de H_0 , representados por $|Q, P, 0\rangle_l$, com os operadores f_{1+} e f_{1-} , sendo distintos pelos subespaços associados por carga, paridade. Cada elemento de base, indicado por $|$ tipo, carga, paridade, iteração $\rangle_{\text{elemento}}$, é formado do autoestado $|Q, P, 0\rangle_l$, onde

$$\begin{aligned} |Q, P, 0\rangle_l &= |0, Q, P, 1\rangle_l \quad , \\ f_{1+}^\dagger |Q, P, 0\rangle_l &= |1, Q+1, P', 1\rangle_l \quad , \\ f_{1-}^\dagger |Q, P, 0\rangle_l &= |2, Q+1, P', 1\rangle_l \quad \text{e} \\ f_{1+}^\dagger f_{1-}^\dagger |Q, P, 0\rangle_l &= |3, Q+2, P', 1\rangle_l \quad . \end{aligned} \quad (3.22)$$

A diagonalização do Hamiltoniano H_1 , projetado na base criada por (3.22), é feita numericamente; dos autoestados de H_1 gera-se a base de H_2 e assim sucessivamente. O número de elementos na base de cada iteração é 4^{N+2} , indicando que mesmo divididos em subespaços de carga e paridade, as matrizes acabam exigindo tempo e memória de computador não disponíveis; novamente, como foi visto na Seção 2.3, escolhe-se em cada subespaço os autovalores e autoestados associados de mais baixa energia (visto o interesse nas propriedades em temperaturas baixas, onde as energias mais altas, de acordo com o fator de Boltzmann, não contribuem). Neste trabalho as matrizes são no máximo de ordem 100 para cada subespaço e o número de iterações total N não excede a 30 (normalmente os pontos fixos são obtidos após 25 iterações), suficientes para os resultados obtidos.

Os pontos fixos encontrados para o modelo requerem cuidado na interpretação, pois no processo de diagonalização iterativa vários resultados são possíveis dependendo do valor dos parâmetros: alguns pontos fixos são característicos de elétrons livres, outros de um modelo com potencial espalhador (H_{FK} com $V = 0$ e $\epsilon_d = 0$), ou mesmo de um modelo de nível ressonante (H_{FK} com $G = 0$). A identificação dessas situações é possível quando estuda-se cada caso em particular, como veremos nas próximas seções.

3.3 - CASOS ESPECIAIS

Vimos na Seção 2.4, o exemplo do modelo Kondo de uma impureza, em que os valores numéricos desvelam a interpretação física do modelo em estudo. Também os termos do Hamiltoniano de Falicov e Kimball determinam comportamentos de pontos fixos distintos que devem ser estudados separadamente. Alguns casos são analisados nas seções seguintes.

3.3.a - Banda livre

Um caso simples é o estudo dos pontos fixos obtidos do termo cinético da banda de condução, ou seja, quando V , G e ϵ_d são iguais a zero na Eq. (3.17); assim, temos o Hamiltoniano H_N como

$$H_N = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \left\{ \Lambda^{z-1} \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_n^z (f_{n+}^\dagger f_{(n+1)+} + f_{n-}^\dagger f_{(n+1)-} + \text{H.c.}) \right\} \\ = H_+ + H_- \quad , \quad (3.23)$$

onde

$$H_\pm = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \left\{ \Lambda^{z-1} \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_n^z (f_{n\pm}^\dagger f_{(n+1)\pm} + \text{H.c.}) \right\} \quad , \quad (3.24)$$

e na qual H_+ e H_- comutam entre si. Sendo H_N um Hamiltoniano quadrático, pode-se representá-lo de outra forma: escolher vetores $F_\pm$ em que

$$F_\pm = (f_{0\pm}, f_{1\pm}, \dots, f_{N\pm}), \quad (3.25)$$

o que possibilita escrever a Eq. (3.23) como

$$H_N = F_+^\dagger [\mathcal{H}_+] F_+ + F_-^\dagger [\mathcal{H}_-] F_- \quad ,$$

onde $\mathcal{H}$ é uma matriz Hermiteana de ordem $N + 1$ cujos elementos são

$$(\mathcal{H})_{n,n+1} = (\mathcal{H})_{n+1,n} = \Lambda^{z-1+\frac{N-1}{2}} \epsilon_n^z \quad (n = 0, 1, \dots, N-1) \quad (3.26)$$

Os resultados da diagonalização numérica estão na Tabela II, separadamente para as iterações ímpares e pares. Vemos uma convergência rápida para um ponto fixo à medida que o número de iterações aumenta.

TABELA II. Autovalores na diagonalização do Hamiltoniano de banda livre no qual $\Delta = 3$, gerando duas bandas simétricas, respectivamente para H_+ e H_- ; somente uma das bandas está representada. Verifica-se uma convergência para pontos fixos nas iterações ímpares e pares à medida que N aumenta.

	Iteração				
	(1)	(3)	(5)	(7)	(9)
η_5^+					81.00000
η_4^+				27.00000	27.00000
η_3^+			9.00000	9.00000	9.00000
η_2^+		2.99804	2.99755	2.99749	2.99749
η_1^+	0.83205	0.80359	0.80044	0.80009	0.80005
η_1^-	-0.83205	-0.80359	-0.80044	-0.80009	-0.80005
η_2^-		-2.99804	-2.99755	-2.99749	-2.99749
η_3^-			-9.00000	-9.00000	-9.00000
η_4^-				-27.00000	-27.00000
η_5^-					-81.00000

	Iteração				
	(2)	(4)	(6)	(8)	(10)
$\hat{\eta}_5^+$					140.29611
$\hat{\eta}_4^+$				46.76537	46.76537
$\hat{\eta}_3^+$			15.58846	15.58846	15.58846
$\hat{\eta}_2^+$		5.19611	5.19610	5.19610	5.19610
$\hat{\eta}_1^+$	1.70318	1.69662	1.69605	1.69576	1.69575
$\hat{\eta}_0$	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
$\hat{\eta}_1^-$	-1.70318	-1.69662	-1.69605	-1.69576	-1.69575
$\hat{\eta}_2^-$		-5.19611	-5.19610	-5.19610	-5.19610
$\hat{\eta}_3^-$			-15.58846	-15.58846	-15.58846
$\hat{\eta}_4^-$				-46.76537	-46.76537
$\hat{\eta}_5^-$					-140.29611

A diagonalização de Hamiltonianos quadráticos como o da Eq. (3.26) mostra os níveis acessíveis para uma iteração. Hamiltonianos de muitos corpos em geral não são quadráticos, mas alguns modelos, como o de Falicov e Kimball estudado neste trabalho, rendem-se à diagonalização pelo menos pelo processo iterativo. No caso quadrático estados de muito corpos, que também podem ser obtidos por diagonalização iterativa, são construídos mais facilmente com o preenchimento de níveis como os que estão na Tabela II; assim, o estado fundamental corresponde a ocupar todos as energias negativas e estados excitados são a transição de elétrons a partir desta configuração (Fig. 1).

FIG. 1. Exemplos de estados de muitos corpos para a iteração $N = 5$ (ver Tabela II). (a) Estado fundamental, (b) e (c) configurações de estados excitados a partir do estado fundamental. ϵ_F é igual a zero e é um estado acessível nas iterações pares.

Vemos que os autovalores podem ser expressos por

$$\eta_j^\pm = \pm \Lambda^{j-1} \quad \text{e} \quad \hat{\eta}_j^\pm = \pm \Lambda^{j-\frac{1}{2}} \quad (j \gg 1) \quad , \quad (3.27)$$

respectivamente para autovalores de iteração ímpar e par, e que os níveis são distribuídos com simetria em torno de $\epsilon_F = 0$. Interpretando os resultados, lembramos que a diagonalização da banda de condução deveria indicar um contínuo de estados; como a banda foi discretizada logaritmicamente por um fator Λ , é natural que este valor seja refletido nos autoestados encontrados; à medida em que $\Lambda \rightarrow 1$, os autoestados tendem para um contínuo de estados. Um caso mais completo, indicado pelo modelo de nível ressonante, será visto na próxima seção.

3.3.b - $G = 0$

Vimos na secção anterior os pontos fixos da banda livre. Outro conjunto de pontos fixos característicos pode ser analisado quando $G = 0$ no Hamiltoniano de Falicov e Kimball restrito a duas impurezas; dessa forma, o identificamos com dois modelos de nível ressonante, que consiste da banda de condução mais um termo, proporcional a V , acoplando o nível localizado (impureza) com os elétrons de condução. Na situação em que $G = 0$ no Hamiltoniano H_N [Eq. 3.17] temos

$$H_N = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \left\{ \Lambda^{z-1} \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_n^z (f_{n+}^\dagger f_{(n+1)+} + f_{n-}^\dagger f_{(n+1)-} + \text{H.c.}) + \right. \\ \left. \tilde{V} (A_+ f_{0+}^\dagger d_+ + A_- f_{0-}^\dagger d_- + \text{H.c.}) + \tilde{\epsilon}_d (d_+^\dagger d_+ + d_-^\dagger d_-) \right\}, \quad (3.28)$$

em que

$$A_\pm^2 = \frac{1}{2}[1 \pm S] \quad \text{e} \quad S = \frac{\text{sen}(k_F R)}{k_F R} \quad (3.29)$$

Novamente H_N é quadrático e separável em dois termos que comutam entre si; assim, escolhendo vetores $F_\pm$ em que

$$F_\pm = (d_\pm, f_{0\pm}, f_{1\pm}, \dots, f_{N\pm}) \quad , \quad (3.30)$$

escreve-se a Eq. (3.28) como

$$H_N = H_+ + H_- \\ = F_+^\dagger [\mathcal{H}_+] F_+ + F_-^\dagger [\mathcal{H}_-] F_- \quad , \quad (3.31)$$

em que $\mathcal{H}_\pm$ é uma matriz Hermitiana tridiagonal de ordem $N+2$ representada por

$$\mathcal{H}_\pm = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \begin{pmatrix} \tilde{\epsilon}_d & 2\tilde{V}A_\pm & 0 & 0 & & 0 \\ 2\tilde{V}A_\pm & 0 & \Lambda^{1-z}\epsilon_0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \Lambda^{1-z}\epsilon_0 & 0 & \Lambda^{1-z}\epsilon_1 & & 0 \\ 0 & 0 & \Lambda^{1-z}\epsilon_1 & 0 & & 0 \\ & \vdots & & & \ddots & \Lambda^{1-z}\epsilon_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \Lambda^{1-z}\epsilon_{N-1} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

Alguns resultados da diagonalização numérica estão na Tabela III para iterações ímpares em que, com a simetria em torno de ϵ_F , somente os níveis não negativos são

mostrados. A Tabela IV mostra estados de muitos corpos obtidos com a diagonalização iterativa, onde a paridade indica a atuação do operador P , definido na Eq. (3.20), sobre cada estado; os autovalores identificam uma distribuição de carga relativa ao estado fundamental, ou seja, de acordo com a ocupação dos níveis na iteração (ver Fig. 2). A resolução analítica para os pontos fixos do modelo de nível ressonante [13] mostra que, no caso das iterações ímpares, os autovalores $\eta_{j\pm}^+$ (em que $\pm$ determina H_+ ou H_-) positivos (os negativos terão mesmo valor com sinal oposto) são expressos por $\eta_{j\pm}^+ = \Lambda^{j-1+\gamma_{\pm}}$, em que

$$\gamma_{\pm} = \frac{1}{\pi} \arctan \left[\frac{2\pi(VA_{\pm})^2/A_{\Lambda}}{2\epsilon_d - (1 + \Lambda^{-1})D\Lambda^{-(N-1)/2+1-\epsilon}\eta_{j\pm}^+} \right] \quad , \tag{3.33}$$

onde

$$A_{\Lambda} = \frac{1 + \Lambda^{-1} \ln \Lambda}{1 - \Lambda^{-1}} \frac{1}{2} \tag{3.34}$$

TABELA III. Alguns autovalores na diagonalização do Hamiltoniano de Falicov e Kimball, restrito a duas impurezas, no caso em que $G = 0$, $S = 0.5$, $\epsilon_d = 0$ e $V = 0.10D$ para $\Lambda = 3$, gerando duas bandas distintas, respectivamente para H_+ e H_- . Vemos que os valores das bandas convergem para os mesmos pontos fixos.

