UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA E INFORMÁTICA

ASSIMETRIA PARTÍCULA-BURACO NO MODELO
DE KONDO DE DUAS IMPUREZAS

Washington Luiz Carvalho Lima

*Tese apresentada ao Instituto de Física de
São Carlos, Universidade de São Paulo, para
obtenção do Título de Doutor em Física Básica*

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

SÃO CARLOS

1997

Lima, Washington L. C.

Assimetria partícula-buraco no modelo de Kondo de duas impurezas
/Washington L. C. Lima.–São Carlos, 1997.

107 p.

Tese (Doutorado)–Instituto de Física de São Carlos, 1997.

Orientador: Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

1. Metais . 2. Modelo de Kondo. 3. Propriedades termodinâmicas.

I. Título.

**UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO**

Instituto de Física de São Carlos

Av. Dr. Carlos Botelho, 1465
CEP 13560-250 - São Carlos - SP
Brasil

Fone (016) 272-6222

Fax (016) 272-2218

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE
WASHINGTON LUIZ CARVALHO LIMA APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA
DE SÃO CARLOS, UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 03/03/1997.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Luis Nunes de Oliveira (IFSC/USP)

Profa. Dra. Sonia Frota Pessoa (IF/USP)

Prof. Dr. Gilmar Eugênio Marques (UFSCar)

Prof. Dr. José D'Albuquerque Castro (UFF)

Prof. Dr. Valter Luis Líbero (IFSC/USP)

Aos meus pais

*Este trabalho foi financiado pela **PICD/CAPES,**
CNPq, FAPESP e UNITINS*

Agradecimentos

- Agradeço de uma forma muito especial ao meu orientador, Prof . *Luiz Nunes de Oliveira*, pela sua conduta, sua honestidade e seu apoio durante esses quatro intensos anos. Foi para mim um grande prazer poder trabalhar com o Luiz. Como meu orientador, sempre se mostrou entusiasmado, dedicado e prestativo na sua tarefa de formar mais um cientista. Não teria como expressar, em poucas palavras, a minha eterna gratidão por essa pessoa.
- Meus agradecimentos aos profs. *Valter Libero* e *Lidério Ioriatti* pelas excelentes discussões durante todo o doutorado e pela interesse que sempre demonstraram na minha formação.
- Aos meus companheiros de grupo *Jeremias*, *Wanda* e *Melquisedech* com quem interagi mais fortemente no início dessa jornada e cuja colaboração foi decisiva na elaboração deste trabalho; e também aos outros que chegaram mais recentemente e que me ajudaram bastante na reta final: *Cíntia*, *João Vitor*, *Marcelo*,...
- Agradeço de forma especial aos amigos *Salviano*, *Márcio* e *Virgílio* que me acompanham desde o mestrado e que me proporcionaram momentos muita alegria aqui em São Carlos.
- Agradeço ao Amigo *José Carlos Egues* pela atenção e solidariedade que me dedicou quando da minha estada nos Estados Unidos. Nosso amizade se consolidou nesse período e espero que continue para sempre.
- A *Iracema Cusati*, minha maior amizade nesse período e com quem passei momentos agradáveis que jamais esquecerei.
- A todos os amigos com quem convivi em todo esse periodo do doutorado.
- Agradeço a minha família. Tenho certeza que é com trabalho e estudo que posso retribuir tudo o apoio que meus pais e irmãos sempre me proporcionaram.

Índice

Lista de Figuras	iv
Lista de Tabelas	vi
Resumo	vii
Abstract	viii
1 Introdução	1
1.1 Modelo de Kondo de uma impureza	2
1.2 Modelo com duas impurezas	5
1.2.1 Características gerais do modelo Kondo de duas impurezas	5
1.2.2 Revisão da teoria	6
1.3 Sistemas magnéticos correlacionados	16
1.4 Organização geral do trabalho	19
2 Técnica do Grupo de Renormalização Numérico	21
2.1 Transformação para 1-D	21
2.2 Características importantes do modelo de Kondo de duas impurezas	26
2.3 Discretização logarítmica	29
2.4 Tridiagonalização da banda de condução	35
2.5 Truncamento e a transformação do GRN	39
2.6 Procedimento recursivo	41
2.7 As simetrias do modelo	43
3 Propriedades termodinâmicas para temperatura finita	45
3.1 Interação RKKY	45
3.2 Cálculo das propriedades termodinâmicas	48

3.2.1	Cálculo da susceptibilidade magnética	48
3.3	Resultados para susceptibilidade	49
3.4	$T \rightarrow 0$ no regime antiferromagnético: susceptibilidade de Van-Vleck	56
4	Propriedades termodinâmicas para $T=0$	61
4.1	A transformação do GRN e os pontos fixos	61
4.1.1	Ponto fixo de elétrons livres	62
4.1.2	Ponto fixo de elétrons livres com potencial de espalhamento	66
4.2	Defasagens da banda de condução	69
4.3	Susceptibilidade e o coeficiente do calor específico a $T=0$	72
4.4	Universalidade no regime antiferromagnético	76
4.4.1	Susceptibilidade	76
4.4.2	Coeficiente linear do calor específico	79
4.5	Discussão	81
5	Conclusões	83
	Apêndices	88
A	Tridiagonalização da banda de condução	88
A.1	Procedimento Formal das Quadraturas Gaussianas	89
A.2	Quadratura Gaussiana e banda de condução tridiagonal	90
A.3	Função peso	93
A.4	Procedimento prático	95
A.5	Autovalores do Hamiltoniano tridiagonal e as energias da banda de condução	98
B	Ponto fixo para $T=0$	100
B.1	Hamiltoniano de elétrons livres com potencial de espalhamento	100
B.1.1	Solução assintótica	103
B.1.2	Correção $\Delta X(\eta_j)$ e defasagem para $\tilde{K} \rightarrow \infty$	105
B.2	Gráficos das energias em função de K	107
B.3	O operador A_1	108
C	Termodinâmica para $T \rightarrow 0$	111
C.1	Hamiltoniano efetivo no ponto fixo e relevância dos operadores	111

C.2	Operadores do Hamiltoniano efetivo para ponto fixo de baixas temperaturas	113
C.3	Cálculo das propriedades termodinâmicas para $T=0$:	119

Lista de Figuras

1.1	Curva universal da susceptibilidade magnética.	4
1.2	Curvas da susceptibilidade magnética $T\chi_{imp}$ para o modelo Kondo de duas impurezas	8
1.3	Curvas da susceptibilidade uniforme (χ') e <i>staggered</i> (χ'_s) e o coeficiente do calor específico (γ')	10
1.4	Curvas da resistividade por concentração de Ce em função da temperatura para o composto $(\text{Ce}_x\text{La}_{1-x})\text{Pb}_3$	18
2.1	Relação de dispersão linear para a banda de condução utilizada em nossa abordagem	28
2.2	Representação esquemática do estado fundamental no Hamiltoniano Kondo de duas impurezas <i>simétrico</i>	30
2.3	Discretização da banda de condução pelo método intercalado	32
2.4	Cadeia linear equivalente à banda de condução	35
2.5	Representação esquemática dos sucessivos estágios do processo de diagonalização	43
3.1	Diagrama de Feynman para a interação RKKY	46
3.2	Interação <i>RKKY</i> I em função da separação entre as impurezas	47
3.3	Dependência térmica do momento efetivo ao quadrado	52
3.4	Susceptibilidade magnética a baixas temperaturas no regime antiferromagnético	57
3.5	Representação esquemática do estado fundamental do regime antiferromagnético	57
4.1	Defasagem δ da banda de condução no nível Fermi em função de $I/k_B T_K$	70

4.2	Susceptibilidade magnética das impurezas χ_{imp} a $T = 0$ para diferentes valores da assimetria Δ	73
4.3	Coeficiente linear do calor específico das impurezas γ_{imp} para $T = 0$	74
4.4	Curva universal da susceptibilidade como função da razão $\frac{I}{k_B T_K}$	77
4.5	Inverso do fator de normalização da susceptibilidade	78
4.6	Curva universal para o coeficiente linear do calor específico	80
4.7	Inverso do fator de normalização do calor específico N_γ	80
B.1	Níveis de energia do ponto fixo de elétrons livres com potencial de espalhamento K para N par	108
B.2	Níveis de energia do ponto fixo de elétrons livres com espalhamento K para N ímpar.	109

Lista de Tabelas

2.1	Coeficientes da banda de condução tridiagonal. t_{np} é o coeficiente codiagonal calculado pelo procedimento numérico definido pela relação 2.42, enquanto que $t_{np}(\text{assint.})$ é dado pela expressão assintótica 2.47. O coeficiente diagonal ε_{np} é calculado a partir da relação 2.41 e para $n > N_M$ pode ser assumido como zero.	39
4.1	Autoestados para o ponto fixo de elétrons livres com potencial de espalhamento. Estão listados alguns estados de muitos corpos, para iterações com N ímpar, representados pelos índices quânticos (Q,S,P,r) . . .	68
4.2	Parâmetros de escala das curvas universais. A interação RKKY é obtida pela expressão perturbativa 3.3. As fases limites do regime Kondo (δ_0) são dadas pela eq. 4.21 e tende a $\pi/2$ quando a assimetria $\Delta \rightarrow 0$. Neste limite a normalização do calor específico N_γ diverge enquanto que a normalização da susceptibilidade N_χ permanece finita.	77

Resumo

Este trabalho tem como objetivo estudar as propriedades termodinâmicas do Hamiltoniano Kondo de duas impurezas. Desenvolvemos uma extensão da técnica do grupo de renormalização numérico (GRN) que permite diagonalizar o modelo Kondo de duas impurezas convencional preservando a sua assimetria partícula-buraco. Essa assimetria elimina o ponto crítico, com propriedades de líquido não de Fermi, encontrado dez anos atrás em trabalhos que estudaram o modelo simétrico usando o GRN ou a invariância conforme. Nossos resultados para a susceptibilidade, o calor específico e a defasagem da banda de condução em $T = 0$ mostram uma dependência contínua com a razão $I/k_B T_K$, onde I é a interação $RKKY$ e T_K é a temperatura de Kondo. Esses resultados contrastam com os do Hamiltoniano simétrico que apresenta uma divergência no calor específico e uma descontinuidade na defasagem para o ponto crítico $I/k_B T_K \sim 2.2$. Calculamos, também, a dependência térmica da susceptibilidade magnética das impurezas. Nossas curvas são qualitativamente equivalentes às encontradas num cálculo recente do GRN no modelo simétrico e confirmam os resultados qualitativos, obtidos no início dos anos 80, baseados na técnica de *scaling* perturbativo: (i) Para $|I| \ll k_B T_K$, a susceptibilidade magnética por impureza é idêntica à de uma impureza isolada. (ii) Para $I \gg k_B T_K$ (interação $RKKY$ antiferromagnética) as impurezas formam um estado fundamental singlete desacoplado da banda de condução. (iii) Para $-I \gg k_B T_K$ (acoplamento $RKKY$ ferromagnético), com o decréscimo da temperatura, as impurezas se acoplam inicialmente num estado tripleto, cujo momento efetivo é, então, compensado por um efeito Kondo de dois estágios. Para confirmar essa interpretação dos resultados numéricos, apresentamos expressões fenomenológicas que ajustam muito bem as susceptibilidades calculadas para os regimes nos quais as energias características do sistema dividem o eixo de temperatura.

Abstract

This thesis studies the thermodynamical properties of the two-impurity Kondo Hamiltonian. Our generalized numerical renormalization-group approach maintains the particle-hole asymmetry found in the conventional model, which asymmetry washes out the critical point with non-Fermi liquid properties discovered ten years ago in numerical and analytical studies of the symmetric model. Our computation of the low-temperature susceptibility, linear coefficient of the specific heat, and ground-state phase shifts shows smooth dependencies on the ratio $I/k_B T_K$, where I is the *RKKY* interaction and T_K the Kondo temperature. This contrasts with the symmetric Hamiltonian, which yields a specific-heat singularity and a sharp phase-shift discontinuity at the critical ratio $I/k_B T_K \sim 2.2$. We have also computed the temperature dependence of the impurity magnetic susceptibility. Our curves show the qualitative features encountered in a recent numerical renormalization-group study of the symmetric model and confirm the predictions of a scaling analysis carried out in the early 80's: (i) For $|I| \ll k_B T_K$, the per-impurity susceptibility mimics that of an isolated impurity. (ii) For $I \gg k_B T_K$ (*antiferromagnetic RKKY interaction*), the impurities tend to lock into a ground-state singlet decoupled from the conduction electrons. (iii) For $-I \gg k_B T_K$ (*ferromagnetic RKKY coupling*), as the temperature decreases, the impurities first lock into a triplet, whose effective moment is then screened in a two-stage Kondo effect. To further confirm this interpretation of the numerical results, we present phenomenological expressions that fit well the calculated susceptibilities for each regime into which the characteristic energy scales divide the temperature axis.

Capítulo 1

Introdução

Esta tese se dedica ao estudo das propriedades termodinâmicas do modelo Kondo de duas impurezas. Este modelo é interessante devido a competição entre dois efeitos: a interação *RKKY* [1–3] entre as impurezas e o efeito Kondo [4]. A interação *RKKY* I tende a alinhar os spins da impureza num estado singleto ou tripleto, dependendo do sinal de I . No efeito Kondo cada spin é compensado individualmente pelos elétrons de condução a sua volta gerando um estado fundamental singleto com energia característica $k_B T_K$. A competição entre essas duas energias características torna o problema bem complexo e uma rica variedade de comportamentos tem emergido [5–7].

Por razões históricas esse modelo tem sido estudado em duas versões: o modelo *simétrico* e o modelo *convencional* (ou *assimétrico*). A diferença entre eles é que o modelo *simétrico* é invariante sob transformação partícula-buraco [8]. Ambas as versões geram a competição entre I e $k_B T_K$, mas os dois modelos apresentam propriedades físicas bem diferentes: a principal diferença é a existência de um ponto crítico com propriedades de líquido não de Fermi separando o regime Kondo do regime antiferromagnético que só é encontrado no modelo *simétricos* [6, 9, 10]. Por essa razão, este modelo tem sido exaustivamente estudado nos últimos anos.