		Iteração					
		(5)	(11)	(17)	(23)	(29)	(35)
H_+	η_{4+}^+		31.78173	45.09444	46.69992	46.76294	46.76528
	η_{3+}^+	9.20499	12.38113	15.39541	15.58117	15.58819	15.58845
	η_{2+}^+	3.19690	4.70165	5.17437	5.19529	5.19607	5.19609
	η_{1+}^+	1.06842	1.63002	1.69319	1.69566	1.69575	1.69575
	η_{0+}^+	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
H_-	η_{4-}^+		28.76012	42.25993	46.56686	46.75797	46.76510
	η_{3-}^+	9.06779	10.57409	15.02345	15.56630	15.58763	15.58843
	η_{2-}^+	3.06508	4.11766	5.13077	5.19363	5.19600	5.19609
	η_{1-}^+	0.91049	1.51736	1.68797	1.69546	1.69574	1.69575
	η_{0-}^+	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000

FIG. 2. Estados de muitos corpos com carga zero para a iteração $N = 5$, no caso simétrico em que $S = 0$, ou seja $A_+ = A_-$ (na Tabela III mostra-se um caso assimétrico): (a) estado fundamental; (b) e (c) estados excitados com paridade negativa, indicado pela atuação do operador P ; (d) e (e) estados excitados com paridade positiva.

TABELA IV. Estados de muitos corpos obtidos pela diagonalização iterativa do modelo de Falicov e Kimball, restrito a duas impurezas, no caso em que $G = 0$, $S = 0$, $\epsilon_d = 0$, $V = 0.226D$ e $\Lambda = 3$, na iteração $N = 25$. Os estados associam uma distribuição de carga para os níveis de H_+ e H_- relativas ao estado fundamental, em que a paridade determina o sinal obtido com o operador P sobre o estado. Entre parênteses está a degenerescência da energia para o subespaço, distinto por carga e paridade.

Carga	Paridade	Autovalores				
-1	-	1.69575	3.39149	5.08724	5.19603	6.89178 (4)
	+	1.69575	3.39149	5.08724	5.19603	6.89178 (4)
0	-	0.00000	1.69575 (2)	3.39149 (3)	5.08724 (2)	5.19603 (2)
	+	1.69575 (2)	3.39149 (2)	5.08724 (2)	5.19603 (2)	6.78299
1	-	0.00000	1.69575 (2)	3.39149 (4)	5.08724 (2)	5.19603 (2)
	+	0.00000	1.69575 (2)	3.39149 (4)	5.08724 (2)	5.19603 (2)
2	-	1.69575 (2)	3.39149 (2)	5.08724 (2)	5.19603 (2)	6.78299
	+	0.00000	1.69575 (2)	3.39149 (3)	5.08724 (2)	5.19603 (2)

Vemos na Eq. (3.33) que, à medida que o número N de iterações cresce, e em especial quando $N \gg j$, temos $\gamma_{\pm} \approx 1/2$; com isso, $\eta_{\pm}^{\pm} = \Lambda^{j-1/2}$, correspondendo aos pontos fixos da banda livre nas iterações pares; a mesma inversão ocorre com as iterações pares de H_{FK} com $G = 0$, em que os pontos fixos são os da iteração ímpar na banda livre. Termos como os associados ao parâmetro V do modelo de H_{FK} e $J_{\perp}$ no modelo Kondo de uma impureza caracterizam este comportamento: mostram uma mudança de pontos fixos, indicada pela inversão da fase, de $\pi/2$, nos modelos a baixas temperaturas, como foi visto nos resultados da Seção 2.4. Isso ocorre porque, no processo de diagonalização iterativa, com a mudança das escalas, o termo proporcional a V surge como um operador *relevante*, e para $N \rightarrow \infty$, conduz ao limite $V \rightarrow \infty$; com um acoplamento forte entre os estados $d_{\pm}$ e $f_{0\pm}$, este último se desacopla dos outros estados $f_{n\pm}$ da banda, ficando cada porção da banda defasada de $\pi/2$.

Nesse caso particular em que $G = 0$ em H_{FK} , temos que o único vínculo entre H_{+} e H_{-} está nos fatores $A_{\pm}$, relacionados com a distância entre impurezas. Em especial, quando $A_{+} = A_{-}$ ($S = 0$), a distância será infinita e cada autovalor obtido pela diagonalização direta da Eq. (3.32) seria degenerado (ver Tabela IV). Sendo $\Gamma = \pi \rho V^2$ a frequência de transferência de elétrons, (calculada com a regra de ouro de Fermi, na qual ρ é a densidade de estados ao nível de Fermi) entre o nível localizado e banda de condução, temos que à medida que aproximamos os níveis localizados (isto é, aumentamos S), A_{+} e A_{-} quebram a degenerescência entre os canais par e ímpar da banda, aumentando Γ_{+} e diminuindo Γ_{-} . No caso extremo em que as impurezas estão exatamente no mesmo ponto ($R = 0$), temos $A_{+} = 1$ e $A_{-} = 0$, indicando $\Gamma_{-} = 0$ e um comportamento de banda livre para H_{-} ; associando $\tau_{\pm}$ como o tempo de transição entre impureza e banda ($\tau_{\pm} = \hbar/\Gamma_{\pm}$), temos para $R = 0$ que $\tau_{-} = \infty$.

Uma caso interessante é $R \approx 0$. Nessa situação, nas iterações iniciais, $\tau_{+} \ll \tau_{-}$ e, para valores de V pequenos (por exemplo: $V = 0.05D$) será possível distinguir duas regiões de *crossover* para $N \rightarrow \infty$ (ver Fig. 3). Veremos uma indicação desse caso na Seção 4.3, aplicado ao modelo Kondo de duas impurezas. Na próxima seção discutem-se

os pontos fixos característicos de um potencial espalhador.

FIG. 3. Autovalores η_{l+}^+ (curva com círculos) e η_{l-}^+ (curva com triângulos) para as iterações ímpares de H_{FK} para $S = 0.99$ ($A_+ > A_-$), $V = 0.05D$, $G = 0$, $\epsilon_d = 0$ e $\Lambda = 3$. Vemos que o *crossover* ocorre em temperaturas distintas para cada paridade da impureza, mas ambas, para $N > 29$, estão fortemente acopladas com a banda de condução. Para $S = 0.999$ a mudança de comportamento nos pontos fixos para H_- (curva com cruzeiros) surge em temperaturas menores que na situação anterior. No caso extremo em que $S = 1$ ($A_+ = 1$ e $A_- = 0$), H_- permanece indefinidamente com os pontos fixos da banda livre (linha tracejada), sem a defasagem de $\pi/2$.

3.3.c - $V = 0$

A ocupação dos níveis de impureza do modelo causa uma defasagem nas funções de onda dos elétrons de condução, devido às interações coulombianas entre estes e o elétron/buraco na impureza. Termos como o associado ao parâmetro G proporcionam esta situação, com um comportamento de pontos fixos característico.

Na Seção 4.1 deste trabalho o modelo de Falicov e Kimball será complementado possibilitando associar resultados específicos ao modelo Kondo de duas impurezas; desde

já se atribui esta simetria ao modelo e, antecipando a Eq. (4.8) (uma equação equivalente à Eq. (3.17), mas que, ao contrário desta, possui simetria partícula-buraco) e fazendo V e ϵ_d iguais a zero, temos o seguinte Hamiltoniano truncado:

$$H_N = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \left\{ \Lambda^{z-1} \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_n^z (f_{n+}^\dagger f_{(n+1)+} + f_{n-}^\dagger f_{(n+1)-} + \text{H.c.}) + \right. \\ \left. + 2G[A_+^2 f_{0+}^\dagger f_{0+} + A_-^2 f_{0-}^\dagger f_{0-} - \frac{1}{2}][d_+ d_+^\dagger + d_- d_-^\dagger - 1] \right. \\ \left. + A_+ A_- [f_{0+}^\dagger f_{0-} + f_{0-}^\dagger f_{0+}][d_+ d_-^\dagger + d_- d_+^\dagger] \right\} \quad (3.35)$$

O termo quártico proporcional a G não parece permitir uma diagonalização direta, como foi possível na seção anterior; a diagonalização iterativa parece a única alternativa. No entanto, para melhor compreender o comportamento de pontos fixos determinado por este termo, observa-se que, devido à conservação separada de carga nas impurezas e na banda de condução (o parâmetro V sendo nulo, não permite ao modelo transferir elétrons da banda de condução para a impureza ou vice-versa), os estados de muitos corpos correspondem a ocupação de níveis em que (a) as duas impurezas estão ocupadas, (b) uma está vazia, ou (c) as duas vazias; da Eq. (3.35) temos o Hamiltoniano para cada uma dessas situações, indicado pelo termo cinético da banda de condução mais o termo interagente, em que

$$H_I = H_{bc} - 2G[A_+^2 f_{0+}^\dagger f_{0+} + A_-^2 f_{0-}^\dagger f_{0-} - \frac{1}{2}] \quad , \\ H_{F_1} = H'_{bc} + 2GA_+ A_- [(f_{0+}'^\dagger f_{0+}' - f_{0-}'^\dagger f_{0-}')] \quad \text{e} \\ H_{F_2} = H'_{bc} + 2G[A_+^2 f_{0+}'^\dagger f_{0+}' + A_-^2 f_{0-}'^\dagger f_{0-}' - \frac{1}{2}] \quad (3.36)$$

onde temos H_I , H_{F_1} e H_{F_2} são os Hamiltonianos com duas impurezas ocupadas, uma ocupada e duas vazias respectivamente. Para H_{F_1} e H_{F_2} fez-se uma mudança nos operadores $f_{n\pm}$'s e $d_{\pm}$, onde

$$f'_{n\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(f_{n+} \pm f_{n-}) \quad \text{e} \quad d'_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(d_+ \pm d_-) \quad (3.37)$$

Sendo os Hamiltonianos da Eq. (3.36) quadráticos, permitem diagonalização direta. Na Tabela V vemos os resultados para diversas iterações ímpares de H_{F_2} e que correspondem com alguns estados de muitos corpos identificados pela diagonalização iterativa (ver Tabela VI). Vale salientar que, devido a simetria partícula-buraco, os autovalores da H_I são os mesmos de H_{F_2} , com o sinal invertido.

TABELA V. Autovalores na diagonalização de H_{F_2} , indicado para duas impurezas ocupadas no caso em que $G = 0.30D$, $\Lambda = 3$ e $S = 0.5$. Verifica-se que os níveis para cada banda estão defasados por $\delta_{\pm}$ em relação aos pontos fixos da banda livre, vistos na Seção 3.3.a. Alguns níveis correspondem com estados de muitos corpos, obtidos pela diagonalização iterativa (ver Tabela VI).

		Iteração				
		(5)	(11)	(17)	(23)	(29)
$\mathcal{H}_+$	η_5^+		102.34218	100.50924	100.44861	100.44646
	η_4^+		33.67644	33.48909	33.48238	33.48213
	η_3^+	12.12121	11.18181	11.16148	11.16074	11.16071
	η_2^+	3.78989	3.72192	3.71967	3.71959	3.71959
	η_1^+	1.13612	1.12776	1.12747	1,12746	1,12746
	η_1^-	-0.48794	-0.48457	-0.48446	-0.48446	-0.48446
	η_2^-	-2.43743	-2.41204	-2.41108	-2.41104	-2.41104
	η_3^-	-7.48779	-7.26640	-7.25793	-7.25761	-7.25760
	η_4^-		-21.85161	-21.77575	-21.77292	-21.77282
	η_5^-		-66.01776	-65.34490	-65.31942	-65.31847
$\mathcal{H}_-$	κ_5^+		88.04012	87.83459	87.82730	87.82703
	κ_4^+		29.29863	29.27651	29.27570	29.27567
	κ_3^+	9.84271	9.76109	9.75865	9.75856	9.75856
	κ_2^+	3.25927	3.25159	3.25132	3.25131	3.25131
	κ_1^+	0.92255	0.92117	0.92114	0.92114	0.92114
	κ_1^-	-0.68164	-0.68059	-0.68056	-0.68056	-0.68056
	κ_2^-	-2.76833	-2.76301	-2.76282	-2.76281	-2.76281
	κ_3^-	-7.48779	-8.30222	-8.30047	-8.30041	-8.30041
	κ_4^-		-24.91753	-24.90183	-24.90124	-24.90122
	κ_5^-		-74.84937	-74.70913	-74.70387	-74.70367

Na diagonalização iterativa para $G \neq 0$, os estados de muitos corpos obtidos não são de fácil interpretação, principalmente nas primeiras iterações; isso é devido às diferentes possibilidades de distribuir as cargas nos níveis discretizados, ocupando ou não os níveis de impureza, consequentemente espalhando os elétrons de condução. À medida que o número de iterações aumenta, ampliam-se as escalas de energia próximas de ϵ_F , de forma que os autoestados obtidos pela diagonalização de H_I , H_{F_1} e H_{F_2} vão-se distinguindo. O processo de diagonalização seleciona os autoestados de mais baixa energia; assim, após várias iterações, os estados de muitos corpos identificam-se, para $\epsilon_d = 0$, com os obtidos por H_{F_2} , como vemos na Tabela VI.

Os níveis identificados pela Tabela V são pontos fixos expressos por

$$\eta_j^\pm = \Lambda^{j-1 \pm \gamma_+} \quad \text{e} \quad \kappa_j^\pm = \Lambda^{j-1 \pm \gamma_-}, \quad (3.38)$$

para $N \gg j$, onde

$$\gamma_\pm = \delta_\pm / \pi \quad (3.39)$$

$$= -\frac{1}{\pi} \arctan\left(\frac{\pi \rho G A_\pm^2}{D}\right), \quad (3.40)$$

Os pontos fixos de um potencial espalhador, como o associado ao parâmetro G de H_{FK} , têm uma defasagem δ_G em relação aos obtidos no Hamiltoniano de banda livre (ver Fig. 4), tornando os níveis mais positivos ou mais negativos, dependendo do valor de G ser negativo ou positivo (ver Tabela V). A expressão para os pontos fixos, indicada na Eq. (3.38) mostra que G é um operador *marginal* na teoria do grupo de renormalização numérico, um operador que produz uma defasagem bem definida quando $N \rightarrow \infty$. O valor δ_G se relaciona com a regra de soma de Friedel, em que a emissão ou absorção de um elétron por um orbital profundo caracteriza um deslocamento das funções de onda dos elétrons em torno deste, compensando a carga total emitida ou absorvida.

FIG. 4. Representação esquemática dos níveis obtidos pela diagonalização de (a) H_I , (b) Banda livre e (c) H_{F_2} , em que $A_+ = A_-$. Vemos que os níveis “descem” ou “sobem”, deslocados por um fator δ , dependendo do sinal de G ser (c) positivo ou (a) negativo. Devido à simetria partícula-buraco, os níveis de H_I são os mesmos de H_{F_2} , a menos do sinal.

TABELA VI. Estados de muitos corpos obtidos pela diagonalização iterativa do modelo de Falicov e Kimball, no caso em que $V = 0$, $S = 0.5$, $\epsilon_d = 0$ e $\Lambda = 3$, na iteração $N = 25$. Os estados associam uma distribuição de carga relativa ao estado fundamental, com carga zero. Identificam-se alguns níveis da Tabela V, como η_1^- e κ_1^+ .

Carga	Paridade	Autovalores				
-1	-	0.48436	2.08606	2.41088	4.01258	4.02281
	+	0.68051	2.29243	2.76271	3.81643	4.21897
0	-	0.00000	1.60170	1.61192	2.05233	3.21363
	+	1.40555	1.80801	3.33207	3.73580	3.89029
1	-	0.92477	1.12757	2.53669	2.79927	3.25502
	+	0.92119	1.13114	2.53312	2.73284	3.25145

Como complemento aos resultados, obteve-se o expoente α da probabilidade de transição entre os estados inicial, determinado por H_I , e final, indicado por H_{F_1} . O cálculo da taxa de transição eletrônica não apresenta dificuldades (ver Apêndice C). Partindo-se, de acordo com a regra de ouro de Fermi, da expressão

$$\Gamma_{\pm}(\omega) = \sum_{\langle F |} |\langle F | f_{0\pm}^{\dagger} d_{\pm} | I \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_T + E_I - E_F) \quad , \quad (3.41)$$

chega-se ao resultado

$$\Gamma_{\pm}(\omega) = \left(\frac{\Gamma_0}{\omega - \omega_T} \right)^{\alpha} \quad (3.42)$$

onde $| I \rangle$ e $| F \rangle$ são estados de N partículas, em que $| F \rangle$ é o estado final (composto de autoestados de H_{F_1}) com energia E_F , e $| I \rangle$ é estado inicial (ocupando os N autoestados de H_I abaixo do nível de Fermi) com energia E_I ; ω é a energia fornecida ($\hbar = 1$), relacionada com a frequência do raio-X e ω_T é a energia mínima para um elétron de um orbital localizado atingir a banda de condução. O expoente α está relacionado com a absorção de raio-X e emissão de elétrons para o contínuo, de acordo com o termo associado ao parâmetro V do Hamiltoniano H_{FK} . Obteve-se para este um valor em que

$$\alpha = - \left(\frac{\delta_+}{\pi} + \frac{\delta_-}{\pi} \right)^2 - 1 \quad , \quad (3.43)$$

para $G > 0$ e

$$\alpha = 2 \left(\frac{\delta_+}{\pi} + \frac{\delta_-}{\pi} \right) - \left(\frac{\delta_+}{\pi} + \frac{\delta_-}{\pi} \right)^2 - 1 \quad , \quad (3.44)$$

para $G < 0$; os valores de $\delta_{\pm}$ são definidos pela Eq. 3.40. Detalhando o processo, vemos que a passagem de um elétron localizado para a banda de condução determina uma defasagem nos canais positivo e negativo do modelo que competem no expoente à medida que a temperatura $T \rightarrow 0K$. Os resultados para $G > 0$ estão indicados na Tabela VII onde vemos que, para $G \rightarrow 0$ e $S \rightarrow 1$, a convergência torna-se mais lenta, gerando uma incerteza que pode ser contornada ao calcular-se a defasagem para cada canal, positivo ou negativo, individualmente.

Um caso especial ocorre para $S = 1$, pois o termo proporcional a $A_+ A_-$ em H_{F_1} torna-se nulo, sendo possível representar H'_{fc} na base dos $f_{n\pm}$'s; em H_I o termo proporcional a

A_- também é nulo, não existindo defasagem para a banda ímpar do problema; o cálculo do expoente mostra que

$$\alpha = 2 \left(\frac{\delta}{\pi} \right) - \left(\frac{\delta}{\pi} \right)^2 \quad , \tag{3.45}$$

para $\delta = -\arctan(\frac{\pi \rho G}{D})$, para qualquer valor de G , sendo este um resultado conhecido do modelo de absorção de raio-X.

TABELA VII. Valores comparativos dos expoentes α da taxa de transição entre H_I e H_{F_1} para diversos valores de G e S . o expoente α_c indica o valor calculado pela Eq. (3.43), e α_m corresponde ao obtido numericamente, com a incerteza entre parênteses.

		G		
S		0.20D	0.40D	0.60D
0.00	$\frac{\alpha_m}{2}$	0.5188 ($\pm 1.10^{-6}$)	0.5638 ($\pm 5.10^{-7}$)	0.6157 ($\pm 1.10^{-7}$)
	$\frac{\alpha_c}{2}$	0.5188	0.5638	0.6157
0.25	$\frac{\alpha_m}{2}$	0.6113 ($\pm 1.10^{-4}$)	0.5620 ($\pm 5.10^{-6}$)	0.5190 ($\pm 1.10^{-6}$)
	$\frac{\alpha_c}{2}$	0.6113	0.5620	0.5190
0.50	$\frac{\alpha_m}{2}$	0.5192 ($\pm 6.10^{-4}$)	0.5570 ($\pm 1.10^{-4}$)	0.5987 ($\pm 5.10^{-5}$)
	$\frac{\alpha_c}{2}$	0.5180	0.5569	0.5987
0.75	$\frac{\alpha_m}{2}$	0.5212 ($\pm 5.10^{-3}$)	0.5498 ($\pm 3.10^{-4}$)	0.5801 ($\pm 1.10^{-4}$)
	$\frac{\alpha_c}{2}$	0.5171	0.5495	0.5801

Como já foi ressaltado, os casos especiais vistos nesta seção ajudam a interpretar o resultado encontrado nos pontos fixos de uma diagonalização iterativa por meio do grupo de renormalização numérico e ficam melhor exemplificados em uma aplicação prática envolvendo o modelo de Falicov e Kimball. A aplicação que veremos no capítulo seguinte não necessitará de toda informação analisada neste capítulo, pois uma aplicação mais completa está além dos objetivos do presente trabalho, mas será suficiente para o leitor compreender os resultados numéricos obtidos.