Nesta tese, estudaremos o modelo *convencional*, que neste contexto representa o modelo do Kondo de duas impurezas definido originalmente sem nenhuma aproximação

adicional, e para isso usaremos o método do grupo de renormalização numérico (GRN). Apresentamos um amplo estudo das propriedades do estado fundamental ($T = 0$). Em particular, calculamos susceptibilidade magnética das impurezas χ , o coeficiente linear do calor específico γ e a defasagem da banda de condução δ em função de $\frac{I}{k_B T_K}$. Com isso mostramos que a *assimetria* partícula-buraco elimina o ponto fixo, contribuindo para elucidar essa questão. Encontramos ainda um comportamento universal no regime antiferromagnético pela primeira vez reportado na literatura. Apresentamos, também, o primeiro cálculo preciso da susceptibilidade em função da temperatura $\chi(T)$, propriedade que, mesmo para o modelo *simétrico*, só recentemente havia sido calculada [11].

1.1 Modelo de Kondo de uma impureza

Antes de apresentar o modelo Kondo de duas impurezas é necessário se entender as propriedades do modelo com uma impureza. O modelo de uma impureza foi proposto para descrever sistemas de impurezas magnéticas diluídas em metais não magnéticos e, hoje, é bem compreendido, tendo sido estudado por várias técnicas [4, 12, 13]. Uma propriedade característica dos sistemas diluídos é o mínimo da resistividade em função da temperatura, observado a baixas temperaturas. Em 1964, Kondo [14] propôs um modelo em que um momento localizado, associado a um spin S , se acopla antiferromagneticamente por uma interação J com os elétrons de condução. Com isso, ele explicou a existência do mínimo na resistividade. O modelo de Kondo é descrito pelo Hamiltoniano

$$H = \sum_{\vec{k}\mu} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\mu}^\dagger c_{\vec{k}\mu} + J \sum_{\substack{\vec{k}\vec{k}' \\ \mu\mu'}} \vec{S} \cdot c_{\vec{k}\mu}^\dagger \frac{1}{2} \vec{\sigma}_{\mu\mu'} c_{\vec{k}'\mu'} , \quad (1.1)$$

onde o primeiro termo é a energia cinética da banda de condução e o segundo representa a interação entre o spin $\vec{S}$ da impureza e o spin da banda de condução.

Kondo mostrou, usando teoria de perturbação de 2ª ordem em J , que essa interação gera um espalhamento singular dos elétrons de condução próximos ao nível de Fermi e

consequentemente uma contribuição proporcional a $\ln(1/T)$ para a resistividade. Embora esse resultado perturbativo explicasse o mínimo na resistividade, ele apresenta uma divergência quando $T \rightarrow 0$ que não é observada experimentalmente e não faz sentido teoricamente. Durante a década de 60 vários cálculos perturbativos procuraram eliminar as divergências a baixas temperaturas, mas as técnicas refinadas assim geradas tiveram limitado sucesso.

A natureza do estado fundamental do problema de Kondo somente foi estabelecida quando Wilson [4] desenvolveu um método numérico baseado no formalismo do grupo de renormalização para estudar o modelo de Kondo. Wilson foi o primeiro a calcular precisamente uma propriedade física do modelo: a susceptibilidade magnética χ em função da temperatura. Seus resultados mostram que o momento magnético efetivo, definido por

$$\mu_{eff}^2 = \frac{k_B T \chi(T)}{(g\mu_B)^2}, \quad (1.2)$$

se anula quando $T \rightarrow 0$ e que o mesmo obedece uma relação de escala

$$\mu_{eff}^2 = F\left(\frac{T}{T_K}\right), \quad (1.3)$$

onde F é uma função universal e T_K , conhecida como a temperatura de Kondo, é dada por

$$k_B T_K = D(\rho J)^{1/2} \exp\left(-\frac{1}{|\rho J|}\right). \quad (1.4)$$

O gráfico universal de Wilson para o momento magnético é mostrado na Fig. 1.1. A altas temperaturas a susceptibilidade obedece à lei de Curie. Com o decréscimo da temperatura ela muda de comportamento para um magnetismo de Pauli, sendo a temperatura de transição em torno de T_K . A compensação do momento a baixas temperaturas indica estado fundamental não magnético.

Figura 1.1: Curva universal da susceptibilidade magnética $k_B \chi T$ em função de $\ln(\frac{T}{T_K})$ para o Hamiltoniano de Kondo com spin $\frac{1}{2}$. T_K é a temperatura Kondo que escala todas as propriedades do modelo. Resultados obtidos por Wilson [4] usando o grupo de renormalização numérico.

Resumidamente, o modelo Kondo de uma impureza apresenta as seguintes características: a altas temperaturas a impureza está fracamente acoplada ao gás de elétrons e o sistema se comporta como o de um spin livre. Quando a temperatura diminui a impureza se acopla cada vez mais fortemente aos elétrons de condução ao seu redor resultando, para temperaturas $T < T_K$, num estado fundamental singleto com o momento local completamente blindado. Os elétrons resultantes comportam-se como partículas livres sendo espalhados pelas impurezas magnéticas sofrendo um deslocamento de fase $\delta = \frac{\pi}{2}$. Este espalhamento reflete uma ressonância centrada no nível de Fermi. Ela é conhecida como “ressonância de Kondo” e tem largura proporcional a $k_B T_K$.

Depois do trabalho de Wilson, vários métodos confirmaram essa descrição e calcularam outras propriedades sendo que todas elas — susceptibilidade, calor específico, resistividade — são funções universais de T/T_K . O calor específico foi calculado por Oliveira e Wilkins [15] usando o método do grupo de renormalização numérico. Podemos destacar, também, os trabalhos de Andrei [16] e Wiegmann [17] que usaram o método

Bethe Ansatz para diagonalizar exatamente o modelo de Kondo e calcularam várias propriedades termodinâmicas. Esses resultados confirmaram os cálculos do GRN e hoje a termodinâmica do modelo é bem conhecida. As propriedades dinâmicas, tais como resistividade e densidade espectral, têm sido calculadas principalmente por técnicas perturbativas que exploram a degenerescência dos N graus de liberdade dos orbitais d ou f , que representam a impureza em versões mais realistas do modelo Kondo. Esses métodos — tais como: “non-crossing approximation” [13], “slave boson” [18] ou o método variacional de Gunnarsson-Schönhammer [19] — desenvolvem expansões sistemáticas em $1/N$ que é tratado como um parâmetro pequeno.

1.2 Modelo com duas impurezas

Neste trabalho vamos estudar o modelo de Kondo de duas impurezas, que será descrito nessa seção. Na primeira parte discutiremos as características gerais do modelo, mostrando as suas energias características. Na segunda será feita uma revisão dos principais trabalhos teóricos encontrados na literatura.

1.2.1 Características gerais do modelo Kondo de duas impurezas

O modelo Kondo de duas impurezas, extensão trivial do modelo de uma impureza, é definido pelo Hamiltoniano

$$H = \int d^3k \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}} + J \left[\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_c(\vec{R}_1) + \vec{S}_2 \cdot \vec{S}_c(\vec{R}_2) \right], \quad (1.5)$$

onde

$$\vec{S}_c(\vec{R}_j) = \sum_{\mu\mu'} \Psi_\mu^\dagger(\vec{R}_j) \frac{1}{2} \vec{\sigma}_{\mu\mu'} \Psi_{\mu'}(\vec{R}_j) \quad (1.6)$$

é o operador de spin para os elétrons da banda de condução no sítio $\vec{R}_j$.

Nesse modelo uma energia característica é a de Kondo, $k_B T_K$, dada pela Eq. (1.4), que corresponde à interação direta entre o spin da impureza e os elétrons de condução. Essa escala de energia governa a compensação do spin localizado com a correspondente formação de um estado fundamental singlete. Este é o efeito Kondo discutido na seção anterior. Por outro lado, as impurezas se acoplam indiretamente entre si através de interação mediada pelos elétrons de condução conhecida como interação *RKKY* [1–3]. A interação *RKKY* pode ser obtida tratando os termos J do Hamiltoniano como perturbação na energia cinética resultando num acoplamento efetivo da forma

$$H_{RKKY} = I \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

onde $\vec{S}_1$ e $\vec{S}_2$ são os spins das impurezas. A interação *RKKY* I é da forma $(\rho J)^2 F(R)$, onde ρ é a densidade de estados e R é a distância entre as impurezas. $F(R)$ é uma função oscilante entre valores positivos e negativos, da ordem da unidade para $R = 0$, e que decai rapidamente como $\cos(k_F R)/(k_F R)^3$ para $k_F R \gg 1$, onde k_F é o momento de Fermi.

A competição entre essas duas escalas de energia governa a física do problema de duas impurezas. A interação *RKKY* tende a ordenar os spins das impurezas num estado singlete ou tripleto, dependendo da interação ser antiferromagnética ou ferromagnética. Por outro lado, o efeito Kondo tende a quebrar esse ordenamento através da blindagem individual de cada spin. Portanto, dependendo dos parâmetros do modelo, podemos esperar a predominância de um ou outro acoplamento, levando a diferentes estados fundamentais.

1.2.2 Revisão da teoria

O problema de duas impurezas em metais começou a ser estudado na década de 60, com o trabalho pioneiro de Alexander e Anderson [20]. Usando o método de Hatree-Fock no modelo de Anderson de duas impurezas eles conseguiram mostrar, apesar da limitação

do método, que a interação entre as impurezas poderia ser tanto ferromagnética quanto antiferromagnética dependendo da distância entre elas.

***Scaling* perturbativo**

Um passo importante para se entender o modelo Kondo de duas impurezas foi dado por Jayaprakash et al [5] usando a técnica de *scaling* perturbativo. Esse método é baseado na eliminação dos estados de condução com mais altas energias, gerando Hamiltonianos efetivos que descrevem o sistema para temperaturas sucessivamente mais baixas. Uma importante contribuição foi mostrar que a banda de condução tridimensional do modelo pode ser reduzido a dois canais de elétrons de condução unidimensional, com paridades bem definidas em relação ao ponto médio entre as impurezas, isto é, um canal *par* e outro *ímpar*. Além disso, eles fizeram uma análise qualitativa da susceptibilidade magnética em função da temperatura cobrindo toda a região paramétrica de $I/k_B T_K$. Encontraram que, enquanto para altas temperaturas as duas impurezas tem comportamento praticamente independente, a física de baixas temperaturas é determinada pela razão $I/k_B T_K$. Mais precisamente encontraram três regimes limites característicos do problema:

(a) *Regime Kondo* ($k_B T_K \gg |I|$): Quando a temperatura diminui e fica da ordem de T_K as impurezas são compensadas por dois efeitos Kondo independentes e a interação *RKKY* praticamente não faz efeito. A situação é idêntica à de duas impurezas não interagentes.

(b) *Regime Antiferromagnético forte* ($I \gg k_B T_K$): Neste regime as impurezas se acoplam num estado fundamental singleto e não ocorre o efeito Kondo. A baixas temperaturas não há momento líquido resultante para ser compensado pelos elétrons de condução e o momento efetivo $T\chi$ vai rapidamente a zero.

(c) *Regime Ferromagnético forte* ($-I \gg k_B T_K$): Neste regime quando a temperatura alcança a interação I as impurezas se acoplam num estado tripleto. A partir daí com

Figura 1.2: Curvas da susceptibilidade magnética $T\chi_{imp}$ para o modelo Kondo de duas impurezas obtidos por Jayaprakash et al. [5]. Na curva A, onde $k_B T_K \gg |I|$, temos o regime Kondo e o resultado é idêntico ao de duas impurezas isoladas. Na curva B temos o regime antiferromagnético forte ($-I \gg k_B T_K$) com as impurezas se acoplando num singlete e o momento decaindo rapidamente a zero. O regime ferromagnético forte, $I \gg k_B T_K$, é mostrado na curva C, na qual o efeito Kondo de dois estágios é observado.

o decréscimo da temperatura ocorre o efeito *Kondo de dois estágios* com o momento compensado parcialmente para um spin efetivo $\frac{1}{2}$ seguido de uma compensação completa quando a temperatura vai a zero.

Neste quadro, ilustrado na Fig. 1.2, a transição entre um regime e outro, que corresponde a valores intermediários de $I/k_B T_K$, é feita de maneira suave. Essa análise descreve razoavelmente bem a física do problema Kondo de duas impurezas e, até 1987, representou uma visão aceita universalmente.

Polêmica no modelo Kondo de duas impurezas - Ponto crítico instável

No entanto, a história do modelo começou a mudar radicalmente a partir dos trabalhos de Jones et al [6, 9, 10]. Eles usaram o GRN para estudar as propriedades de baixas

temperaturas no modelo Kondo de duas impurezas e seus resultados questionavam algumas conclusões do trabalho de Jayprakash et al. Nesses cálculos foi utilizada uma aproximação que projeta os acoplamentos das impurezas com os canais *par* e *ímpar* sobre o nível de Fermi. Tal projeção elimina a dependência com a energia desses acoplamentos e assim os torna invariantes frente a transformação partícula-buraco. Como consequência o Hamiltoniano torna-se artificialmente invariante sob essa transformação. Os modelos com essa particular simetria são chamados modelos *simétricos*. Eles calcularam as propriedades do estado fundamental para ampla faixa da razão $I/k_B T_K$. Em particular, obtiveram a susceptibilidade magnética uniforme, a susceptibilidade magnética *staggered* e o calor específico para $T = 0$. Esses resultados são mostrados na Fig. 1.3 e podem ser resumidos da seguinte maneira:

(i) Para todos os acoplamentos RKKY ferromagnéticos ($I < 0$) e acoplamentos RKKY antiferromagnéticos fracos ($2.2k_B T_K < I < 0$) o estado fundamental é aquele de um efeito Kondo correlacionado. Os deslocamentos de fase no nível de Fermi são iguais a $\frac{\pi}{2}$ em ambos os canais par e ímpar. As propriedades dependem de ambos I e T_K e a universalidade, característica do modelo Kondo de uma impureza, é perdida. Na linguagem do GRN isso corresponde a um ponto fixo estável, neste caso, o ponto fixo de impureza acoplada (*correlated Kondo fixed point*), caracterizado por uma defasagem $\delta = \frac{\pi}{2}$.

(ii) Para interações RKKY antiferromagnéticas fortes ($I > 2.2k_B T_K$) as impurezas se acoplam num estado singleto e não ocorre o efeito Kondo. As defasagens da banda de condução no nível de Fermi são zero e correspondem ao ponto fixo estável de impureza congelada (*local moment singlet fixed point*).

(iii) A transição entre os dois regimes acima descritos é marcado por um ponto fixo instável para acoplamento antiferromagnético $-I \simeq 2.2k_B T_K$. A susceptibilidade *staggered* e o coeficiente linear do calor específico divergem enquanto que a susceptibilidade uniforme aparentemente é contínua. O estado fundamental não pode ser caracterizado por uma

Figura 1.3: Curvas da susceptibilidade uniforme (χ') e *staggered* (χ'_s) e o coeficiente do calor específico (γ') em função da razão interação $RKKY$ e a temperatura do Kondo. Estes são resultados para o modelo Kondo simétrico, obtido por Jones et al [6]. No regime antiferromagnético, χ'_s e γ' divergem no ponto fixo instável que ocorre para $I_0/T_K \approx -2.3$.

defasagem na banda de condução e este ponto fixo não pode ser descrito como líquido de Fermi.

A existência do ponto fixo, encontrado nos trabalhos de Jones, não teve consenso na comunidade científica. Na mesma época, Fye et al. [7, 21] usaram o método de Monte Carlo quântico para estudar o Hamiltoniano de Kondo e Anderson de duas impurezas *convencional*. Seus resultados para as propriedades termodinâmicas — susceptibilidade uniforme, susceptibilidade *staggered* e correlação entre as impurezas — embora mostrassem a competição entre I e $k_B T_K$ não apresentavam nenhum indício da existência do ponto crítico, ou seja, não mostravam evidências de comportamento singular. A discrepância entre os resultados desses dois métodos exatos gerou uma polêmica em torno da existência ou não deste ponto fixo que se tornou o principal foco de estudo nestes sistemas. Praticamente todos os trabalhos posteriores discutiram esse ponto e

apresentaram argumentos favoráveis ou contrários ao comportamento de líquido não de Fermi.

Trabalhos dedicados ao modelo simétrico

Millis et al [22] mostraram, baseado numa descrição de líquido de Fermi, que, para modelos com *simetria* partícula-buraco o deslocamento de fase da banda de condução só pode ser 0 ou $\frac{\pi}{2}$. Eles argumentaram, então, que a descontinuidade da fase de $\frac{\pi}{2}$ (regime Kondo) para 0 (regime antiferromagnético) e, conseqüentemente, o comportamento crítico é sempre previsto nos modelos *simétricos*. Num trabalho subsequente, Jones [23] adicionou um potencial de espalhamento V que quebra a simetria partícula-buraco nestes modelos. Seus resultados mostraram que a transição entre os dois regimes passa a ser contínua e que o ponto crítico com propriedades de líquido não de Fermi é substituído por uma linha de pontos fixos estáveis com propriedades dependentes do potencial V . Esse trabalho, de certa forma, prenuncia os nossos resultados; entretanto, o potencial de espalhamento foi introduzido fenomenologicamente.

Em 1992 Affleck e Ludwig [24] usaram a método de invariância conforme para estudar o modelo Kondo com simetria partícula-buraco. Eles argumentaram que a aproximação de desconsiderar a dependência em energia das constantes de acoplamento despreza apenas *operadores irrelevantes*. Desta forma, eles confirmaram a existência do ponto crítico e calcularam várias propriedades em torno da região de criticalidade tais como susceptibilidades, calor específico e espectro de energia. Esse último é de particular importância, pois pode ser comparado com os resultados numéricos do GRN.

Outro trabalho de interesse é o de Sire et al. [25], que estudaram o modelo *simétrico* usando Hamiltoniano efetivo Bosonizado com a teoria de campo médio. Seus resultados mostram a existência de um ponto crítico que apresenta invariância de escala para alguns parâmetros. Perto do ponto fixo o coeficiente linear do calor específico varia como $(I - I_c)^{-2}$

e a susceptibilidade *staggered* apresenta uma divergência logarítmica.

Recentemente Gan [26] analisou um Hamiltoniano Kondo com *simetria* partícula-buraco e apresentou uma solução assintoticamente exata para toda a região do espaço paramétrico em torno do ponto crítico. Esse é o estudo mais detalhado da região próxima ao ponto fixo. Ele calcula funções analíticas que descrevem o comportamento da susceptibilidade *staggered* e o calor específico e conclui que há uma universalidade nesta região. Esse trabalho, no entanto, faz um mapeamento do modelo de duas impurezas no de uma impureza e dois canais de condução o que parece incorreto, já que a diagonalização do Hamiltoniano de dois canais, tanto pelo GRN quanto pela invariância conforme [27], mostram que o seu espectro de baixas energias é diferente do espectro do Hamiltoniano de duas impurezas.

Trabalhos dedicados ao modelo assimétrico

Usando a teoria de campo médio com “*slave-boson*”, Jones et al. [28] estudaram o modelo de Anderson de duas impurezas acopladas antiferromagneticamente com correlação coulombiana infinita. Eles encontram que o espaço de fase é dividido entre dois regimes: um no qual o efeito Kondo ocorre e outro onde o efeito Kondo não ocorre. No regime Kondo as defasagens sofridas pelo canal par e ímpar são diferentes embora a soma das duas seja π , resultado que difere dos trabalhos de Jones et al usando o GRN [6,9,10]. Outra diferença é que na transição entre o regime Kondo e o não-Kondo as propriedades calculadas são descontínuas mas não apresentam divergências. Os autores concluíram que o ponto fixo não resiste a assimetria partícula-buraco.

Sakai et al [29–31] usaram o método do GRN para calcular o espectro de excitação do modelo de Anderson *convencional*. Eles não encontraram divergências na susceptibilidade *staggered* e concluíram que a discrepância com o resultado de Jones et al surge pelo fato que os últimos consideram as constantes de acoplamento independentes da energia. Tendo

eles empregado a versão tradicional do método do grupo de renormalização numérico, não conseguiram — mesmo com amplos recursos computacionais a sua disposição — alcançar precisão numérica suficiente para elucidar a questão. Observe-se que, para alcançar a precisão dos resultados descritos em nosso trabalho, um cálculo baseado no método tradicional exigiria um esforço computacional 2 ou 3 ordens de grandeza maior do que aquele que realizamos.

Os cálculos variacionais de Saso [32] no modelo de Anderson com duas impurezas acopladas mostram que a susceptibilidade *staggered* tem um pico para $I \sim 2k_B T_K$ mas, não apresenta divergência. No entanto, o pico aumenta com a introdução da degenerescência orbital N , e diverge no limite de $N \rightarrow \infty$, resultado semelhante ao do modelo simétrico. Diagonalizando exatamente o modelo de Anderson com duas impurezas em sistemas pequenos (a banda de condução é representada por uma cadeia com L sítios) Yanagisawa [33, 34] calculou a susceptibilidade *staggered* e, novamente, não encontrou comportamento anômalo. O tamanho do sistema, nesse caso, limita seus resultados. Ambos trabalhos são baseados no modelo *convencional*.

Usando o método variacional, Andreani e Beck [35, 36] estudaram o modelo de Anderson *convencional* de duas impurezas no limite de correlação coulombiana $U \rightarrow \infty$. Eles encontraram que o modelo é caracterizado por uma distância crítica $R_c \simeq 2.5(k_F)^{-1}$ que separa dois regimes distintos. Para $R > R_c$ a interferência entre as nuvens eletrônicas é pequena e as propriedades dependem da razão $I/k_B T_K$, e seus resultados, a temperatura finita, são consistentes com aqueles do *scaling* perturbativo [37] e das simulações de Monte Carlo [7, 21]. Um efeito Kondo de dois estágios é previsto para $I \gg k_B T_K$. Para $R < R_c$ fortes correlações magnéticas entre os spins geram uma nova energia característica ($\delta \sim \exp \frac{\pi(\epsilon_F \pm J)}{3\Gamma}$) que se torna a energia relevante do sistema. Para $R \rightarrow 0$ as impurezas se acoplam ferromagneticamente com spin total sendo blindado apenas parcialmente e o efeito Kondo de dois estágios desaparece. Nenhuma anomalia das propriedades físicas é

encontrada para qualquer valor de $I/k_B T_K$.

Santoro e Giuliani [38] usaram uma expansão perturbativa em U para estudar o modelo de Anderson de duas impurezas sem *simetria* partícula-buraco. Eles estudaram várias propriedades do modelo — correlação entre os spins, coeficiente do calor específico, susceptibilidade — em função da distância R entre as impurezas. A maioria das quantidades investigadas apresentam um comportamento oscilatório de $2k_F R$ em torno dos correspondentes valores do problema de uma impureza. Seus resultados são compatíveis com o quadro do *scaling* perturbativo [37]. Nenhum indício de comportamento crítico foi encontrado.

Em 1994, Fye [39] voltou a estudar o modelo Kondo de duas impurezas usando o método de Monte Carlo de uma forma mais controlada. Ele investigou a existência do ponto crítico calculando a susceptibilidade *staggered* em função da temperatura. Nenhuma evidência do comportamento anômalo foi encontrada em suas simulações. Ele sugere que a existência do ponto fixo é resultado da aproximação, usada nos trabalhos do GRN [6, 9, 10] e invariância conforme [24], que considera as constantes de acoplamento independentes da energia, e não uma propriedade intrínseca do modelo. Essa técnica é basicamente exata, no entanto, não consegue atingir temperaturas muito baixas.

Trabalhos conciliadores

Num trabalho recente, Affleck et al [8] analisaram mais detalhadamente a questão da *simetria* partícula-buraco na existência do ponto fixo. Eles estudaram o modelo Kondo de duas impurezas pelo método da invariância conforme e compararam estes resultados com os derivados do grupo de renormalização numérico. Fica claro que somente os Hamiltonianos com *simetria* partícula-buraco podem ter o ponto crítico instável com propriedades de líquido não de Fermi. Esses resultados são particularmente elucidativos na questão da origem do ponto fixo apontando que há dois tipos de *simetria* partícula-

buraco e que somente uma garante a sua ocorrência. Desta forma, a polêmica em torno da discrepância entre os resultados de Monte Carlo e os do GRN é finalmente resolvida: embora ambos os métodos estudem o modelo de Kondo, o primeiro se baseou no modelo *convencional* enquanto que o do GRN invocou uma aproximação que introduz a *simetria* partícula-buraco.

Nosso trabalho, complementa as conclusões de Affleck et al [8] discutida acima, além de trazer novos resultados, que agora iremos apresentar resumidamente.

Estudamos as propriedades termodinâmicas do modelo de Kondo de duas impurezas *convencional*, preservando todas as suas simetrias originais, e, como ferramenta, usamos o GRN.

Ao tentarmos aplicar o GRN ao modelo *convencional*, que não apresenta *simetria* partícula-buraco, observamos que o método original de Wilson [4] não é adequado. Desta forma foi necessário fazermos uma extensão do método original. Desenvolvemos um técnica que permitiu explorar toda a potencialidade do método mantendo um estrito controle das aproximações usadas, de forma que os resultados por nós obtidos são essencialmente exatos. Nosso procedimento generaliza a tridiagonalização da banda de condução, simplifica o cálculo numérico dos coeficientes que a define e amplia o escopo do GRN.

Calculamos a susceptibilidade magnética, a defasagem da banda de condução e o coeficiente linear do calor específico para $T = 0$, em função de $I/k_B T_K$. Nossos resultados mostram que a *assimetria* do modelo elimina o ponto crítico e a transição do regime Kondo para o antiferromagnético é suave com comportamento de líquido de Fermi. A defasagem da banda de condução varia continuamente de zero, no regime antiferromagnético, para um valor máximo $\delta_0 \neq \frac{\pi}{2}$, no regime Kondo. As propriedades termodinâmicas são contínuas, descritas por curvas universais. O valor δ_0 foi encontrado analiticamente.

O efeito da simetria partícula-buraco é analisada através de um parâmetro Δ , chamado

de *assimetria*, que controla as propriedades calculadas em $T = 0$. Esse parâmetro depende da largura da banda de condução D . No limite $D \rightarrow 0$, o modelo tende a ser *simétrico*, e o comportamento crítico emerge. Portanto, neste limite o modelo *convencional* apresenta as mesmas anomalias do modelo *simétrico*: defasagem da banda de condução descontínua e coeficiente linear do calor específico divergente.

Obtivemos, também, a dependência térmica da susceptibilidade magnética das impurezas $\chi(T)$ para vários valores da separação das impurezas R . Nossos resultados, qualitativamente semelhantes com os do modelo *simétrico*, consolidam a descrição do *scaling* perturbativo, desde a formação do singleto no regime antiferromagnético, até o efeito Kondo de dois estágios no regime ferromagnético. Além disso, mostramos que, no caso antiferromagnético a física de baixas temperaturas é dominada por mecanismos tipo Van-Vleck, originárias das excitações virtuais singleto-triplete.

Antes de discutir a organização geral da tese faremos uma breve discussão dos férmions pesados. Esses compostos representam a motivação experimental para se estudar o problema de duas impurezas magnéticas em metais.

1.3 Sistemas magnéticos correlacionados

Compostos que contêm elementos de terras raras (principalmente o Ce) ou actínídeos (principalmente o U) apresentam uma variedade interessante de propriedades a baixas temperaturas e são colocados numa mesma classe denominados de sistemas fortemente correlacionados [12, 40, 41]. As propriedades desses materiais são devidas basicamente à interação entre os momentos localizados dos orbitais f dos átomos de terras raras interagindo com estados itinerantes da banda de condução.

Uma das propriedades interessantes desses materiais é que eles apresentam um coeficiente do calor específico, a baixas temperaturas, muito maior que nos metais comuns. Pela teoria de líquido de Fermi essa quantidade é proporcional a m^*/m , onde m^* é a massa

efetiva e os resultados experimentais mostram que a m^* aumenta de 10^2 a 10^3 em relação aos metais convencionais. Dessa forma esses compostos são conhecidos com férmions pesados.

As propriedades de transporte dos férmions pesados apresentam comportamentos anômalos. A baixas temperaturas a resistividade ρ inicialmente cresce com a diminuição da temperatura (associado ao efeito Kondo), alcança um máximo, em temperaturas suficientemente baixas, e decresce abruptamente quando $T \rightarrow 0$. A existência do pico e o alto valor da resistividade no máximo são fatores não comuns nos metais normais. Por outro lado, em sistemas com baixa concentração dos materiais magnéticos (sistemas diluídos), a resistividade atinge o máximo permanecendo constante a partir daí.