Capítulo 4

4.1 - MODELOS FALICOV-KIMBALL RESTRITO E KONDO

A obtenção de resultados com o modelo Kondo com duas impurezas requer, utilizando o grupo de renormalização numérico [17, 18] ou Monte Carlo [21], o uso de supercomputadores. Simplificações como as que foram vistas no Capítulo 2, que associam Hamiltonianos sem spins a modelos com degenerescência de spins são importantes pois minimizam custos computacionais na obtenção de curvas de parâmetros termodinâmicos (como o calor específico, por exemplo). Neste capítulo mostra-se uma nova associação, desta vez entre o modelo Kondo de duas impurezas e o modelo de Falicov e Kimball, para obter resultados nos casos especiais em que as impurezas estão localizadas numa mesma posição ($R=0$) e a uma distância infinita entre si ($R=\infty$).

O Hamiltoniano Kondo, estendido a duas impurezas, foi definido como sendo

$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} - J[s_1(-\frac{1}{2}\mathbf{R}) \cdot \mathbf{S}_1 + s_2(+\frac{1}{2}\mathbf{R}) \cdot \mathbf{S}_2] \quad , \quad (4.1)$$

onde $a_{k\sigma}^\dagger$ cria um elétron de estado k e spin σ na banda de condução; $-\frac{1}{2}\mathbf{R}$ e $+\frac{1}{2}\mathbf{R}$ são as posições das impurezas; $\mathbf{S}_1$ e $\mathbf{S}_2$ são operadores de spin dos momentos localizados e s_1 e s_2 são definidos por

$$s_1 = a^\dagger(-\frac{1}{2}\mathbf{R})\sigma a(-\frac{1}{2}\mathbf{R}) \quad \text{e} \quad s_2 = a^\dagger(\frac{1}{2}\mathbf{R})\sigma a(\frac{1}{2}\mathbf{R}) \quad , \quad (4.2)$$

em que $a(\pm\frac{1}{2}\mathbf{R})$ são funções de Wannier dos elétrons de condução para cada impureza. O termo explícito de interação I_0 (existente na Eq. (1.5)) não foi considerado pois supõe-se que a interação RKKY entre impurezas ocorra via banda de condução, como em alguns trabalhos recentes [22, 23]. A base centrada na origem permite utilizar uma simetria de paridade e assim reescrevê-lo como (ver Apêndice B)

$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} - \sum_{k,k'} [(S_1 + S_2) \cdot (J_e a_{k'e}^\dagger \sigma a_{ke} + J_o a_{k'o}^\dagger \sigma a_{ko}) + \\ + (S_1 - S_2) \cdot (iJ_m a_{k'o}^\dagger \sigma a_{ke} + \text{H.c.})] \quad , \quad (4.3)$$

onde

$$J_{e,o} = \frac{J}{2} \left(1 \pm \frac{\sin(k_F R)}{k_F R} \right), \quad J_m = \sqrt{J_e J_o} \quad \text{e} \\ a_{k_{e,o}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_k \pm a_{-k}), \quad (4.4)$$

A diagonalização iterativa da Eq. (4.3), dado o que foi visto nos capítulos anteriores, pede apenas uma breve descrição. Na Seção 2.4 vimos o comportamento de um modelo idealizado de ligas metálicas diluídas com a temperatura, o que auxiliou na interpretação dos resultados numéricos no processo de diagonalização iterativa. No modelo Kondo de duas impurezas duas situações competem em baixas temperaturas: (a) o acoplamento impureza - banda de condução, que caracteriza o efeito Kondo já conhecido do modelo de uma impureza, e (b) o acoplamento singleto entre spins, indicando uma interação dominante do tipo RKKY; dessa forma, os resultados obtidos [16–18], de acordo com parâmetros escolhidos para R , J e consequentemente I_0 , mostram que um ou outro comportamento prevalece para $T \rightarrow 0$ (ver Seção 1.4).

A dificuldade em obter resultados do modelo está na degenerescência de spins, dado o grande número de operadores no processo de diagonalização iterativa. Usando as noções adquiridas sobre o método, vemos que H_0 nesse Hamiltoniano seria uma matriz de ordem 256 (a base de H_0 é formada com os operadores $f_{0e\uparrow}$, $f_{0e\downarrow}$, $f_{0o\uparrow}$, $f_{0o\downarrow}$, $d_{1e\uparrow}$, $d_{2e\downarrow}$, $d_{1o\uparrow}$ e $d_{2o\downarrow}$); cada iteração terá uma matriz de ordem $4 \times 8^{2+N}$, o que, como exemplo, mostra que na iteração 3 a matriz Hamiltoniana será de ordem 131072. Apesar das simetrias existentes (carga, paridade, spin), que diminuem a ordem das matrizes para diagonalização, o acompanhamento numérico do modelo impõe o uso de computadores rápidos e com grande memória (supercomputadores).

Apesar da aparente complexidade do problema, este trabalho mostrará que é possível estudá-lo em dois casos especiais—e não menos interessantes que o modelo geral—em que (a) as impurezas estão infinitamente afastadas ($R = \infty$) ou (b) localizadas numa mesma posição ($R = 0$); embora esta dissertação não vá tão longe, obter propriedades termodinâmicas seria uma aplicação relativamente simples. Em particular, utilizar o modelo

de Falicov e Kimball, associado a estes casos com o modelo Kondo de duas impurezas, faria com que as diagonalizações e o tratamento computacional fossem feitos em escala bem menor que a indicada para o modelo Kondo, permitindo usar computadores com alguns Mflops. A associação é viável, visto as características de ambos os modelos e o sucesso na correspondência entre os modelos Vigman-Finkelshtein e Kondo de uma impureza no cálculo do calor específico, analisada no Capítulo 2. Para efeito de comparação, alguns resultados para estes casos são conhecidos [16, 17].

Definido o modelo Kondo, tenta-se associá-lo ao modelo de Falicov e Kimball nos casos especiais em que $R = 0$ e $R = \infty$. Vimos no capítulo anterior que o Hamiltoniano de Falicov e Kimball, restrito a duas impurezas é [Eq. 3.3]

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} + V[\Psi^{\dagger}(-R/2)d_1 + \Psi^{\dagger}(R/2)d_2 + \text{H.c.}] + \\ + \epsilon_d(d_1^{\dagger}d_1 + d_2^{\dagger}d_2) + \\ + G[\Psi^{\dagger}(-R/2)\Psi(-R/2)d_1d_1^{\dagger} + \Psi^{\dagger}(R/2)\Psi(R/2)d_2d_2^{\dagger}] \quad , \quad (4.5)$$

na qual d_1 e d_2 destroem elétrons nos níveis localizados respectivamente em $-\frac{R}{2}$ e $\frac{R}{2}$, e $\Psi(-R/2)$ e $\Psi(R/2)$ são funções de Wannier identificadas por

$$\Psi(R/2) = \sum_{\mathbf{k}} \exp^{i\mathbf{k}R/2} c_{\mathbf{k}} \quad \text{e} \quad \Psi(-R/2) = \sum_{\mathbf{k}} \exp^{-i\mathbf{k}R/2} c_{\mathbf{k}} \quad , \quad (4.6)$$

Uma das características do Hamiltoniano Kondo é a simetria partícula-buraco; assim, impondo essa simetria para a Eq. (4.5) faz-se $\epsilon_d = 0$ e, sabendo que $\{\Psi^{\dagger}, \Psi\} = 2$ e $\{d_i^{\dagger}, d_i\} = 1$, complementa-se o segundo e o quarto termo, ficando a expressão como sendo

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} + V[\Psi^{\dagger}(-R/2)d_1 + \Psi^{\dagger}(R/2)d_2 + \text{H.c.}] + \\ + G[(\Psi^{\dagger}(-R/2)\Psi(-R/2) - 1)(d_1d_1^{\dagger} - \frac{1}{2}) + \\ + (\Psi^{\dagger}(R/2)\Psi(R/2) - 1)(d_2d_2^{\dagger} - \frac{1}{2})] \quad . \quad (4.7)$$

Utilizando os passos mostrados no Capítulo 3 para obter uma representação com operadores que aproveitem a simetria de paridade existente para o modelo (verificada ao trocar-se $-R/2$ por $R/2$ e vice-versa), temos que o Hamiltoniano da Eq. (4.7) pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
H = & \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} D \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n^2 (f_{n+}^\dagger f_{(n+1)+} + f_{n-}^\dagger f_{(n+1)-} + \text{H.c.}) + \\
& + 2V[A_+ f_{0+}^\dagger d_+ + A_- f_{0-}^\dagger d_- + \text{H.c.}] + \\
& + 2G[A_+^2 f_{0+}^\dagger f_{0+} + A_-^2 f_{0-}^\dagger f_{0-} - \frac{1}{2}][d_+ d_+^\dagger + d_- d_-^\dagger - 1] + \\
& + A_+ A_- [f_{0+}^\dagger f_{0-} + f_{0-}^\dagger f_{0+}][d_+ d_-^\dagger + d_- d_+^\dagger] \quad , \quad (4.8)
\end{aligned}$$

na qual o termo de elétrons livres foi associado à base de $f_{n\pm}$'s de acordo com a construção de Lanczos (ver Apêndice A) e

$$f_{0\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}}^{(\pm)} \quad , \quad d_{\pm} = \frac{d_1 \pm d_2}{\sqrt{2}} \quad ,$$

$$C_{\mathbf{k}}^{(+)} = \frac{1}{A_+} \int \frac{d\Omega}{4\pi} \cos\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}{2}\right) c_{\mathbf{k}} \quad , \quad (4.9)$$

$$C_{\mathbf{k}}^{(-)} = \frac{i}{A_-} \int \frac{d\Omega}{4\pi} \sin\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}{2}\right) c_{\mathbf{k}} \quad \text{e} \quad (4.10)$$

$$A_{\pm}^2 = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\sin(k_F R)}{k_F R} \right] \quad , \quad (4.11)$$

definidos no capítulo anterior.

O estudo de casos particulares da associação entre os modelos Kondo e Falicov e Kimball para duas impurezas pode viabilizá-la num contexto mais geral, o que seria feito por perturbação em volta dos pontos fixos considerando operadores *irrelevantes*. Os operadores *irrelevantes* são importantes pois nas iterações que antecedem os pontos fixos é possível escrever um Hamiltoniano, chamado *efetivo*, composto destes operadores e que representa o sistema para baixas temperaturas. Visto por outro lado e mais corretamente, temos que: sendo possível expressar o Hamiltoniano de um sistema por operadores irrelevantes, este tenderá para pontos fixos nas iterações seguintes.

O Hamiltoniano efetivo de um sistema descreve as iterações possíveis a baixas temperaturas segundo a teoria do líquido de Fermi, no caso específico do modelo Kondo vemos nos trabalhos de Jones *et al.* [17, 18] que sete operadores irrelevantes compõem o Hamiltoniano efetivo no modelo Kondo. A obtenção do Hamiltoniano efetivo para o modelo de Falicov e Kimball, restrito a duas impurezas, auxiliaria estabelecer uma relação mais completa com o modelo Kondo; vale ressaltar que determiná-lo não seria difícil, mas essa tarefa parece grande demais para caber em uma dissertação de mestrado.

Descritos os Hamiltonianos Kondo e Falicov-Kimball de duas impurezas, podem-se discutir dois casos particulares dos mesmos, como veremos nas seções seguintes.

4.2 - IMPUREZAS DESACOPLADAS ($R = \infty$)

Uma das situações mais simples para estudo num modelo com uma banda de condução e dois níveis localizados é aquela em que as impurezas se encontram infinitamente distantes uma da outra. Nessas circunstâncias, as regiões do sistema nas vizinhanças de cada impureza devem responder da mesma forma à diminuição da temperatura, sem privilégio para um ou outro momento localizado. Alguns trabalhos [16, 17] mostraram que os resultados de muitos corpos nessa situação, para o Hamiltoniano Kondo de duas impurezas (indicado pela Eq. (4.3) acrescida do termo $I_0 S_1 \cdot S_2$, que para $R = \infty$ é nulo), o associam a dois modelo Kondo separados.

De acordo com o modelo de Falicov e Kimball, Eq. (4.8), $R = \infty$ faz com que $A_+ = A_- = 1/\sqrt{2}$; assim temos H_{FK} , na forma associada para H_N pelo grupo de renormalização numérico, como

$$H_N = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \left\{ \Lambda^{z-1} \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_n^z (f_{n+}^\dagger f_{(n+1)+} + f_{n-}^\dagger f_{(n+1)-} + \text{H.c.}) + \right. \\ \left. + \sqrt{2}\tilde{V}[(f_{0+}^\dagger d_+^\dagger f_{0-}^\dagger d_- + \text{H.c.}] + \right. \\ \left. + \tilde{G}[(f_{0+}^\dagger f_{0+} + f_{0-}^\dagger f_{0-} - 1)(d_+^\dagger d_+ + d_-^\dagger d_- - 1) + \right. \\ \left. + (f_{0+}^\dagger f_{0-} + f_{0-}^\dagger f_{0+})(d_+^\dagger d_- + d_-^\dagger d_+)] \right\}, \quad (4.12)$$

onde

$$\tilde{V} = \frac{2V}{(1 + \Lambda^{-1})D} \frac{1}{\Lambda^{1-z}} \quad \text{e} \quad \tilde{G} = \frac{2G}{(1 + \Lambda^{-1})D} \frac{1}{\Lambda^{1-z}} \quad (4.13)$$

sendo a Eq. (4.12) diagonalizada iterativamente. São necessários valores para os parâmetros V e G que levem a resultados equivalentes aos do modelo Kondo. Sendo $R = \infty$ infere-se que os valores sejam o de dois modelos distintos de uma impureza, associado cada um ao modelo de Vigman-Finkel'shtein, que mostrou bons resultados para o calor específico (visto no Capítulo 2) do modelo Kondo de uma impureza. Numa correspondência com os parâmetros de H_{VF} , vemos que a associação entre V dos modelos H_{VF} e H_{FK} [Eq. (2.19) e (4.12) respectivamente) é direta, pois neste último o termo proporcional a V conserva a paridade. No caso de G , devido ao último termo em H_{FK} com operadores de paridade diferentes, a igualdade não é imediata; no entanto, podemos relacioná-los pela taxa de transição (indicada pela defasagem δ_G nas funções de onda dos

elétrons de condução, devido a presença ou não de elétrons nos níveis localizados) de ambos os modelos. Das Eq. (2.3) e (3.40) temos então

$$\delta_G)_{VF} = \delta_G)_{FK} \tag{4.14}$$

$$\arctan\left(\frac{\pi \rho G}{4}\right)_{VF} = \arctan\left(\frac{\pi \rho G}{2}\right)_{FK} \tag{4.15}$$

indicando que G para H_{FK} deva ser a metade do valor de H_{VF} . Assim, selecionando valores de V e G da Tabela I - Capítulo 2, e diagonalizando H_{FK} , obtém-se resultados associados aos do modelo Kondo de duas impurezas (ver Tabelas I e II).

FIG. 1. Resultados numéricos obtidos pela diagonalização do Hamiltoniano de Falicov e Kimball para dois níveis do subespaço $Q=-1$, no qual $V = 0.16D$, $G = 0.25958D$ e $\Lambda = 3$; somente as iterações ímpares são mostradas. Vemos bem definidas as regiões de acoplamento fraco ($N < 5$), forte ($N > 17$) e *crossover*, que são características do efeito Kondo.

FIG. 2. Estados de muitos corpos para a energia adimensional 3.38765 nos espaços de carga zero e paridade (a) (b) (c) positiva e (d) (e) negativa, indicado na Tabela I. Os valores são a combinação de dois modelos Kondo simétricos distintos, nominalmente (+) e (-). Obs.: $\eta^- = -\eta^+ = -1.69382$.

TABELA I. Alguns autovalores na diagonalização do H_{FK} em que $V = 0.16D$, $G = 0.25958D$ e $\Lambda = 3$, na iteração $N = 21$, com $R = \infty$. As energias são construções de muitos corpos dos níveis obtidos e aparecem com valor relativo ao estado fundamental; a degenerescência está assinalada entre parênteses. Os estados identificados na Tabela IV - Capítulo 2, para o modelo de uma impureza repetem-se, mostrando, juntamente com a degenerescência para carga, que são o modelo equivalente a dois modelos Kondo separados. Alguns estados novos surgem devido à combinação destes modelos (ver Fig. 2).

Carga	Paridade	Autovalores				
-1	-	1.69382	3.38765	5.08148	5.17976	6.87359 (4)
	+	1.69382	3.38765	5.08148	5.17976	6.87359 (4)
0	-	0.00000	1.69382 (2)	3.38765 (3)	5.08148 (2)	5.17976 (2)
	+	1.69382 (2)	3.38765 (2)	5.08148 (2)	5.17976 (2)	6.77531
1	-	0.00000	1.69382 (2)	3.38765 (4)	5.08148 (2)	5.17976 (2)
	+	0.00000	1.69382 (2)	3.38765 (4)	5.08148 (2)	5.17976 (2)
2	-	1.69382 (2)	3.38765 (2)	5.08148 (2)	5.17976 (2)	6.77531
	+	0.00000	1.69382 (2)	3.38765 (4)	5.08148 (2)	5.17976 (2)

Analisando e comparando os resultados com os obtidos no trabalho de Oliveira e Wilkins [12], encontra-se que os estados de muitos corpos associam duas bandas e níveis localizados simétricos do modelo Kondo de uma impureza (Fig. 1); como os resultados do modelo Kondo de duas impurezas indicaram [17, 16]. A Tabela II mostra os estados de muitos corpos, dos modelos de Vigman-Finkelstein e Falicov-Kimball, para várias iterações; na mesma os dois menores autovalores, em cada carga identificada de H_{VF} , são encontrados repetidamente nas respectivas iterações com H_{FK} , evidenciando a duplicidade do modelo Kondo de uma impureza neste último Hamiltoniano. Por outro lado, outros estados de muitos corpos surgem devido a novas combinações no preenchimento dos níveis para cada carga, com duas bandas simétricas.

Compreendendo os autoestados obtidos com a diagonalização iterativa, vemos que, de acordo com a Seção 3.3.c, o termo proporcional a G no Hamiltoniano de Falicov e Kimball espalha os elétrons de condução de acordo com a ocupação dos níveis impureza; dessa forma, nas primeiras iterações, em que o termo associado a V , embora relevante, é ainda muito pequeno, os estados de muitos corpos misturam resultados para duas, uma, ou zero impurezas ocupadas, dificultando a identificação dos níveis de energia. Aumentado N , o crescimento do termo proporcional a V provoca uma inversão no comportamento dos pontos fixos; na Tabela II, com a diminuição da temperatura (aumento das iterações), vemos que os pontos fixos das iterações pares estão se definindo como os da iterações ímpares da banda livre, mostrando uma defasagem de $\pi/2$ característica no modelo Kondo. A descrição numérica confirma o comportamento descrito na Seção 2.4 para o modelo Kondo de uma impureza, indicando que a mesma descrição qualitativa se aplica a impurezas infinitamente distantes; para esse afastamento entre impurezas e com a correspondência entre parâmetros V e G do modelo H_{VF} (quando associados ao modelo Kondo de uma impureza) são possíveis cálculos do calor específico e da suscetibilidade para o modelo Kondo de duas impurezas. Tais cálculos não foram realizados neste trabalho.

Uma discussão do caso $R = 0$ em H_{FK} será vista na seção seguinte, comparado com o acoplamento forte entre momentos localizados no modelo Kondo de duas impurezas.

TABELA II. Estados de muitos corpos obtidos pela diagonalização iterativa do modelo de Vigman-Finkelshtein e Falicov-Kimball, com $V = 0.16D$, $R = \infty$, $\epsilon_d = 0$ e $\Lambda = 3$. Para H_{VF} tem-se $G = 0.51916D$ e em H_{FK} utiliza-se $G = 0.25958D$. Os estados associam uma distribuição de carga para os níveis de H_+ e H_- relativas ao estado fundamental, em que a paridade determina o sinal obtido com o operador P sobre o estado. A degenerescência da energia para cada subespaço não está assinalada.