Existem vários artigos de revisão sobre os férmions pesados. Para uma visão geral dos resultados mais recentes recomendamos os artigos de Fisk et al. [42], de Ott [43], de Hess et al. [44] e o de Steglich et al. [45]. O livro do Hewson [41] traz um detalhado estudo, tanto teórico com experimental, do problema de impurezas em metais com toda a evolução histórica do problema.

O ponto importante nos férmions pesados é que suas propriedades físicas, principalmente a baixas temperaturas, são devidas à forte interação dos íons magnéticos localizados com os elétrons da banda de condução e também da forte interação indireta entre eles. Como exemplo da importância das interações entre os momentos magnéticos a baixas temperaturas, mostramos na Fig. 1.4 a resistividade do composto $Ce_xLa_{1-x}Pb_3$, para alguns valores da concentração x do material magnético. A altas temperaturas todas as curvas mostram o mesmo comportamento, típico de sistemas com impurezas diluídas. Com o decréscimo da temperatura o comportamento passa a ser fortemente dependente da concentração e para $x > 0.9$ observa-se o decréscimo na resistividade típico de férmions pesados [40].

Em geral, os férmions pesados apresentam, a altas temperaturas, propriedades

Figura 1.4: Curvas da resistividade por concentração de Ce em função da temperatura para o composto $(\text{Ce}_x\text{La}_{1-x})\text{Pb}_3$. A altas temperaturas ($T > 30\text{K}$) todas as curvas mostram um comportamento $\ln T$, característico de sistemas Kondo. Para baixas temperaturas, as curvas dependem fortemente da concentração do material magnético e para $x > 0.9$ o sistema apresenta efeitos de coerência típico dos férmions pesados.

que se assemelham às de sistemas com uma coleção de momentos locais interagindo fracamente com elétrons da banda de condução. Neste regime as interações entre os momentos localizados são desprezíveis e a física é bem descrita por modelos de impurezas isoladas como, por exemplo, o modelo de Kondo de uma impureza. Porém, quando a temperatura vai diminuindo as correlações entre as impurezas em diferentes sítios tornam-se importantes e o modelo simplificado acima não é suficiente. Por exemplo, interações tipo *RKKY* entre os momentos magnéticos podem levar a um ordenamento antiferromagnético. Então é necessário considerar uma rede de impurezas, isto é, considerar o modelo de Kondo ou Anderson periódico para tentar explicar o comportamento a temperaturas baixas. A transição do regime de altas temperaturas (impurezas fracamente correlacionadas) para o de baixas temperaturas (impurezas fortemente correlacionadas) é caracterizada como desenvolvimento de “coerência” [46] e determina uma escala de energia característica do sistema ($k_B T^*$).

Acredita-se que toda a física desses sistemas possa ser descrita por modelos que

considerem uma rede de impurezas tais como o modelo periódico de Anderson ou Kondo. No entanto, uma solução completa para os modelos periódicos ainda não existe. Nesse contexto, os modelos que consideram um par de impurezas magnéticas são os mais simples que permitem explorar os efeitos da interação entre as impurezas. Deve-se enfatizar que esses modelos não são representativos de um dado sistema físico. Espera-se, contudo, que esse seja um passo preliminar no entendimento da física dos férmions pesados.

1.4 Organização geral do trabalho

No capítulo 2 descrevemos o formalismo do GRN aplicado ao modelo *convencional*. Será mostrado, em detalhes, a parte que desenvolvemos nesta tese e que permitiu se trabalhar com Hamiltonianos que não apresentam *simetria* partícula-buraco. Discutiremos as principais diferenças entre o nosso trabalho e os anteriores, que trabalham com o Hamiltoniano *simétrico*.

O Capítulo 3 é dedicado a termodinâmica do modelo para temperaturas finitas. Inicialmente, calcularemos a interação *RKKY* entre as impurezas e mostraremos que ela é preservada pelo nosso procedimento. A seguir mostraremos os resultados de $\chi(T)$ para diferentes valores da separação entre as impurezas correspondendo aos três regimes característicos do sistema: o regime Kondo, o regime ferromagnético e o regime antiferromagnético.

No Capítulo 4 vamos estudar as propriedades do estado fundamental no regime de acoplamento antiferromagnético entre as impurezas. Mostraremos resultados para o deslocamento de fase da banda de condução, a susceptibilidade e o coeficiente linear do calor específico a $T = 0$. Estas propriedades são calculadas a partir do espectro de energia dos pontos fixos de baixas temperaturas. Mostraremos como elas variam em função da razão $I/k_B T_K$ e que o sistema sempre se comporta como líquido de Fermi. Uma expressão analítica para δ no limite Kondo é derivada. Por fim, discutiremos um comportamento

universal neste regime.

No Capítulo 5 apresentaremos nossas conclusões e sugestões de trabalhos futuros.

Helena S. Kluge

1991

Capítulo 2

Técnica do Grupo de Renormalização Numérico

O método do grupo de renormalização numérico (GRN) foi originalmente proposto por Wilson [4] para calcular as propriedades termodinâmicas de sistemas de impurezas magnéticas em metais. Foi aplicado com sucesso para obter a susceptibilidade magnética e o calor específico nos modelos de Kondo e Anderson [4,47,48]. O método evoluiu bastante e hoje já é possível aplicá-lo no cálculo de propriedades dinâmicas [29,49].

O método tradicional, no entanto, apresenta algumas limitações. Para o problema de duas impurezas, por exemplo, o método só é aplicado para modelos com *simetria* partícula-buraco [10]. Portanto, para aplicar o GRN ao modelo Kondo de duas impurezas, preservando a sua *assimetria* partícula-buraco, foi necessário desenvolvermos uma extensão do método. Basicamente apresentamos uma nova abordagem do processo de tridiagonalização da banda de condução discretizada, uma etapa crucial do GRN. Os detalhes dessa abordagem e as diferenças em relação aos trabalhos anteriores serão discutidos neste capítulo.

2.1 Transformação para 1-D

O Hamiltoniano de Kondo de duas impurezas considera cada spin das impurezas, localizadas na posição $\vec{R}_i$, acoplados antiferromagneticamente com o spin $\vec{S}_c(\vec{R}_i)$ dos

elétrons de condução em torno deste sítio. O Hamiltoniano Kondo de duas impurezas é dado por

$$H = H_{BC} + H_{int} \quad (2.1)$$

$$H_{BC} = \int d^3k \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}} \quad (2.2)$$

$$H_{int} = J \left[\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_c(\vec{R}_1) + \vec{S}_2 \cdot \vec{S}_c(\vec{R}_2) \right], \quad (2.3)$$

onde o primeiro termo é a energia cinética da banda de condução e o segundo é interação das impurezas com os elétrons de condução.

O operador de spin para os elétrons da banda de condução é dado por

$$\vec{S}_c(\vec{R}_j) = \sum_{\mu\mu'} \Psi_\mu^\dagger(\vec{R}_j) \frac{1}{2} \vec{\sigma}_{\mu\mu'} \Psi_{\mu'}(\vec{R}_j), \quad (2.4)$$

onde

$$\Psi_\mu(\vec{r}) = \sqrt{\frac{\Omega_0}{8\pi^3}} \int d^3\vec{k} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) C_{\vec{k}\mu} \quad (2.5)$$

é o operador de campo, $\vec{\sigma}_{\mu\mu'}$ são as matrizes de Pauli e Ω_0 é o volume do sistema.

A primeira simplificação consiste em transformar o Hamiltoniano acima para uma forma unidimensional. Essa transformação é necessária para aplicação do GRN.

Vamos inicialmente supor uma banda de condução isotrópica, isto é, a relação de dispersão depende apenas do módulo do vetor de onda $|\vec{k}|$. É também conveniente tomar a relação de dispersão linear

$$\varepsilon_{\vec{k}} = v_F(k - k_F), \quad |\varepsilon_{\vec{k}}| < D, \quad (2.6)$$

com a energia variando de $-D$ a D . Esta aproximação não é necessária, mas é conveniente para efeito de comparação com o modelo de Kondo de uma impureza. Este modelo foi diagonalizado por Wilson [4], utilizando o GRN, e a relação de dispersão linear foi utilizada. Seus resultados mostraram que o efeito da forma da relação de dispersão

é irrelevante para o problema de uma impureza. O mesmo é esperado para o nosso Hamiltoniano.

Explorando-se a invariância rotacional da relação de dispersão [Eq. (2.6)], vamos fazer uma integração sobre as direções $d\hat{\Omega}$ no espaço $\vec{k}$ e definir seguintes **operadores de energia fermiônicos** (Os índices de spin foram suprimidos pois não são relevantes nessas transformações):

$$c_\varepsilon = \frac{1}{\sqrt{\rho(\varepsilon)}} \int C_{\vec{k}} \exp(i\vec{k} \cdot \frac{\vec{R}}{2}) \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\vec{k}}) d^3\vec{k} \quad (2.7)$$

$$\bar{c}_\varepsilon = \frac{1}{\sqrt{\rho(\varepsilon)}} \int C_{\vec{k}} \exp(-i\vec{k} \cdot \frac{\vec{R}}{2}) \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\vec{k}}) d^3\vec{k}, \quad (2.8)$$

que obedecem, individualmente, as **relações de anti-comutações** convencionais:

$$\{c_\varepsilon, c_{\varepsilon'}^\dagger\} = \{\bar{c}_\varepsilon, \bar{c}_{\varepsilon'}^\dagger\} = \delta(\varepsilon - \varepsilon'). \quad (2.9)$$

Esses operadores, no entanto, não são ortogonais:

$$\{c_\varepsilon, \bar{c}_{\varepsilon'}^\dagger\} = \delta(\varepsilon - \varepsilon') \frac{\sin(kR)}{kR}, \quad k = k(\varepsilon). \quad (2.10)$$

Considere ainda a densidade de estados dada por

$$\rho(\varepsilon) = \int d^3\vec{k} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\vec{k}}) = k^2 \frac{dk}{d\varepsilon} 4\pi. \quad (2.11)$$

Com as definições acima, podemos representar os estados localizados $\Psi(\pm \frac{\vec{R}}{2})$ em termos dos operadores de **energia** (c_ε e $\bar{c}_\varepsilon$):

$$\Psi(\frac{\vec{R}}{2}) = \int d\varepsilon \sqrt{\rho(\varepsilon)} c_\varepsilon \quad (2.12)$$

$$\Psi(-\frac{\vec{R}}{2}) = \int d\varepsilon \sqrt{\rho(\varepsilon)} \bar{c}_\varepsilon. \quad (2.13)$$

O próximo passo consiste em definir operadores de energia ortonormais (observe que os definidos acima não obedecem á relação de ortonormalidade) e reescrever os estados localizados em termos dos novos operadores. Podemos ter várias combinações lineares para formação desses novos operadores. Neste trabalho vamos explorar a simetria de inversão em torno do ponto médio entre as duas impurezas e definir novos operadores de energia com paridades bem definidas. Nossa escolha é a mesma de trabalhos anteriores que envolvem duas impurezas [9, 11].

$$\begin{cases} c_{e\varepsilon} = \frac{1}{2A_e(\varepsilon)} \{c_\varepsilon + \bar{c}_\varepsilon\} \\ c_{o\varepsilon} = \frac{1}{2A_o(\varepsilon)} \{c_\varepsilon - \bar{c}_\varepsilon\} \end{cases} \quad c/ \quad \begin{cases} A_e^2(\varepsilon) = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\sin k(\varepsilon)R}{k(\varepsilon)R}\right) \\ A_o^2(\varepsilon) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\sin k(\varepsilon)R}{k(\varepsilon)R}\right) \end{cases} \quad (2.14)$$

$A_{p=e,o}$ são os fatores de normalização, que dependem da energia e da separação R das impurezas; $k(\varepsilon)$ é o valor absoluto do momento, isto é,

$$k(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{v_F} + k_F. \quad (2.15)$$

Os novos operadores $c_{e\varepsilon}$ (par) e $c_{o\varepsilon}$ (ímpar) são ortogonais, ou seja,

$$\{c_{e\varepsilon}, c_{o\varepsilon'}^\dagger\} = \delta(\varepsilon - \varepsilon'). \quad (2.16)$$

Outra simplificação, também utilizada no problema de uma impureza, consiste em considerar $\rho(\varepsilon)$ constante.

$$\rho(\varepsilon) = \rho_0. \quad (2.17)$$

Portanto, invertendo as relações entre os operadores de energia $c_\varepsilon, \bar{c}_\varepsilon \Rightarrow c_{e\varepsilon}, c_{o\varepsilon}$ os estados localizados serão dados na nova base por:

$$\Psi\left(\frac{\vec{R}}{2}\right) = \sqrt{\rho_0} \int d\varepsilon (A_e(\varepsilon)c_{e\varepsilon} + A_o(\varepsilon)c_{o\varepsilon}) \quad (2.18)$$

$$\Psi\left(-\frac{\vec{R}}{2}\right) = \sqrt{\rho_0} \int d\varepsilon (A_e(\varepsilon)c_{e\varepsilon} - A_o(\varepsilon)c_{o\varepsilon}) \quad (2.19)$$

Por conveniência do método, como veremos a seguir, dois operadores fermiônicos são definidos como as combinações par (f_{0e}) e ímpar (f_{0o}) dos estados de Wannier mais localizados em torno da impureza, e são dados por:

$$f_{0e} = N_e \int d\varepsilon c_{e\varepsilon} A_e(\varepsilon) \quad (2.20)$$

$$f_{0o} = N_o \int d\varepsilon c_{o\varepsilon} A_o(\varepsilon). \quad (2.21)$$

$N_{p=e,o}$ são as constantes de normalização dadas por

$$N_{p=e,o}^2 = \frac{1}{\int d\varepsilon A_p^2(\varepsilon)} \quad (2.22)$$

que podem ser facilmente avaliadas usando as Eq. (2.14) e (2.15), resultando em

$$N_{p=e,o}^2 = \frac{2k_F R \Delta / D}{2k_F R \Delta \pm [\text{Si}((\Delta + 1)k_F R) - \text{Si}((1 - \Delta)k_F R)]}, \quad (2.23)$$

onde $\Delta = \frac{D}{v_F k_F}$ é um parâmetro chamado *assimetria*, aqui introduzido pela primeira vez nesse modelo, que será discutido na sequência deste capítulo. $\text{Si}(x)$ é uma forma abreviada da integral de $\frac{\sin(x)}{x}$, isto é, $\text{Si}(x) = \int_0^x \frac{\sin(x)}{x} dx$.

Os operadores de campo, escritos em termos dos f_{0p} , são dados por

$$\Psi(\pm \frac{\vec{R}}{2}) = \sqrt{\rho_0} \cdot \left(\frac{f_{0e}}{N_e} \pm \frac{f_{0o}}{N_o} \right) \quad (2.24)$$

que, juntamente com as Eq. (2.3) e (2.4), mostram que o acoplamento das impurezas magnéticas com a banda de condução se expressa exatamente através dos orbitais f_{0e} e f_{0o} .

Para a banda de condução, devemos observar que podemos estender as definições (2.14) para formar uma base completa de operadores de energia cinética, ou seja, uma transformação ortonormal dos operadores $c_{\vec{k}}$ para operadores de energia c_e . Deixando,

então, de lado o conjunto dos outros operadores de energia que não se acoplam com a impureza, a banda de condução resultante será efetivamente unidimensional com dois canais independentes de elétrons, o canal *par* ($c_{e\varepsilon}$) e o canal *ímpar* ($c_{o\varepsilon}$). Desta forma, vamos reescrever o Hamiltoniano de Kondo em termos dos operadores de energia. Para a banda de condução temos:

$$\begin{aligned} H_{BC} &= \int d^3k \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}} = \int d\varepsilon \varepsilon (c_{o\varepsilon}^\dagger c_{o\varepsilon} + c_{e\varepsilon}^\dagger c_{e\varepsilon}) \\ &= H_{BCo} + H_{BCe} \end{aligned} \quad (2.25)$$

enquanto que o Hamiltoniano de interação é obtido substituindo-se os operadores de campo, dados por (2.24), na definição inicial, Eq. (2.3). Portanto, a parte do acoplamento das impurezas com a banda de condução é dada, em função dos operadores f_0 , por

$$\begin{aligned} H_{int} &= \rho_0 J \sum_{\mu\mu'} \left\{ \frac{1}{N_e^2} f_{0e\mu}^\dagger \vec{\sigma}_{\mu\mu'} f_{0e\mu'} + \frac{1}{N_o^2} f_{0o\mu}^\dagger \vec{\sigma}_{\mu\mu'} f_{0o\mu'} \right\} \cdot (\vec{S}_1 + \vec{S}_2) + \\ &\quad \rho_0 J \sum_{\mu\mu'} \frac{1}{N_e N_o} \left\{ f_{0e\mu}^\dagger \vec{\sigma}_{\mu\mu'} f_{0o\mu'} + f_{0o\mu}^\dagger \vec{\sigma}_{\mu\mu'} f_{0e\mu'} \right\} \cdot (\vec{S}_1 - \vec{S}_2) \end{aligned} \quad (2.26)$$

As duas últimas equações representam a forma unidimensional do Hamiltoniano de Kondo apropriada para a aplicação da técnica do grupo de renormalização numérico.

2.2 Características importantes do modelo de Kondo de duas impurezas

Antes de aplicar o método do grupo de renormalização numérico ao modelo Kondo na sua forma unidimensional, vamos discutir algumas de suas características fundamentais.

Vejamos inicialmente como é o acoplamento das impurezas com os canais de condução. O Hamiltoniano de interação (2.26) tem dois termos. O primeiro mostra uma interação proporcional ao operador espacialmente simétrico ($\vec{S}_1 + \vec{S}_2$) que preserva o spin total

das impurezas, não mistura os dois canais de condução e gera um acoplamento efetivo diferente para cada canal, que denotaremos por J_p , dados por:

$$\begin{cases} J_e = \frac{\rho_0 J}{N_e^2} \\ J_o = \frac{\rho_0 J}{N_o^2} \end{cases} \implies J_e \neq J_o. \quad (2.27)$$

O outro termo, que é proporcional a $(\vec{S}_1 - \vec{S}_2)$, não comuta com o spin total das impurezas, mistura os estados singleto e tripleto das impurezas e permite transições eletrônicas entre os canais par e ímpar. Este acoplamento é proporcional a J_m dado por:

$$J_m = \frac{\rho_0 J}{N_e N_o} \quad (2.28)$$

Aqui é importante observar que os acoplamentos efetivos das impurezas com a banda de condução dependem do acoplamento inicial J , da separação entre as impurezas (pelo produto $k_F R$) e da *assimetria* Δ [ver Eq.(2.23)].

Vejamos agora a questão da *simetria* partícula-buraco. Através das expressões para os operadores f_0 , que descrevem a interação entre as impurezas e a banda de condução [Eq. (2.20) e (2.21)], observamos que o acoplamento $A_{p=e,o}(k_\epsilon, R)$ é dependente da energia ϵ , o mais importante, que esta dependência é através do momento absoluto [Eq. (2.15)]. Desta forma, uma transformação partícula-buraco ($\epsilon \rightarrow -\epsilon$) resulta em momentos diferentes ($k_\epsilon \neq k_{-\epsilon}$) e como consequência os acoplamentos $A_{p=e,o}(\epsilon)$, para partícula e buraco com mesma energia, não são iguais. Esse quadro é mostrado esquematicamente na Fig. 2.1. Portanto, temos que o Hamiltoniano Kondo de duas impurezas é intrinsecamente *assimétrico* por transformação partícula-buraco. A largura da banda de condução determina os limites máximos dos momentos e consequentemente do acoplamento *assimétrico*. Essa propriedade do modelo pode ser controlada por um parâmetro definido por

$$\Delta = \frac{D}{v_F k_F} \quad (2.29)$$

Figura 2.1: Relação de dispersão linear para a banda de condução utilizada em nossa abordagem. Elétrons e buracos com mesma energia E (medida a partir do nível de Fermi) apresentam valores diferentes para o momento absoluto, $k_e = k_F + \frac{E}{v_F}$ e $k_h = k_F - \frac{E}{v_F}$. Consequentemente, os acoplamentos $A_{p=e,o}$ para a partícula e o buraco são diferentes. A largura da banda D determina os momentos máximos e define a razão $\frac{D}{v_F k_F}$ que controla a assimetria do acoplamento.

que chamaremos *assimetria* e que será particularmente importante nas propriedades físicas a baixas temperaturas.

Vários estudos do problema Kondo de duas impurezas, especialmente os de Jones et. al [9, 10] usando o GRN, fizeram a aproximação de desprezar a dependência em energia de $A_p(k_e, R)$ considerando-a como uma constante avaliada na energia de Fermi, isto é, $A_p(k_e, R) = A_p(k_F, R)$. Essa é a aproximação ECC (“*energy-independent coupling constant*”) [39] que foi inicialmente justificada pela noção intuitiva de que se estariam desprezando apenas operadores irrelevantes [24], sem consequência para propriedades físicas de baixa temperatura. Essa noção, como mostraremos no decorrer do trabalho, não se confirma. A aproximação ECC impõe a simetria partícula-buraco inexistente no modelo original. Aos modelos com esta simetria chamaremos modelos de duas impurezas

simétricos. Nos modelos *simétricos* a interação $RKKY$ gerada é sempre ferromagnética (mostraremos isso no capítulo 3) e é necessário adicionar uma interação direta entre as impurezas ($I_0 \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$) para se estudar a região antiferromagnética. Outra consequência é que a defasagem da banda de condução só pode ter valores de 0 ou $\pi/2$ [22]. Esses modelos podem ser entendidos qualitativamente da seguinte forma: Para acoplamento $J = 0$ o spin total $\vec{S}$ das impurezas é conservado e o estado fundamental do subespaço singlete ($S = 0$) é separado do tripleto ($S = 1$) pela energia I_0 . Mesmo quando J é finito deve existir uma regra de seleção que proíba a transição entre os estados fundamentais dos subespaços singlete e tripleto; assim o acoplamento proporcional a $(\vec{S}_1 - \vec{S}_2)$ pode ser desprezado. Não sabemos explicitar essa regra de seleção; no entanto se ela não existisse a defasagem da banda de condução variaria continuamente de 0 a $\pi/2$. Desconsiderando o termo proporcional a $(\vec{S}_1 - \vec{S}_2)$ e com $J \neq 0$, os elétrons de baixa energia no subespaço singlete são livres com defasagem $\delta = 0$, enquanto que no subespaço tripleto o efeito Kondo reduz a energia do estado fundamental de $k_B T_K$, e a banda de condução tem uma defasagem $\delta = \pi/2$. Esse quadro é mostrado na Fig. 2.2. Portanto, o estado fundamental do Hamiltoniano *simétrico* será o do subespaço singlete ($I_0 > k_B T_K$) ou o do subespaço tripleto ($I_0 < k_B T_K$). Para $I_0 \approx k_B T_K$, porém, as energias dos subespaços se tornam degeneradas e se misturam, gerando comportamento crítico de líquido não de Fermi que separa a região de efeito Kondo ($\delta = \pi/2$) da região de acoplamento antiferromagnético forte ($\delta = 0$).

Em nosso trabalho, conforme mostraremos no decorrer deste capítulo, desenvolvemos uma extensão do GRN que permite manter a assimetria natural do modelo e que permitiu comparar os resultados dos modelos *simétrico* e *assimétrico*.

2.3 Discretização logarítmica

O próximo passo no método de GRN consiste em substituir o contínuo de níveis de

Figura 2.2: Representação esquemática do estado fundamental no Hamiltoniano Kondo de duas impurezas *simétrico* no caso antiferromagnético. Para $J = 0$ as energias do estado fundamental nos subespaços singlete e tripleto estão separados por I_0 . Para $J \neq 0$ a energia no subespaço tripleto reduz de $k_B T_K$. Quando as duas energias são comparáveis $I_0 \approx k_B T_K$ os dois subespaços são degenerados e o comportamento crítico emerge.

energia da banda de condução por um conjunto de níveis discretos mantendo, porém, a invariância por mudança de escala na banda de condução (para uma discussão sobre essa propriedade ver o artigo de Oliveira [50]). Além disso, essa transformação deve afetar somente H_{BC} enquanto que H_{int} é tratado exatamente.

O GRN é baseado na discretização logarítmica da banda de condução. Vamos usar uma generalização do método original de Wilson. No procedimento generalizado a discretização da banda de condução é feita de acordo com a Fig. 2.3 e envolve dois parâmetros de discretização Λ e z . O primeiro foi introduzido por Wilson [4] e pode, em princípio, tomar qualquer valor maior que a unidade e o outro pode assumir qualquer valor no intervalo $0 < z \leq 1$. A introdução do parâmetro z foi inicialmente desenvolvida por Yoshida et. al [49] e possibilitou usar o GRN para calcular propriedades dinâmicas, como a densidade espectral, e foi aplicado com sucesso a vários modelos [47,51].

Posteriormente, o procedimento foi adaptado para eliminar oscilações, originárias da discretização, em propriedades termodinâmicas — a característica limitante do método tradicional. Nesta extensão, conhecido como método *intercalado* [52], mostrou-se que curvas de propriedades termodinâmicas apresentam oscilações com fase dependentes de z . Estas oscilações se anulam quando se faz a média aritmética das propriedades calculadas com valores de z apropriados (em geral, médias com $z = 0.5$ e $z = 1.0$ são suficientes). Para os modelos de uma impureza, a discussão detalhada da aplicação de método intercalado para o cálculo da susceptibilidade dependente da temperatura é descrito no trabalho de Oliveira et al. [52], enquanto que para o cálculo do calor específico é descrito no trabalho de Costa et al. [53]. No método *intercalado* as propriedades termodinâmicas, com desvio percentual pequeno do limite do contínuo ($\Lambda \rightarrow 1$), podem ser obtidas com $\Lambda \leq 10$ enquanto que no método tradicional de Wilson [4, 48] o limite é $\Lambda = 3$. Na prática, quanto menor Λ , maior é o tempo computacional: o esforço computacional cresce exponencialmente com $1/\ln \Lambda$.

Figura 2.3: Discretização da banda de condução pelo método intercalado que usa valores diferentes do parâmetro z para cada banda. Em geral, usamos os valores $z_e = 1$ e $z_o = 0.5$ ou vice-versa. Observe através do gráfico *c* que a banda de condução (superposição das duas bandas) é melhor recoberta que o método tradicional. O método intercalado permite o cálculo das propriedades termodinâmicas com $\Lambda \leq 10$ enquanto que o limite máximo no método tradicional é $\Lambda = 3$.

Seguindo o trabalho de Silva [11], baseado nas idéias do método intercalado, vamos discretizar as bandas de condução par e ímpar usando parâmetros z diferentes, isto é, $z = z_p$, conforme indicado na Fig. 2.3. A consequência imediata é que o espectro do Hamiltoniano da banda de condução (soma das bandas par e ímpar) terá mais energias que o obtido da forma tradicional (ver Fig 2.3-c), ou seja, a banda de condução é melhor recoberta. Para $z_o = 0.5$ e $z_e = 1$, por exemplo, essa discretização com o parâmetro Λ é equivalente à tradicional com $\Lambda^{\frac{1}{2}}$. Podemos então dizer que estamos trabalhando com um parâmetro Λ efetivo $\Lambda_{eff} = \sqrt{\Lambda}$. Comparando com o método *intercalado* aplicado a modelos com uma impureza, essa construção é equivalente a fazer as médias aritméticas com dois z 's diferentes (z_e e z_o) sendo portanto a mais apropriada para a obtenção das propriedades termodinâmicas em modelos com duas impurezas.