Carga				Iteração	(H_{VF})	
		(4)	(8)	(12)	(16)	(20)
0		0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
		0.51793	0.92078	1.42453	1.57789	1.59760
1		0.11142	0.41049	0.71104	0.78894	0.79880
		1.63485	1.82952	2.47200	2.91539	2.98801
Carga	Paridade			Iteração	(H_{FK})	
		(4)	(8)	(12)	(16)	(20)
0	-	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
		0.22285	0.82123	1.42226	1.57789	1.59760
		0.51796	0.92085	1.42455	1.57791	3.19519
	+	0.22285	0.82114	1.42225	1.57791	1.59760
		0.51796	0.92095	1.42470	3.70440	3.78682
		1.74630	2.24020	3.18329	3.70442	5.39322
1	-	0.11144	0.41056	0.71109	0.78895	0.79880
		0.62937	1.33141	2.13571	2.36686	2.39640
		1.63496	1.82966	2.47221	2.91545	2.98801
	+	0.11144	0.41056	0.71109	0.78895	0.79880
		0.62937	1.33141	2.13571	2.36686	2.39640
		1.63496	1.82966	2.47221	2.91545	2.98801

4.3 - IMPUREZAS FORTEMENTE ACOPLADAS: $R = 0$

Outro caso especial no modelo Kondo pode ser estudado quando as duas impurezas estão fortemente acopladas. Uma discussão para a situação em que as impurezas estão localizadas num mesmo ponto, no Hamiltoniano de Falicov e Kimball, será feita nesta seção, com indicações para o mesmo caso com o modelo Kondo. Alguns trabalhos [17, 18] com este último modelo mostraram que, quando as impurezas estão num estado inicial tripleto ($S = 1$), ocorre um efeito Kondo em duas fases, no Hamiltoniano definido como

$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} - \sum_{k,k'} [(S_1 + S_2) \cdot (J_e a_{k'e}^\dagger \sigma a_{ke} + J_o a_{k'o}^\dagger \sigma a_{ko})] \quad , \quad (4.16)$$

onde

$$J_{e,o} = \frac{J}{2} \left(1 \pm \frac{\sin(k_F R)}{k_F R} \right)$$

Este é um caso particular da Eq. (4.3), da qual foi mantido o termo tripleto, que interage com cada canal, distinto por paridade, dos elétrons de condução. Diminuindo a temperatura os termos associados a J_e e J_o se acoplam com cada impureza, em temperaturas características $T_K(J_e)$ e $T_K(J_o)$, mostrando um ponto fixo intermediário instável entre as mesmas. O valor de J_e e J_o varia conforme a proximidade dos momentos localizados. Para $R = 0$ o termo proporcional a J_m na Eq. (4.3) é nulo; assim a Eq. (4.16) torna-se exata para descrever essa situação.

No Hamiltoniano de Falicov e Kimball, para $R = 0$ temos $A_+ = 1$ e $A_- = 0$; assim, este pode ser escrito, na forma associada de H_N , por

$$\begin{aligned} H_N = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \{ \Lambda^{z-1} \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_n^z (f_{n+}^\dagger f_{(n+1)+} + f_{n-}^\dagger f_{(n+1)-} + \text{H.c.}) + \\ + 2\tilde{V}[(f_{0+}^\dagger d_+ + \text{H.c.}] + \\ + 2\tilde{G}[(f_{0+}^\dagger f_{0+} + -1)(d_+ d_+^\dagger + d_- d_-^\dagger - 1)] \} \quad , \quad (4.17) \end{aligned}$$

Vimos na Seção 3.3.b que termos como o associado ao parâmetro V tornam-se relevantes à medida que diminui a temperatura do sistema, proporcionando ao modelo uma mudança de comportamento em temperaturas baixas, com uma defasagem de $\pi/2$ no ponto fixo estável. Na Eq. (4.17) não existe termo de acoplamento entre f_{0-} e d_- , indicando que a porção da banda associada a uma das impurezas não poderá acoplar-se a

ela, seja qual for a temperatura. Pelo que sugere a Seção 3.3.a, a diagonalização iterativa conduziria a um conjunto de estados de muitos corpos com uma banda livre, com o acoplamento com a banda de condução ocorrendo para uma impureza somente. Esta situação foi analisada na Fig. 3 - Capítulo 3, quando $R = 0$, como vemos na Eq. (4.16), o modelo Kondo tem o mesmo comportamento: nessas condições o parâmetro J_0 seria nulo e o termo associado a J_e se acopla com uma das impurezas, não permitindo o efeito Kondo na parte ímpar do Hamiltoniano; com isso, também seus autoestados teriam um comportamento de banda livre.

Num caso menos extremo, em que $R \simeq 0$ no modelo de Falicov e Kimball, temos $A_+ \simeq 1$ e $A_- \simeq 0$, determinando um pequeno parâmetro de acoplamento, associado nominalmente com H_- , e outro associado com H_+ . Com a diminuição da temperatura, o termo de acoplamento em H_+ logo se acopla com as impurezas. De acordo com o comportamento de pontos fixos do termo associado a V e analisado na Seção 3.3.b, mesmo para VA_- pequenos haverá um determinado número de iterações em que este se torna importante, deslocando o Hamiltoniano para outro ponto fixo. Desta forma, também o termo de acoplamento em H_- , em iterações posteriores, mostrará nos resultados o acoplamento entre impureza e banda de condução. Nessa situação, o ponto fixo de acoplamento forte para H_+ se torna instável, tão mais instável à medida em que $R \rightarrow 0$.

O caso geral, no qual $R \neq 0$, exige que obtenhamos V e G em H_{FK} que tornem o Hamiltoniano equivalente ao modelo Kondo, de tal forma que H_{FK} e H_K produzam as mesmas funções termodinâmicas, por exemplo. As duas últimas seções mostram que encontrar tal equivalência é possível, sendo este um trabalho a ser analisado em um futuro próximo.

Capítulo 5

5.1 - CONCLUSÕES

Neste trabalho mostrou-se que é possível diagonalizar numericamente o Hamiltoniano de Falicov e Kimball, restrito a duas impurezas, determinando pontos fixos para um regime de temperatura próximo a 0 K. Tais pontos podem auxiliar no cálculo de propriedades termodinâmicas (como o calor específico e suscetibilidade magnética), bem como o de propriedade dinâmicas (como fotoemissão e absorção de raio-X) nessa escala de temperatura. A definição final do Hamiltoniano aproveitou a simetria de paridade para o modelo, diminuindo a ordem das matrizes diagonalizadas numericamente e minimizando custos computacionais. A inclusão do termo de hibridização no modelo foi importante na associação, para casos especiais, com o modelo Kondo de duas impurezas e com isto os resultados para duas impurezas localizadas num mesmo ponto (com $R = 0$) e impurezas desacopladas (com $R = \infty$) foram obtidos.

No processo de diagonalização foi utilizado o grupo de renormalização numérico, definido inicialmente por Wilson [8] e que desde então tem sido empregado no estudo de Hamiltoniano de muitos corpos como o de Kondo [16–18] e Anderson [26], tendo mostrado bons resultados, especialmente no regime de baixas temperaturas, em relação aos métodos descritos no Capítulo 1.

Como vimos, a utilização do modelo de Falicov e Kimball, quando em equivalência com o modelo Kondo para os casos acima, reduziu consideravelmente os gastos computacionais no grupo de renormalização numérico em comparação com o Hamiltoniano Kondo de duas impurezas originalmente definido, viabilizando a utilização de computadores com processadores de poucos Mflops. A difusão dos computadores e o crescente avanço tec-

nológico permitirão que este problema, em futuro próximo, possa ser tratado em nível acadêmico, com um microcomputador pessoal. A generalização da associação entre os modelos é necessária; no entanto, isto está além dos objetivos do presente trabalho, ficando para uma etapa subsequente.

Parte da importância do modelo Kondo de duas impurezas provém da competição entre os dois tipos de acoplamentos possíveis em baixas temperaturas: (a) o acoplamento spin de impureza e banda de condução, o que determina o efeito Kondo e (b) o acoplamento entre spins de impurezas, o que provém de uma interação do tipo RKKY. Recentes trabalhos [28, 29] têm mostrado a preocupação em verificar esta competição nos compostos de Ce, como o CePt_2Sn_2 , em que o alinhamento magnético de orbitais f ocorre (interações RKKY) ou mesmo com a suscetibilidade magnética tendendo a zero (efeito Kondo) em temperaturas próximas a 0 K.

Estudos com redes de impurezas estariam mais próximos da realidade das ligas magnéticas diluídas; no entanto, tais estudos ainda não se mostram possíveis com o grupo de renormalização numérico e assim os modelos de duas impurezas, como o que discutimos neste trabalho, servem como aproximação mais realista que se pode presentemente estudar.

5.2 - SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Os pontos fixos obtidos para o Hamiltoniano do modelo de Falicov e Kimball permitem obter resultados exatos em temperaturas próximas a 0 K. Para temperaturas mais altas, é possível, como foi relatado no início deste Capítulo, calcular propriedades termodinâmicas, como calor específico e suscetibilidade magnética, que no futuro poderão ser usados para comparação com resultados analíticos mais completos que venham a surgir. O cálculo de propriedades dinâmicas, como fotoemissão espectral e absorção de raio-X, também podem ser executados.

Para uma associação mais completa com o modelo Kondo de duas impurezas é necessário o estudo do Hamiltoniano efetivo H_{ef} do modelo de Falicov e Kimball, ou seja, o Hamiltoniano de ponto fixo de acoplamento fraco, com operadores *relevantes*, proporcional ao parâmetro V ; H_{ef} pode ser obtido sem dificuldades, como demonstram os casos particulares estudados no Capítulo 3, e será pesquisado futuramente. Como

consequência, a associação de parâmetros entre os modelos de Falicov e Kimball e de Kondo, de uma forma mais ampla que a utilizada no Capítulo 4, permitiria que cálculos fossem realizados, com menor custo, para este último modelo.

A determinação do expoente da taxa de transição para o modelo de duas impurezas auxiliará interpretar medidas de fotoemissão e absorção de raio-X. O cálculo analítico desse expoente, em processo de estudo, permitirá compreender os resultados obtidos numericamente.