Definimos em cada intervalo da banda discretizada, os seguintes operadores fermiônicos (vamos desprezar os índices de spin que são irrelevantes nessa discussão):

$$\begin{cases} a_p = (1 - \Lambda^{-z_p})^{-\frac{1}{2}} \int_{\Lambda^{-z_p}}^1 c_{p\epsilon} d\epsilon \\ b_p = (1 - \Lambda^{-z_p})^{-\frac{1}{2}} \int_{-1}^{-\Lambda^{-z_p}} c_{p\epsilon} d\epsilon \end{cases} \quad (2.30)$$

para o intervalo do topo da banda e

$$\begin{cases} a_{mp} = \frac{\Lambda^{-\frac{m+z_p}{2}}}{(1-\Lambda^{-1})^{\frac{1}{2}}} \int_{\Lambda^{-(m+1+z_p)}}^{\Lambda^{-(m+z_p)}} c_{p\epsilon} d\epsilon \\ b_{mp} = \frac{\Lambda^{-\frac{m+z_p}{2}}}{(1-\Lambda^{-1})^{\frac{1}{2}}} \int_{-\Lambda^{-(m+z_p)}}^{-\Lambda^{-(m+1+z_p)}} c_{p\epsilon} d\epsilon \end{cases} \quad m = 0, 1, \dots, \infty \quad (2.31)$$

para os outros intervalos, indexados pelo índice m .

Dados z e Λ , estes operadores formam uma base discreta que é incompleta com respeito ao conjunto de $c_{p\epsilon}$. Essa aproximação é controlada pelo parâmetro Λ . Para $\Lambda \rightarrow 1$ o limite do contínuo é alcançado. Para aplicações numéricas, no entanto, pode-se trabalhar com valores relativamente grandes de Λ , já que o desvio, devido à discretização, é proporcional a $\exp(-\pi^2 / \ln \Lambda)$ [50].

O próximo passo consiste em projetar a banda de condução H_{BC} e o operador f_{op} na base discreta. Essa projeção mantém a *simetria* partícula-buraco da banda de condução, cujo Hamiltoniano é

$$H_{BC} = \sum_p E_p (a_p^\dagger a_p - b_p^\dagger b_p) + \sum_{m=0, p}^\infty E_{mp} (a_{mp}^\dagger a_{mp} - b_{mp}^\dagger b_{mp}) \quad (2.32)$$

onde E_{mp} são as energias médias em cada intervalo dadas por

$$\begin{cases} E_p = \frac{1+\Lambda^{-z_p}}{2} \\ E_{mp} = \frac{(1+\Lambda^{-1})}{2} \Lambda^{-(m+z_p)} \end{cases} \quad (2.33)$$

Para os operadores f_o [Eq. (2.20) e (2.21)] projetados nesta base teremos:

$$f_{0p} = (\alpha_p a_p + \beta_p b_p) + \sum_{m=0}^\infty (\alpha_{mp} a_{mp} + \beta_{mp} b_{mp}), \quad (2.34)$$

com os coeficientes dados por

$$\begin{cases} \alpha_p = \bar{N}_p \bar{A}_{ap} \\ \beta_p = \bar{N}_p \bar{A}_{bp} \end{cases} \quad (2.35)$$

e

$$\begin{cases} \alpha_{mp} = \bar{N}_p \bar{A}_{amp} \\ \beta_{mp} = \bar{N}_p \bar{A}_{bmp} \end{cases} \quad (2.36)$$

$\bar{A}_p$ é o valor médio das funções $A_p(\varepsilon)$ [Eq. (2.14)] em cada intervalo dado por

$$\bar{A}_{ap} = \frac{\int_{\Lambda^{-z_p}}^1 A_p(\varepsilon) d\varepsilon}{(1 - \Lambda^{-z_p})^{\frac{1}{2}}} \quad \bar{A}_{bp} = \frac{\int_{-1}^{-\Lambda^{-z_p}} A_p(\varepsilon) d\varepsilon}{(1 - \Lambda^{-z_p})^{\frac{1}{2}}} \quad (2.37)$$

$$\bar{A}_{amp} = \frac{\int_{\Lambda^{-(m+1+z_p)}}^{\Lambda^{-(m+z_p)}} A_p(\varepsilon) d\varepsilon}{(1 - \Lambda^{-1})^{\frac{1}{2}} \Lambda^{-\frac{m+z_p}{2}}} \quad \bar{A}_{bmp} = \frac{\int_{-\Lambda^{-(m+1+z_p)}}^{-\Lambda^{-(m+z_p)}} A_p(\varepsilon) d\varepsilon}{(1 - \Lambda^{-1})^{\frac{1}{2}} \Lambda^{-\frac{m+z_p}{2}}} \quad (2.38)$$

e $\bar{N}_p$ é uma constante de normalização.

Nesta transformação, os operadores f_{0p} projetados na base discreta [Eq. (2.34)] não são exatamente iguais aos operadores originais [Eq. (2.21) e (2.20)], em contraste com o procedimento de Wilson [4]. Isso é consequência das definições (2.30) e (2.31) para os operadores $\{a_{mp}, b_{mp}\}$, feitas de propósito, para manter a *simetria* partícula-buraco da banda de condução, como mostramos acima. Essa não é a única escolha possível; poderíamos definir, por exemplo, operadores $a_m \propto \int d\varepsilon A_p(\varepsilon) c_{p\varepsilon}$ que preservariam o operador f_{0p} . Esta transformação, porém, tornaria H_{BC} assimétrico, o que é indesejável neste contexto.

Como consequência da discretização, devemos substituir a normalização N_p [Eq. (2.23)], da base contínua, pela normalização $\bar{N}_p$, da discreta, dada por:

$$\bar{N}_p^2 = \left[\bar{A}_{ap}^2 + \bar{A}_{bp}^2 + \sum_{m=0}^{\infty} (\bar{A}_{amp}^2 + \bar{A}_{bmp}^2) \right]^{-1} \quad (2.39)$$

Isso afeta os acoplamentos J_p [Eq. (2.27)] e J_m [Eq. (2.28)], que ficam renormalizados por essa substituição.

Figura 2.4: Cadeia linear equivalente à banda de condução. A impureza está localizada no início da cadeia. t'_p s são acoplamentos de primeiros vizinhos entre os operadores f'_p s localizados nos sítios ao longo da cadeia.

O mais importante é observar que $\alpha_{mp} \neq \beta_{mp}$; logo, o operador f_{0p} projetado na base discreta mantém, como é desejável, sua *assimetria* partícula-buraco, que é característica fundamental do modelo. Aqui nosso procedimento difere dos outros trabalhos que usam o GRN com a aproximação ECC [6, 9], ou equivalentemente, que usam Hamiltonianos *simétricos*.

2.4 Tridiagonalização da banda de condução

O Hamiltoniano da banda de condução projetado na base discreta $\{a_{mp}, b_{mp}\}$ é uma série infinita, ainda não apropriado para aplicações numéricas; esta base precisa ser truncada. Antes, porém, é conveniente fazer uma transformação de base que preserve o acoplamento da banda de condução com a impureza H_{int} . Assim, o truncamento não deve afetar os operadores fermiônicos f_{op} . Para isso, faremos uma transformação de base dos operadores $(a_p, b_p, a_{mp}, b_{mp})$ para novos operadores f_{np} ($f_{op}, f_{1p}, \dots$) onde o operador f_{op} é conhecido e é dado pela Eq.(2.34). Os outros são definidos pela construção de Lanczos [54] de forma que f_{np} só se acople com $f_{(n+1)p}$, ou seja, tenha forma equivalente à cadeia linear *tight-binding* representada na Fig.(2.4).

A banda de condução passa a ter então a seguinte forma tridiagonal

$$H_{BC} = \sum_{n=0,p}^{\infty} \left[\varepsilon_{np} f_{np}^{\dagger} f_{np} + t_{np} (f_{np}^{\dagger} f_{(n+1)p} + f_{(n+1)p}^{\dagger} f_{np}) \right]. \quad (2.40)$$

O procedimento de tridiagonalização, que consiste em determinar os coeficientes

$\{\varepsilon_{np}, t_{np}\}$ e os operadores f_{np} , é a parte central no método de grupo de renormalização numérico. No método padrão do GRN o cálculo dos coeficientes foi feito analiticamente [4]; para $z \neq 1$ ele só pode ser feito numericamente por um procedimento recursivo cuja álgebra se torna complicada à medida que n cresce [49]. Neste regime o processo recursivo torna-se instável e o cálculo numérico torna-se impreciso, embora expressões analíticas assintóticas possam ser derivadas para contornar o problema. Para uma discussão detalhada do processo de tridiagonalização tradicional ver o trabalho de Yoshida et al. [49].

Na prática, a limitação do procedimento padrão é que ele só pode ser aplicado a Hamiltonianos com as seguintes restrições:

(i) Ambos os operadores H_{BC} e f_0 devem ser *simétricos* por transformação partícula-buraco. Em particular, neste caso, os coeficientes diagonais são nulos por simetria, isto é, $\varepsilon_n = 0$. Desta forma, estudos anteriores que usaram o GRN tradicional só podem tratar o modelo Kondo de duas impurezas com a aproximação ECC.

(ii) a densidade de estados $\rho(\varepsilon)$ deve ser constante.

Recentemente Chen e Jayprakash [55] desenvolveram um algoritmo para a tridiagonalização da banda de condução para o caso em que a densidade de estados não é constante. Essa construção permitiu a eles estudar o espectro de fotoemissão e absorção de raio-x no modelo de uma impureza para diferentes formas da densidade de estado. Nesse trabalho os coeficientes $\{\varepsilon_n, t_n\}$ e os operadores f_n são determinados numericamente por um procedimento recursivo que, por um lado, exige cálculo numérico elaborado mas, por outra parte, é bastante estável podendo se obter os coeficientes para n bem grandes. Apesar de não ser um procedimento simples, esse algoritmo, assim como o descrito abaixo, pode ser aplicado para estudar Hamiltonianos *assimétricos*.

Nós desenvolvemos um procedimento alternativo de tridiagonalização que também se aplica a Hamiltonianos *assimétricos* e que apresenta vantagens e desvantagens em relação ao de Chen e Jayprakash [55]. Esse desenvolvimento permitiu usar o GRN para tratar o

problema Kondo de duas impurezas mantendo a sua *assimetria* original. Uma descrição detalhada do novo procedimento para tridiagonalização está descrito no apêndice A. Os pontos a serem destacados são:

(i) Em princípio, pode ser aplicado para Hamiltonianos em geral, ou seja, podemos ter H_{BC} e(ou) f_0 *assimétricos*. Só é necessário conhecer esses dois operadores na base discreta.

(ii) Pode ser aplicado para qualquer densidade de estados.

(iii) O cálculo dos coeficientes não envolve procedimento recursivo e é dado por expressões bem simples.

(iv) O cálculo numérico, assim como no procedimento tradicional, apresenta instabilidade para n grande. Essa é a maior dificuldade do nosso método e pode ser um problema para trabalhos futuros. No problema Kondo de duas impurezas, no entanto, os coeficientes apresentam comportamentos assintóticos conhecidos que tornam sem importância essa dificuldade.

Dados H_{BCp} pela Eq. (2.32) e f_{0p} pela Eq. (2.34) utilizamos nosso procedimento para tridiagonalização e encontramos a seguinte expressão para os coeficientes diagonais da banda de condução [relação (2.40)]:

$$\varepsilon_{np} = \frac{\tilde{\Delta}_{n+1}}{\Delta_{n+1}} - \frac{\tilde{\Delta}_n}{\Delta_n}. \quad (2.41)$$

Os coeficientes codiagonais são dados por

$$t_{np} = \frac{\sqrt{\Delta_{n+2}\Delta_n}}{\Delta_{n+1}}. \quad (2.42)$$

Nas expressões acima Δ_n e $\tilde{\Delta}_n$ são determinantes dados por:

$$\Delta_n = \det \begin{vmatrix} \phi_{p0} & \cdots & \phi_{pn-2} & \phi_{pn-1} \\ \phi_{p1} & \cdots & \phi_{pn-1} & \phi_{pn-2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_{pn-1} & \cdots & \phi_{p2n-3} & \phi_{p2n-2} \end{vmatrix} \quad (2.43)$$

e

$$\tilde{\Delta}_n = \det \begin{vmatrix} \phi_{p0} & \cdots & \phi_{pn-2} & \phi_{pn} \\ \phi_{p1} & \cdots & \phi_{pn-1} & \phi_{pn+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_{pN-1} & \cdots & \phi_{p2n-3} & \phi_{p2n-1} \end{vmatrix} \quad (2.44)$$

onde os momentos ϕ_{pn} dependem apenas dos coeficientes de H_{BCp} e f_{0p} , projetados na base discreta [Eq. (2.32) e (2.34)], e são dados por:

$$\phi_{pn} = E_p^n [\alpha_{pm}^2 + (-1)^n \beta_{pm}^2] + \sum_m E_{pm}^n [\alpha_{pm}^2 + (-1)^n \beta_{pm}^2]. \quad (2.45)$$

As expressões (2.41) e (2.42) determinam todos os coeficientes ε_{np} e t_{np} a exceção de ε_{0p} , que é dado por

$$\varepsilon_{0p} = \phi_{p1}. \quad (2.46)$$

O cálculo dos coeficientes é todo numérico utilizando rotinas do software MAPLE, que permite trabalhar-se com um número arbitrário de casas decimais (na prática, usamos 200). Os passos são (i) inicialmente se calcula E_{pm} , α_{pm} , β_{pm} com as Eq. (2.33) e (2.36), (ii) em seguida calculamos os momentos ϕ_{pn} através de (2.45) e os determinantes Δ_N e $\tilde{\Delta}_N$ com (2.43) e (2.44) e (iii) finalmente os coeficientes ε_{np} e t_{np} com as Eq. (2.41) e (2.42). O procedimento só é estável até um determinado valor de $n = N_M$, que depende do número de casas decimais mantidas no cálculo. Para duzentas casas, $N_M = 9$. Para $n > N_M$ utilizamos os limites assintóticos dos coeficientes que são encontrados por inspeção dos já calculados anteriormente. Para n grande, encontramos que os coeficientes comportam-se da seguinte maneira:

$$t_{np} = \frac{(1 + \Lambda^{-1})}{2} \Lambda^{1-z_p-\frac{n}{2}} \quad (n \gg 1) \quad (2.47)$$

$$\varepsilon_{np} \propto \Lambda^{-n} \quad (n \gg 1) \quad (2.48)$$

n	t_{np}	$t_{np}(\text{assint})$	ε_{np}
0	$5.38133457 \times 10^{-1}$	1.739252713	$-1.08118796 \times 10^{-1}$
1	$3.50527617 \times 10^{-1}$	0.55	$6.36509472 \times 10^{-2}$
2	$1.97397935 \times 10^{-1}$	$1.73925271 \times 10^{-1}$	$2.97107388 \times 10^{-2}$
3	$5.91882521 \times 10^{-2}$	5.5×10^{-2}	$1.34068064 \times 10^{-2}$
4	$1.75159496 \times 10^{-2}$	$1.73925271 \times 10^{-2}$	$1.23106473 \times 10^{-3}$
5	$5.50350641 \times 10^{-3}$	5.5×10^{-3}	$1.07458194 \times 10^{-4}$
6	$1.73936239 \times 10^{-3}$	$1.73925271 \times 10^{-3}$	$1.06040575 \times 10^{-5}$
7	$5.50003465 \times 10^{-4}$	5.5×10^{-4}	$1.05914838 \times 10^{-6}$
8	$1.73925381 \times 10^{-4}$	$1.73925271 \times 10^{-4}$	$1.05902417 \times 10^{-7}$
9	$5.50000347 \times 10^{-5}$	5.5×10^{-5}	$1.05901176 \times 10^{-8}$

Tabela 2.1: Coeficientes da banda de condução tridiagonal. t_{np} é o coeficiente codiagonal calculado pelo procedimento numérico definido pela relação 2.42, enquanto que $t_{np}(\text{assint.})$ é dado pela expressão assintótica 2.47. O coeficiente diagonal ε_{np} é calculado a partir da relação 2.41 e para $n > N_M$ pode ser assumido como zero.