APPENDIX A: BANDA DE CONDUÇÃO TRIDIAGONAL

A banda de condução deve ser representada na forma tridiagonal, de acordo com uma construção de Lanczos [25], para melhor proveito dos resultados com o grupo de renormalização numérico. De acordo com a Eq. (3.16), a banda de condução será indicada por

$$H_{bc} = \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} D \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n^z (f_{n+}^\dagger f_{(n+1)+} + f_{n-}^\dagger f_{(n+1)-} + \text{H.c.}) \quad (\text{A1})$$

Na Eq. (3.15) temos a banda de condução como

$$H_{bc} = \sum_k \epsilon(k) (C_k^{(+)\dagger} C_k^{(+)} + C_k^{(-)\dagger} C_k^{(-)}) \quad (\text{A2})$$

onde $C_k^{(+)}$ e $C_k^{(-)}$ são definidos pela Eq. (3.6). Pode-se estabelecer uma base de operadores $a_{l\pm}$, $a_{lm\pm}$, $b_{l\pm}$ e $b_{lm\pm}$ em que

$$\begin{aligned} a_{l\pm} &= \int_{-1}^1 dk (\Phi_l^{(+)}(k))^* C_k^{(\pm)} & b_{l\pm} &= \int_{-1}^1 dk (\Phi_l^{(-)}(k))^* C_k^{(\pm)} \\ a_{lm\pm} &= \int_{-1}^1 dk (\Psi_{lm}^{(+)}(k))^* C_k^{(\pm)} & b_{lm\pm} &= \int_{-1}^1 dk (\Psi_{lm}^{(-)}(k))^* C_k^{(\pm)} \end{aligned} \quad (\text{A3})$$

onde $\Phi_l^{(\pm)}(k)$ e $\Psi_{lm}^{(\pm)}(k)$ são descritos pelas Eq. (2.9) e (2.10). Nessa base, os operadores $f_{0\pm}$ são expressos por

$$f_{0\pm} = \left(\frac{1 - \Lambda^{-z}}{2}\right)^{\frac{1}{2}} (a_{0\pm} + b_{0\pm}) + \left(\frac{1 - \Lambda^{-1}}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{m=0}^{\infty} \Lambda^{-(\frac{m+z}{2})} (a_{0m\pm} + b_{0m\pm}). \quad (\text{A4})$$

e usando as mesmas considerações descritas na pág. 25, representa-se a banda de condução como

$$\begin{aligned} H_{bc} &= \frac{1 + \Lambda^{-z}}{2} \sum_{p=\pm} (a_{0p}^\dagger a_{0p} - b_{0p}^\dagger b_{0p}) + \\ &+ \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{p=\pm} \Lambda^{-(m+z)} (a_{0m,p}^\dagger a_{0m,p} - b_{0m,p}^\dagger b_{0m,p}) \end{aligned} \quad (\text{A5})$$

Fazendo $H = \frac{2}{(1+\Lambda^{-1})D} H_{bc}$ nas Eq. (A1) e (A5), e calculando o comutador com f_{0+} , vemos que

$$\begin{aligned} [H, f_{0+}^\dagger] &= \left(\frac{1 - \Lambda^{-z}}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1 + \Lambda^{-z}}{1 + \Lambda^{-1}}\right) (a_{0+}^\dagger - b_{0+}^\dagger) + \\ &+ \left(\frac{1 - \Lambda^{-1}}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{m=0}^{\infty} \Lambda^{-\frac{3(m+z)}{2}} (a_{0m+}^\dagger - b_{0m+}^\dagger) \\ &= \epsilon_0^z f_{1+}^\dagger \end{aligned} \quad (\text{A6})$$

Anticomutando o Hermitiano conjugado da Eq. (A6) com esta, e determinando o valor de ϵ_0^z temos

$$\epsilon_0^z = \left[\left(\frac{1 + \Lambda^{-z}}{1 + \Lambda^{-1}} \right)^2 (1 + \Lambda^{-z}) + \Lambda^{-3z} \left(\frac{1 - \Lambda^{-1}}{1 - \Lambda^{-3}} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{A7})$$

Repetindo o processo, calcula-se o comutador de H com a Eq. (A6), obtendo-se

$$\begin{aligned} [H, [H, f_{0+}^\dagger]] &= \left(\frac{1 - \Lambda^{-z}}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1 + \Lambda^{-z}}{1 + \Lambda^{-1}} \right)^2 (a_{0+}^\dagger + b_{0+}^\dagger) + \\ &\quad + \left(\frac{1 - \Lambda^{-1}}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{m=0}^{\infty} \Lambda^{-\frac{5(m+z)}{2}} (a_{0m+}^\dagger + b_{0m+}^\dagger) \\ &= -(\epsilon_0^z)^2 f_{0+}^\dagger - \epsilon_0^z \epsilon_1^z f_{2+}^\dagger, \end{aligned} \quad (\text{A8})$$

de onde encontramos ϵ_1^z . Desse modo, calculando sucessivamente o comutador de H com $f_{0+}^\dagger$ N vezes, vemos que

$$\begin{aligned} \overbrace{[H, [H, \dots, [H, [H, f_{0+}^\dagger]] \dots]]}^N &= [H, f_{0+}^\dagger]_N \\ &= \left(\frac{1 - \Lambda^{-z}}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1 + \Lambda^{-z}}{1 + \Lambda^{-1}} \right)^N (a_{0+}^\dagger + (-1)^N b_{0+}^\dagger) + \\ &\quad + \left(\frac{1 - \Lambda^{-1}}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{m=0}^{\infty} \Lambda^{-(2N+1)\frac{(m+z)}{2}} (a_{0m+}^\dagger + (-1)^N b_{0m+}^\dagger) \\ &= \epsilon_0 \epsilon_1 \dots \epsilon_{N-1} f_{N+}^\dagger + \\ &\quad + (\text{termos sem } f_{N+}^\dagger \text{ e } \epsilon_{(N-1)}) \end{aligned} \quad (\text{A9})$$

onde calcula-se o valor de ϵ_{N-1} , sendo conhecido $\epsilon_{N-2}, \dots, \epsilon_1$ e ϵ_0 . Procurando um processo de cálculo numérico para os ϵ_n^z , vemos que é possível representar H como

$$H = H_N + \epsilon_N^z f_{(N+1)+}^\dagger f_{N+} + R_N, \quad (\text{A10})$$

em que H_N possui os termos ϵ_n^z com $0 \leq n < N$, e R_N é o complemento para H dos dois primeiros termos a direita. Comutando H com a expressão em (A9), temos que

$$\begin{aligned} [H, [H, f_{0+}^\dagger]_N] &= [H_N, [H_N, f_{0+}^\dagger]_N] + [\epsilon_N^z f_{(N+1)+}^\dagger f_{N+}, [H, f_{0+}^\dagger]_N] + \\ &\quad + [R_N, [H, f_{0+}^\dagger]_N] \end{aligned} \quad (\text{A11})$$

Pode-se definir um vetor $F = (f_{0+}, f_{1+}, \dots, f_{N+})$ e assim $H_N = F^\dagger \mathcal{H} F$, onde

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} 0 & \epsilon_0 & 0 & 0 & & 0 \\ \epsilon_0 & 0 & \epsilon_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \epsilon_1 & 0 & \epsilon_2 & & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_2 & 0 & & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & \epsilon_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \epsilon_{N-1} & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A12})$$

sendo possível acompanhar numericamente o valor do comutador de H_N com $f_{0+}^\dagger$, resultando

$$[H_N, f_{0+}^\dagger] = F^\dagger[\mathcal{H}]_1 \quad (\text{A13})$$

onde o índice 1 indica a primeira coluna da matriz definida em (A12). Para o primeiro termo da Eq. (A11) temos então

$$[H_N, f_{0+}^\dagger]_{N+1} = F^\dagger[\mathcal{H}^{N+1}]_1 \quad (\text{A14})$$

O terceiro termo de (A11) é nulo; o segundo termo, de acordo com Eq. (A9), resulta em

$$[\epsilon_N^z f_{(N+1)+}^\dagger f_{N+}, [H, f_{0+}^\dagger]_N] = \epsilon_0^z \epsilon_1^z \dots \epsilon_{N-1}^z \epsilon_N^z f_{(N+1)+}^\dagger \quad (\text{A15})$$

Assim

$$[H, [H, f_{0+}^\dagger]_N] = F^\dagger[\mathcal{H}^{N+1}]_1 + \epsilon_0^z \epsilon_1^z \dots \epsilon_{N-1}^z \epsilon_N^z f_{(N+1)+}^\dagger \quad (\text{A16})$$

Calculando o comutador da Eq. (A16) com o seu Hermitiano conjugado e evidenciando o termo com ϵ_n^z , temos

$$(\epsilon_0^z \epsilon_1^z \dots \epsilon_{N-1}^z \epsilon_N^z)^2 = F_N(z, \Lambda) - [\mathcal{H}^{2(N+1)}]_{11} \quad (\text{A17})$$

em que

$$F_N(z, \Lambda) = (1 - \Lambda^{-z}) \left(\frac{1 + \Lambda^{-z}}{1 + \Lambda^{-1}} \right)^{2(N+1)} + \Lambda^{-(2N+3)z} \left(\frac{1 - \Lambda^{-1}}{1 - \Lambda^{-(2N+3)}} \right) \quad (\text{A18})$$

No caso em que $z = 1$, é possível obter uma expressão analítica para ϵ_n^z [8] onde

$$\epsilon_n^1 = \frac{(1 - \Lambda^{-1})(1 - \Lambda^{-(n+1)})\Lambda^{-n/2}}{2(1 - \Lambda^{-(2n+3)})^{1/2}} (1 - \Lambda^{-(2n+1)})^{1/2} \quad (\text{A19})$$

APPENDIX B: HAMILTONIANO KONDO - DUAS IMPUREZAS

Podemos representar o modelo Kondo de duas impurezas por um Hamiltoniano que utilize a simetria de uma base centrada entre as impurezas, como veremos a seguir. Inicialmente, tem-se o mesmo como

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\sigma} - J[s_1(-\frac{1}{2}\mathbf{R}) \cdot \mathbf{S}_1 + s_2(+\frac{1}{2}\mathbf{R}) \cdot \mathbf{S}_2] \quad , \quad (\text{B1})$$

onde $-\frac{1}{2}\mathbf{R}$ e $+\frac{1}{2}\mathbf{R}$ são as posições dos momentos magnéticos localizados $\mathbf{S}_1$ e $\mathbf{S}_2$; $a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}$ cria um elétron de estado $\mathbf{k}$ e spin σ na banda de condução e s_1 e s_2 são definidos por

$$s_1 = a^{\dagger}(-\frac{1}{2}\mathbf{R})\sigma a(-\frac{1}{2}\mathbf{R}) \quad \text{e} \quad s_2 = a^{\dagger}(\frac{1}{2}\mathbf{R})\sigma a(\frac{1}{2}\mathbf{R}) \quad , \quad (\text{B2})$$

nas quais $a(\pm\frac{1}{2}\mathbf{R})$ são estados de Wannier dos elétrons de condução para as impurezas. Completando o segundo termo da Eq. (B1) será possível escrevê-la como

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\sigma} - (J/2)[(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2) \cdot (s_1 + s_2) + (\mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_2) \cdot (s_1 - s_2)] \quad (\text{B3})$$