Os coeficientes codiagonais t_{np} têm exatamente o mesmo comportamento assintótico do método tradicional do Wilson [4], enquanto que os coeficientes diagonais ε_{np} decrescem tão mais rapidamente que os codiagonais que, na prática, pode-se tomar $\varepsilon_{np} = 0$ para $n > N_M$. Na tabela 1 mostramos um exemplo do comportamento desses coeficientes como ilustração.

A consequência imediata da tridiagonalização no caso *assimétrico* é que os coeficientes diagonais são diferentes de zero, como demonstramos. Para $n = 0$, em particular, temos na banda de condução o operador $f_{0p}^\dagger f_{0p}$ que é um operador **marginal** [48] e não irrelevante como argumentaram Affleck et al. [24]. Vemos assim que a aproximação ECC despreza um importante operador marginal.

2.5 Truncamento e a transformação do GRN

Conhecidos ε_{np} e t_{np} , o Hamiltoniano de condução discretizado deve ser truncado para poder ser diagonalizado numericamente. O valor de $n = N$ escolhido para truncar a série deve ser tal que não efete os cálculos das propriedades físicas do sistema a uma dada temperatura T . A medida que n cresce os coeficientes ε_{np} se tornam desprezíveis frente

aos t_{np} e, portanto, devemos escolher N tal que $t_{np} \ll k_B T$. Se para dado N definirmos uma energia

$$D_N = \frac{(1 + \Lambda^{-1})}{2} \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} D$$

e escolhermos uma temperatura T de modo que

$$k_B T = D_N / \bar{\beta} \quad (2.49)$$

onde $\bar{\beta}$ é um valor pequeno, $\bar{\beta} = 0.1$ por exemplo, a soma infinita de série (2.40) pode ser truncada em N .

O próximo passo consiste em definir a transformação do grupo de renormalização. Para este fim o Hamiltoniano truncado é dividido pela energia D_N , escolhido de forma que a menor energia codiagonal seja aproximadamente igual a um. Desta forma definimos um Hamiltoniano H_N adimensional, truncado e escalado dado por

$$H_N = \frac{1}{D_N} \left\{ \sum_{n=0,p}^{N-1} \left[\varepsilon_{np} f_{np}^\dagger f_{np} + t_{np} (f_{np}^\dagger f_{(n+1)p} + f_{(n+1)p}^\dagger f_{np}) \right] + H_{int} \right\}. \quad (2.50)$$

O Hamiltoniano original é recuperado no limite

$$H = \lim_{N \rightarrow \infty} D_N H_N. \quad (2.51)$$

H_N pode ser escrito numa forma mais conveniente como:

$$H_N = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \left\{ \sum_{n=0,p}^{N-1} \Lambda^{-n/2} \left[t'_{np} (f_{np}^\dagger f_{(n+1)p} + f_{(n+1)p}^\dagger f_{np}) + \varepsilon'_{np} f_{np}^\dagger f_{np} \right] + \right. \\ \left. \sum_{p\mu\mu'} \tilde{J}_p f_{0p\mu}^\dagger \vec{\sigma}_{\mu\mu'} f_{0p\mu'} \cdot (\vec{S}_1 + \vec{S}_2) + \sum_{\mu\mu'} \tilde{J}_m \left[f_{0e\mu}^\dagger \vec{\sigma}_{\mu\mu'} f_{0o\mu'} + HC \right] \cdot (\vec{S}_1 - \vec{S}_2) \right\}, \quad (2.52)$$

onde

$$\begin{cases} \tilde{J}_p = \frac{J_p}{D} \frac{2}{1+\Lambda^{-1}} \\ \tilde{J}_m = \frac{J_m}{D} \frac{2}{1+\Lambda^{-1}} \end{cases} \quad (2.53)$$

e

$$\begin{aligned} t'_{np} &= t_{np} \frac{2}{1 + \Lambda^{-1}} \Lambda^{\frac{n}{2}} \\ \varepsilon'_{np} &= \varepsilon_{np} \frac{2}{1 + \Lambda^{-1}} \Lambda^{\frac{n}{2}} \end{aligned}$$

são os novos coeficientes da banda de condução que apresentam os seguintes comportamentos assintóticos:

$$\begin{cases} t'_{np} = \Lambda^{1-z_p} \\ \varepsilon'_{np} \propto \Lambda^{-n/2} \end{cases} \quad (n \gg 1). \quad (2.54)$$

Matematicamente definimos a transformação $\mathcal{T}$ do GRN como a mudança do Hamiltoniano quando N aumenta de um:

$$\mathcal{T}[H_N] = H_{N+1} = \Lambda^{1/2} H_N + \sum_p t'_{Np} (f_{Np}^\dagger f_{(N+1)p} + f_{(N+1)p}^\dagger f_{Np}) + \varepsilon'_{Np} f_{Np}^\dagger f_{Np}. \quad (2.55)$$

Esta relação é o aspecto central do formalismo do GRN. Na prática, ela permite estabelecer um procedimento recursivo (que descreveremos a seguir) para se obter as energias e os autoestados de muitos corpos de H_{N+1} conhecidos os de H_N .

2.6 Procedimento recursivo

O método de diagonalização iterativa de H_N é semelhante ao do método tradicional, cujos detalhes matemáticos já foram amplamente discutidos [48, 56]. Baseia-se na relação recursiva (2.55) que permite encontrar os autoestados de H_{N+1} a partir dos de H_N . No procedimento tradicional o ciclo iterativo é caracterizado pelo número de interações N . Em nosso trabalho vamos utilizar uma nova abordagem, desenvolvida por Silva et al., [11] que permite usar de forma eficiente o parâmetro de discretização z_p . Como discutimos anteriormente, z_p têm dois valores possíveis, um para cada canal, e isso corresponde a escalas de energias diferentes na relação (2.55). Definimos $p = \text{alto}$ para o canal com

menor z_p e $p = \text{baixo}$ para o outro canal. Observe pela expressão (2.54) para o coeficiente codiagonal que $t'_{n,\text{alto}} > t'_{n,\text{baixo}}$ correspondendo a duas escalas de energias distintas. Dessa forma definimos um procedimento recursivo que, para cada N , é feito em duas etapas: primeiro se introduz o canal associado a altas energias (fase alta) e posteriormente o canal associado a baixas energias (fase baixa).

Na nova abordagem a relação recursiva (2.55) é dividida em duas fases e é reescrita da seguinte forma:

Fase Alta:

$$H_{(N+1),A} = \Lambda^{1/4} H_{N,B} + \frac{t'_{N,\text{alto}}}{\Lambda^{1/4}} (f_{N,\text{alto}}^\dagger f_{(N+1),\text{alto}} + f_{(N+1),\text{alto}}^\dagger f_{N,\text{alto}}) + \frac{\varepsilon'_{N,\text{alto}}}{\Lambda^{1/4}} f_{N,\text{alto}}^\dagger f_{N,\text{alto}} \quad (2.56)$$

Fase Baixa:

$$H_{(N+1),B} = \Lambda^{1/4} H_{(N+1),A} + t'_{N,\text{baixo}} (f_{N,\text{baixo}}^\dagger f_{(N+1),\text{baixo}} + f_{(N+1),\text{baixo}}^\dagger f_{N,\text{baixo}}) + \varepsilon'_{N,\text{baixo}} f_{N,\text{baixo}}^\dagger f_{N,\text{baixo}} \quad (2.57)$$

Observe que ao final das duas fases, que corresponde a uma iteração N , recuperamos a transformação do GRN:

$$H_{(N+1),B} = \Lambda^{1/2} H_{N,B} + \sum_p t'_{Np} (f_{Np}^\dagger f_{(n+1)p} + f_{(N+1)p}^\dagger f_{Np}) + \varepsilon'_{Np} f_{Np}^\dagger f_{Np} \quad (2.58)$$

O processo iterativo começa com H_0 , que é diagonalizado analiticamente. A partir dos autoestados de H_0 , adicionamos $f_{1,\text{alto}}$ e construímos para cada autovetor $|\alpha, 0\rangle$ quatro novos autoestados: $|\alpha, 0\rangle$, $f_{1,\text{alto}\uparrow}^\dagger |\alpha, 0\rangle$, $f_{1,\text{alto}\downarrow}^\dagger |\alpha, 0\rangle$ e $f_{1,\text{alto}\downarrow}^\dagger f_{1,\text{alto}\uparrow}^\dagger |\alpha, 0\rangle$. Essa matriz, que corresponde a $H_{1,A}$, pode então ser diagonalizada numericamente. Da mesma forma, a partir desta diagonalização introduzimos o operador $f_{1,\text{baixo}}$ e construímos a matriz $H_{1,B}$. O ciclo é repetido para $N = 2$ e toda a sequência H_N pode ser diagonalizada recursivamente.

Figura 2.5: Representação esquemática dos sucessivos estágios do processo de diagonalização iterativo. Para cada valor de N temos duas fases. Na fase alta, adicionamos o operador $f_{(N+1),alto}$ aos autoestados resultantes da iteração anterior e diagonalizamos o Hamiltoniano $H_{N+1,alto}$. A seguir os estados com energia maior que $E_{máx}$ são desprezados. Na fase baixa, adicionamos o operador $f_{(N+1),baixo}$ e a base é formada a partir dos autoestados resultantes da fase alta. Novamente os estados de mais alta energia são desconsiderados. A partir daí o ciclo se repete.

Os detalhes da formulação matemática do processo recursivo, muito semelhante ao do método tradicional [56], pode ser encontrado na tese de Silva [11].

A quantidade de estados gerados no processo iterativo cresce muito rapidamente, proporcionalmente a 16^N . Isso é contornado selecionando um subconjunto de autoestados com energia menor que uma energia máxima $E_{máx}$, que é escolhido de forma que os estados com energia maior que $E_{máx}$ tenham fatores de Boltzmann desprezíveis e não afetem as propriedades termodinâmicas. Esse corte de altas energias é feito nas fases alta e baixa. Representamos na Fig. 2.5 o processo iterativo acima descrito.

2.7 As simetrias do modelo

O processo de diagonalização é facilitado pelas simetrias do Hamiltoniano, que definem

grandezas que se conservam. Os correspondentes números quânticos definem a natureza física dos autoestados. No modelo do Kondo de duas impurezas *convencional* as simetrias são as seguintes.

(i) *SPIN*: O Hamiltoniano Kondo de duas impurezas conserva S^2 e S_z , onde $\vec{S}$ é o spin total, dado por

$$\vec{S} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{p,n \\ \mu,\mu'}} f_{np\mu}^\dagger \vec{\sigma}_{\mu\mu'} f_{np\mu'} + (\vec{S}_1 + \vec{S}_2).$$

Os autovalores do Hamiltoniano são independentes de S_z .

(ii) *CARGA*: Outra quantidade conservada é a carga

$$Q_N = \sum_{p,n}^N (f_{np\uparrow}^\dagger f_{np\uparrow} + f_{np\downarrow}^\dagger f_{np\downarrow} - 1),$$

que define o número quântico que denotaremos por Q . Este operador corresponde à componente z de um operador com simetria $SU(2)$ conhecido como carga axial [6], que só é conservado em Hamiltonianos com *simetria* partícula-buraco. Portanto, é justamente esse numero quântico que diferencia os modelos *simétricos* dos modelos *assimétricos*.

(iii) *PARIDADE*: A terceira simetria é a de inversão, que conserva a paridade P : trocar $\vec{R}/2$ por $-\vec{R}/2$. não afeta o Hamiltoniano. A paridade é um operador escalar cuja regras de aplicação são: o produto de dois estados com mesma paridade formam um estado par e o produto de dois estados com paridades diferentes gera um estado ímpar. Para as impurezas, o estado singleto por simetria inversão espacial é par, enquanto o tripleto é ímpar.

Os estados de muitos corpos do Hamiltoniano H_N são caracterizados pelos números quânticos (Q, S, P) e a diagonalização é feita independentemente em cada subespaço.

Capítulo 3

Propriedades termodinâmicas para temperatura finita

Neste capítulo vamos calcular a susceptibilidade magnética das impurezas em função da temperatura do modelo Kondo de duas impurezas *convencional*. Apresentamos resultados para diferentes valores da distância R entre as impurezas que corresponde aos vários regimes característicos do sistema: regime Kondo, regime antiferromagnético e regime ferromagnético.

3.1 Interação RKKY

Inicialmente vamos discutir o acoplamento indireto entre as impurezas. O Hamiltoniano de Kondo não tem acoplamento direto entre os momentos. A interação *RKKY* é um acoplamento indireto entre as impurezas mediada pelos elétrons da banda de condução. O mecanismo que gera a interação *RKKY* é mostrado na Fig. 3.2.