Devido os operadores $a(+\frac{1}{2}\mathbf{R})$ e $a(-\frac{1}{2}\mathbf{R})$ não comutarem, definem-se operadores Ψ_e e Ψ_o que aproveitam a base centrada entre os momentos localizados, assim

$$\begin{aligned} \Psi_e &= \frac{1}{2u_e} [a(\frac{1}{2}\mathbf{R}) + a(-\frac{1}{2}\mathbf{R})] \\ &= \frac{1}{2u_e} \sum_{\mathbf{k}} [(\exp(i\mathbf{k} \cdot \frac{1}{2}\mathbf{R}) + \exp(-i\mathbf{k} \cdot \frac{1}{2}\mathbf{R})) a_{\mathbf{k}e}] \\ &= \frac{1}{u_e} \sum_{\mathbf{k}} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) a_{\mathbf{k}e} = \frac{1}{u_e} \sum_{\mathbf{k}} g_e(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}e} \quad \text{e} \\ \Psi_o &= \frac{1}{2u_o} [a(\frac{1}{2}\mathbf{R}) - a(-\frac{1}{2}\mathbf{R})] = \frac{1}{u_o} \sum_{\mathbf{k}} g_o(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}o} \quad , \end{aligned} \quad (\text{B4})$$

onde

$$a_{\mathbf{k}e} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}) \quad , \quad a_{\mathbf{k}o} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{\mathbf{k}} - a_{-\mathbf{k}}) \quad , \quad (\text{B5})$$

$$g_o(\mathbf{k}) = \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) \quad , \quad g_e(\mathbf{k}) = i \operatorname{sen}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) \quad \text{e} \quad (\text{B6})$$

u_e e u_o são constantes de normalização. Expressando $a(\pm\frac{1}{2}\mathbf{R})$ em termo dos operadores Ψ_e e Ψ_o e substituindo na Eq. (B2), encontra-se que

$$\begin{aligned}
s_1 + s_2 &= 2[u_o^2 \Psi_o^\dagger \sigma \Psi_o + u_e^2 \Psi_e^\dagger \sigma \Psi_e] \quad e \\
s_1 - s_2 &= 2[u_o^* u_e \Psi_o^\dagger \sigma \Psi_e + u_e^* u_o \Psi_e^\dagger \sigma \Psi_o] \quad .
\end{aligned} \tag{B7}$$

Assim, é possível escrever o Hamiltoniano como sendo

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}e}^\dagger a_{\mathbf{k}e} + a_{\mathbf{k}o}^\dagger a_{\mathbf{k}o}) + \\
&- J \left[\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} (S_1 + S_2) \cdot (g_o^*(\mathbf{k}) g_o(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}o}^\dagger \sigma a_{\mathbf{k}o} + g_e^*(\mathbf{k}) g_e(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}e}^\dagger \sigma a_{\mathbf{k}e} + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} (S_1 - S_2) \cdot (g_o^*(\mathbf{k}) g_e(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}o}^\dagger \sigma a_{\mathbf{k}e} + g_e^*(\mathbf{k}) g_o(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}e}^\dagger \sigma a_{\mathbf{k}o}) \right] \quad . \tag{B8}
\end{aligned}$$

em que o termo cinético foi encontrado invertendo-se as relações de (B5) e substituindo no primeiro termo da Eq. (B3). No estudo do modelo em temperaturas baixas, temos que a dependência com $\mathbf{k}$ nas constantes de acoplamento g_e e g_o é praticamente constante [17], possibilitando aproximar as mesmas pelo valor em k_F ; dessa forma, após a integração angular, temos

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}e}^\dagger a_{\mathbf{k}e} + a_{\mathbf{k}o}^\dagger a_{\mathbf{k}o}) + \\
&+ \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [(S_1 + S_2) \cdot (J_e a_{\mathbf{k}'e}^\dagger \sigma a_{\mathbf{k}e} + J_o a_{\mathbf{k}'o}^\dagger \sigma a_{\mathbf{k}o}) + \\
&\quad + (S_1 - S_2) \cdot (i J_m a_{\mathbf{k}'o}^\dagger \sigma a_{\mathbf{k}e} + \text{H.c.})] \tag{B9}
\end{aligned}$$

onde

$$J_{e,o} = \frac{J}{2} \left(1 \pm \frac{\sin(k_F R)}{k_F R} \right) \quad e \quad J_m = \sqrt{J_e J_o}. \tag{B10}$$

APPENDIX C: TAXA DE TRANSIÇÃO

A absorção de raio-X em metais permite que um elétron localizado em orbital mais profundo passe à banda de condução. A transição desse elétron determina que os elétrons de condução, numa quantidade N da ordem de 10^{23} , blindem o buraco criado na banda de valência. A princípio, sendo os estados finais ortogonais ao estado inicial, a transição seria impossível; no entanto, esta ortogonalidade é válida para $N \rightarrow \infty$, ou seja, no limite termodinâmico. Com um número finito de elétrons envolvidos no processo, o cálculo da taxa de transição entre os estados inicial ($|I\rangle$, um estado de N partículas localizadas abaixo do nível de Fermi) e final ($\langle F|$, estado de N partículas com um buraco criado na banda de valência) é indicado por

$$\Gamma_{\pm}(\omega) = \sum_{\langle F|} |\langle F | H_x | I \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_T + E_I - E_F) ,$$

onde $\langle F | H_x | I \rangle$ é o determinante da matriz obtida pelo produto dos dois determinantes de Slater envolvidos; ω é a energia fornecida ($\hbar = 1$), relacionada com a frequência do raio-X e ω_T é a energia mínima para um elétron de um orbital localizado atingir a banda de condução; H_x é representado por

$$H_x(t) = \langle k | \frac{-e}{mc} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) | d \rangle c_k^\dagger d + H.c.,$$

na qual $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ é o potencial vetor do elétron com momento $\mathbf{p}$ espalhado pelo raio-X.

Em especial, no caso do Hamiltoniano de Falicov e Kimball de duas impurezas, os autoestados finais e iniciais são obtidos pela diagonalização dos Hamiltonianos

$$\begin{aligned} H_I &= H_{bc} - 2G[A_+^2 f_{0+}^\dagger f_{0+} + A_-^2 f_{0-}^\dagger f_{0-} - \frac{1}{2}] \quad \text{e} \\ H_F &= H'_{bc} + 2GA_+ A_- [(f_{0+}^\dagger f'_{0+} - f_{0-}^\dagger f'_{0-})] \end{aligned} \quad (C1)$$

nos quais têm-se duas e uma impureza preenchida respectivamente, que foram definidos na Eq. (3.36); nesses Hamiltonianos a banda de condução foi discretizada com um parâmetro Λ , determinando uma base de $f_{n\pm}$'s, definida no Apêndice A. A base para H_F , em relação aos operadores $f_{n\pm}$'s e $d_{\pm}$, é

$$f'_{n\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(f_{n+} \pm f_{n-}) \quad \text{e} \quad d'_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(d_+ \pm d_-) \quad (C2)$$

Sendo os Hamiltonianos da Eq. (C1) quadráticos, permitem diagonalização numérica. Como vimos, a definição de $| I >$ envolve o preenchimento dos autoestados abaixo do nível de Fermi do Hamiltoniano H_I , definindo um estado de N partículas, descrito por um determinante de Slater, assim como o estado $| F >$. Definidos $| I >$ e $| F >$ para valores de G , A_+ e A_- , o cálculo da taxa de transição em uma determinada iteração N' , através do determinante da matriz $S_{N'} = \langle F | H_x | I \rangle$, é imediato. A convergência nos resultados ocorre à medida que o número de iterações N' aumenta.

REFERÊNCIAS

- [1] J. P. Franck, F. D. Manchester e D. L. Martin, Proc. Roy. Soc. (London) **a263**, 494 (1961).
- [2] J. Kondo, Progress of Theoretical Physics, **32**, 37 (1964).
- [3] Proceedings of the International Conference on the Metal-Nonmetal Transition, Review of Modern Physics **40**, 673 (1968).
- [4] L. M. Falicov e J. C. Kimball, Physical Review Letters **22**, 997 (1969).
- [5] R. Ramirez, L. M. Falicov e J. C. Kimball, Physical Review B **2**, 3383 (1970).
- [6] J. M. Robinson, Physics Reports **51**, 1 (1979).
- [7] C. E. T. Gonçalves da Silva e L. M. Falicov, Solid State Commun. **17**, 1521 (1975).; M. Avignon e S. K. Ghatak, Solid State Commun. **16**, 1243 (1975). ; D. I. Khomskii e A. N. Kochargan, Solid State Commun. **18**, 985 (1976).
- [8] K. G. Wilson, Review of Modern Physics **47**, 773 (1975).
- [9] P. B. Vigman e A. M. Finkelshtein, Sov. Phys. JETP **48**, 102 (1978).
- [10] P. Schlottmann, J. Magn. Magn. Mat. **7**, 72 (1978).
- [11] V. J. Emery e A. Luther, Physical Review B **9**, 215 (1974).
- [12] L. N. Oliveira e J. W. Wilkins, Physical Review Letters **47**, 1553 (1981).
- [13] L. N. Oliveira, tese (não publicada), Cornell University, Ithaca, N.Y. (1981).
- [14] P. Nozières e A. Blandin, J. Physique **41**, 193 (1980); P. Nozières, J. Low Temp. Phys. **17** (1974).
- [15] A. M. Tsvelick e P. B. Wiegmann, Adv. Phys. **32**, 453 (1983); N. Andrei, K. Furuya e J. H. Lowenstein, Review of Modern Physics **55**, 331 (1983).

- [16] C. Jayaprakash, H. R. Krishna-murthy e J. W. Wilkins, *Physical Review Letters* 47, 737 (1981).
- [17] B. A. Jones e C. M. Varma, *Physical Review Letters*, 58, 843 (1987).
- [18] B. A. Jones, C. M. Varma e J. W. Wilkins, *Physical Review Letters* 61, 125 (1988);
B. A. Jones e C. M. Varma, *Physical Review B*, 40, 324 (1989).
- [19] C. M. Varma, *Theory of Heavy Fermions and Valence Fluctuations*, pág. 277
(Springer-Verlag, New York, 1985).
- [20] A. W. W. Ludwig e Ian Affleck, *Physical Review Letters* 67, 3160 (1991).
- [21] R. M. Fye, J. E. Hirsch e D. J. Scalapino, *Physical Review B* 35, 4901 (1987).
- [22] P. Schlottmann e J. W. Rasul, *Physica B* 163, 544 (1990).
- [23] B. A. Jones, *Physica B* 171, 53 (1991).
- [24] M. Yoshida, M. A. Whitaker e L. N. Oliveira, *Physical Review B* 41, 9403 (1990).
- [25] M. J. Kelly, em *Solid State Physics*, editado por H. Ehrenreich, F. Seitz e D. Turnbull
(Academic Press, New York, 1980), vol. 35, pág. 296.
- [26] H. R. Krishnamurthy, J. W. Wilkins e R. G. Wilson, *Physical Review B* 21, 1003
(1980).
- [27] V. L. Líbero e L. N. Oliveira, *Physical Review Letters* 65, 2042 (1990).
- [28] W. P. Beyermann, M. F. Hundley, P. C. Canfield, J. D. Thompson, Z. Fisk e J. L.
Smith, *Physical Review Letters* 66, 3289 (1991).
- [29] C. Godart, L. C. Gupta, C. V. Tomy, J. D. Thompson e R. Vijayaraghavan,
Europhysics Letters 8, 375 (1989).