A interação *RKKY* é calculada usando a teoria de perturbação de segunda ordem em J e tem a forma de interação de contato

$$H_{RKKY} = I \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

onde I , no contínuo, é dado por:

Figura 3.1: Diagrama de Feynmann para a interação RKKY entre as impurezas. Excitações virtuais dos elétrons da banda de condução gera um acoplamento efetivo indireto entre as impurezas. Esta interação pode ser calculada usando teoria de perturbação de segunda ordem em J .

$$I(R) = (\rho_0 J)^2 \int_0^D d\varepsilon \int_{-D}^0 d\varepsilon' \frac{(A_e^2(\varepsilon) - A_o^2(\varepsilon))(A_e^2(\varepsilon') - A_o^2(\varepsilon'))}{\varepsilon' - \varepsilon}. \quad (3.1)$$

Quando se usa a aproximação ECC ($k = k_F$) a integral resulta em

$$I(R) = D(\rho_0 J)^2 2 \ln 2 \left(\frac{\sin(k_F R)}{k_F R} \right)^2 \quad (3.2)$$

que somente gera acoplamento ferromagnético. Portanto, para simular a região de acoplamento antiferromagnético no caso *simétrico*, deve-se incluir uma interação direta entre as impurezas.

O GRN, no entanto, trabalha com o Hamiltoniano discretizado. No nosso procedimento a interação *RKKY* gerada é dada por:

$$I(R) = (\rho_0 J)^2 \sum_m \sum_{m'} \left[\sum_p \frac{(\bar{A}_{amp}^2 \bar{A}_{bm'p}^2)}{E_{mp} + E_{m'p}} - \frac{(\bar{A}_{ame}^2 \bar{A}_{bm'o}^2)}{E_{me} + E_{m'o}} - \frac{(\bar{A}_{amo}^2 \bar{A}_{bm'e}^2)}{E_{mo} + E_{m'e}} \right], \quad (3.3)$$

que pode ser calculada numericamente, sendo que os A_{amp} e $A_{bm'p}$ são dados pela Eq. (2.38).

Figura 3.2: Interação *RKKY* I em função da separação entre as impurezas. O Cálculo exato (—) e o resultado do nossa extensão do GRN (•) gera acoplamentos ferromagnéticos e antiferromagnéticos. A aproximação ECC (---), por outro lado, gera somente acoplamentos ferromagnéticos.

Na Fig.3.2 mostramos o gráfico da interação *RKKY* I , em função da separação das impurezas R . Comparamos o valor exato, calculado por (3.1), com o resultante da aproximação ECC, dado por (3.2) e com o resultante do nosso método, dado por (3.3), para o caso $\Delta = 1$, escolhido como exemplo. Os resultados do GRN são obtidos com $\Lambda = 10$. A aproximação ECC gera somente acoplamentos ferromagnéticos e os valores só são comparáveis com o resultado exato no limite $R \rightarrow 0$ (que tem pouca importância física). Por outro lado, o nosso procedimento gera interações tanto ferro como antiferromagnéticas e, a exceção da região de R pequeno, os valores obtidos são muito próximos do resultado exato. Um ponto importante é que o sinal da interação no contínuo é reproduzido no caso discreto. Portanto, o método que desenvolvemos permite estudar o modelo Kondo de duas impurezas em todo espaço paramétrico sem a necessidade de se introduzir interações adicionais como os trabalhos que usam a aproximação ECC.

3.2 Cálculo das propriedades termodinâmicas

O cálculo das propriedades termodinâmicas envolve o fator de Boltzmann $\exp(-H/k_B T)$ que, usando as Eq. (2.49) e (2.51), pode ser reescrita como:

$$\exp(-H/k_B T) = \exp(-\bar{\beta} H/D_N) \cong \exp(-\bar{\beta} H_N).$$

Na prática, escolhemos uma sequência de valores de $\bar{\beta}$ numa escala logarítmica, que corresponde à sequência de temperaturas dadas por [ver Eq. (2.49)]

$$k_B T = D_N / \bar{\beta},$$

ajustados de forma que a temperatura mais baixa numa dada interação corresponda à temperatura mais alta da interação seguinte. A descontinuidade da propriedade termodinâmica obtida entre estas interações indica a precisão do cálculo. Portanto, para cada interação N obtemos várias temperaturas correspondentes aos diferentes valores de $\bar{\beta}$.

Com relação aos parâmetros do modelo o procedimento é o seguinte: (i) inicialmente fixamos $k_F R$, cujo valor determina a intensidade e o sinal do acoplamento $RK KY$ — ferromagnético ou antiferromagnético; (ii) escolhemos o parâmetro Δ , especialmente importante nas análises para $T = 0$; (iii) escolhemos ρJ , que permite variar a razão $I/k_B T_K$ em ordens de grandeza. O último item é consequência da dependência das energias características do modelo com ρJ :

$$\begin{cases} k_B T_K \propto \sqrt{\rho J} \exp(-\frac{1}{\rho J}) \\ I \propto (\rho J)^2 \end{cases}$$

3.2.1 Cálculo da susceptibilidade magnética

Vamos calcular inicialmente a contribuição das impurezas para a susceptibilidade magnética uniforme a campo zero, dada por:

$$\chi_{imp}(T) = \frac{(g\mu_B)^2}{k_B T} \left[\frac{Tr(S_N^z)^2 e^{-\beta H_N}}{Tre^{-\beta H_N}} - \frac{Tr(S_N^{0z})^2 e^{-\beta H_N^0}}{Tre^{-\beta H_N^0}} \right] \quad (3.4)$$

onde H_N^0 é o Hamiltoniano da banda de condução livre e $g\mu_B$ é a razão giromagnética que, por escolha adequada de unidades, vamos sempre supor igual a 1.

Como vimos no capítulo anterior, os autoestados do Hamiltoniano conservam a carga, o spin e a paridade. Considere, portanto, as energias dos autoestados denotadas por $E_N(q, s, p, r)$ onde q é a carga, s é o spin, p é a paridade e r indica a posição do nível naquele subespaço. Podemos avaliar os traços envolvendo H_N na equação anterior resultando em:

$$Tr(e^{-\beta H_N}) = \sum_{q,s,p,r} (2s+1) e^{-\beta E_N(q,s,p,r)} \quad (3.5)$$

$$Tr((S_N^z)^2 e^{-\beta H_N}) = \sum_{q,s,p,r} \frac{1}{3} (2s+1) s(s+1) e^{-\beta E_N(q,s,p,r)} \quad (3.6)$$

Os traços envolvendo H_N^0 , que é um Hamiltoniano quadrático, podem ser avaliados facilmente em termos do conjunto de níveis de partículas independentes $\eta_{j,p}^*$ que o representa (A diagonalização desse Hamiltoniano é feita explicitamente na seção 4.2.1 do Cap. 4). Temos portanto

$$\frac{Tr(S_N^{0z})^2 e^{-\beta H_N^0}}{Tre^{-\beta H_N^0}} = \sum_{p=e,o} 2 \frac{e^{-\beta_N \eta_{j,p}^*}}{(1 + e^{-\beta_N \eta_{j,p}^*})^2}, \quad \text{para } N \text{ ímpar,}$$

enquanto que para N par os autovalores são diferentes e devemos substituir $\eta_{j,p}^*$ por $\hat{\eta}_{j,p}^*$ na expressão anterior (as expressões para $\eta_{j,p}^*$ e $\hat{\eta}_{j,p}^*$ são dadas pelas Eq. (4.14) e (4.7) do Cap. 4).

3.3 Resultados para susceptibilidade

Vamos mostrar os resultados da susceptibilidade para os três casos característicos do problema Kondo de duas impurezas: regime Kondo, regime antiferromagnético e

regime ferromagnético. Os cálculos são efetuados fixando a constante de acoplamento e a assimetria em

$$\begin{cases} J = 0.1D \\ \Delta = 1 \end{cases} \quad (3.7)$$

e escolhendo valores da separação entre as impurezas R convenientes de forma que cada um dos regimes acima seja alcançado. A temperatura de Kondo do problema de uma impureza para este particular valor de J é

$$k_B T_K = 1.4 \times 10^{-5} D \quad (3.8)$$

enquanto que a interação $RKKY$ dependerá, como já vimos, da distância R .

Na Fig. 3.3 mostramos o produto $\chi(T)k_B T/2$ em função da temperatura numa escala logarítmica. Os resultados apresentados nessa forma são mais convenientes, pois mostram a dependência na temperatura do quadrado do momento efetivo (M_{eff}) por impureza, conforme sugere a lei de Curie, que descreve a susceptibilidade de sistemas com momento magnético líquido (M).

$$\frac{\chi(T)k_B T}{(g\mu_B)^2} = \langle M_z^2 \rangle = \frac{1}{3} M(M+1) \quad (3.9)$$

Antes de discutir cada um dos regimes é importante destacar dois aspectos. O primeiro refere-se ao poder da técnica do GRN, que permite atingir temperaturas arbitrariamente baixas — observe que nosso intervalo de temperatura cobre 13 ordens de grandeza $[10^{-1} - 10^{-14}]$. Segundo, é importante salientar que estes são os primeiros gráficos essencialmente exatos da susceptibilidade magnética em função da temperatura no modelo Kondo de duas impurezas *convencional*. Resultado semelhante em todo esse intervalo de temperatura só havia sido conseguido por Silva [11], que no entanto usou a aproximação ECC, ou seja, seus resultados só valem para o modelo *simétrico*.

Regime Kondo: ($R \rightarrow \infty$)

Quando as impurezas estão bem separadas, a interação $I \rightarrow 0$ e o sistema se comporta como o de duas impurezas isoladas. Com o decréscimo da temperatura os momentos são compensados independentemente pelo efeito Kondo e para $T < T_K$ o momento líquido já está próximo de zero. Nossos resultados numéricos são mostrados na curva A ($\times$) e podem ser comparados com a curva universal da susceptibilidade para impurezas isoladas com spin $1/2$ obtidas pelo *Bethe-Ansatz* [16] representada pela linha sólida. Observe que nossos resultados reproduzem perfeitamente a curva universal $T\chi(\frac{T}{T_K})$.

Os resultados neste regime servem de referência para os outros casos mais interessantes, que discutiremos a seguir, e mostram que o método que utilizamos é adequado ao cálculo dessa propriedade.

Regime Ferromagnético: ($k_F R = \frac{\pi}{2}$)

Para separação das impurezas tal que $k_F R = \frac{\pi}{2}$ temos que a interação *RKKY* entre as impurezas, calculada por (3.3), é ferromagnética e dada por

$$I_{FM} = -8 \times 10^{-3} D \quad (3.10)$$

$$|I_{FM}| \gg k_B T_K.$$

A curva da susceptibilidade é mostrada pela curva B ($\circ$) e mostra um comportamento bem mais interessante que o caso anterior, com três fases distintas. Inicialmente, com o decréscimo da temperatura, as impurezas acoplam-se ferromagneticamente num estado tripleto descrito por um spin efetivo $S = 1$. O produto $\chi T/2$ aumenta do valor $\frac{1}{4}$, característico de dois spin $1/2$ isolados, para o valor $\frac{1}{3}$, característico de uma impureza com $S = 1$, mas não chega a alcançar este valor devido às interações entre esse spin e os elétrons de condução. A posterior blindagem do spin resultante $S = 1$ acontece em duas etapas. Inicialmente o canal par, que está mais fortemente acoplado com as impurezas

Figura 3.3: Dependência térmica do momento efetivo ao quadrado para três valores da separação R entre as impureza (com $\Delta = 1$ e $J = 0.1D$). A curva ($R \rightarrow \infty, x$) é equivalente a de duas impurezas isoladas e serve de referência para os outros casos. No regime ferromagnético ($k_F R = \frac{\pi}{2}$) ocorre o efeito Kondo de dois estágios. Quando a temperatura diminui as impurezas formam um tripleto [descrito fenomenologicamente por $\bar{\chi}_{FM}$ (3.14) com $\bar{I} = -8 \times 10^{-3}D$]. A seguir, o momento é blindado, primeiro pelo canal par [ajustada pela curva universal, $S = 1 \rightarrow 1/2$, do modelo de uma impureza com spin 1 obtido pelo *Bethe Ansatz*] e depois pelo canal impar [ajustado por $S = 1/2 \rightarrow 0$: curva universal para spin 1/2]. No regime antiferromagnético ($k_F R = \pi$) as impurezas se acoplam num singleto [descrita por $\bar{\chi}_{AFM}$ com uma interação efetiva $\bar{I} = 3 \times 10^{-3}D$] e o momento decai rapidamente a zero.

($J_e > J_o$), formam uma nuvem eletrônica em torno das impurezas reduzindo o momento efetivo de $S = 1$ para $S = \frac{1}{2}$. Essa etapa define uma escala de energia característica, que chamaremos de *energia de Kondo do canal par* ($k_B T_{Ke}$), determinada basicamente por J_e e neste caso dada por

$$k_B T_{Ke} = 1.54 \times 10^{-5} D. \quad (3.11)$$

Finalmente, diminuindo mais ainda a temperatura, as impurezas são completamente blindadas pelo canal ímpar, que reduz o spin remanescente de $S = \frac{1}{2}$ para $S = 0$. Teremos, analogamente à etapa anterior, uma *energia de Kondo característica do canal ímpar* ($k_B T_{Ko}$), cujo valor é

$$k_B T_{Ko} = 7.19 \times 10^{-13} D. \quad (3.12)$$

A compensação dos spins em escalas de energias bem separadas ($T_{Ko} \ll T_{Ke}$) é conhecido como efeito Kondo de dois estágios. Conforme discutimos no Cap.1, esse efeito foi previsto inicialmente em 1981 por Jayaprakash et al [5], através de uma análise perturbativa da susceptibilidade magnética. Nossos resultados numéricos, portanto, confirmam as conclusões de Jayaprakash e determinam a curva da susceptibilidade para toda faixa de temperaturas, inclusive as regiões de transição entre uma etapa e outra, descritas apenas qualitativamente pelas técnicas de *scaling*. Paralelo ao nosso trabalho, este efeito foi observado no modelo Kondo de uma impureza com spin 1 acoplado anisotropicamente com dois canais de condução por Andrei et al [57] usando a técnica *Bethe Ansatz*. Eles mostraram que o modelo gera duas escalas de energia $T_i = D \exp(-\pi/J_1)$ e $T_a = D \cos(\frac{\pi J_1}{2 J_2}) \exp(-\pi/J_1)$, onde J_1 e J_2 são os acoplamentos da impureza com cada canal. Eles analisaram várias propriedades termodinâmicas em função da razão $r = T_a/T_i$. Quando $r \rightarrow \infty$, o sistema comporta-se como o de um spin $S = 1$ acoplado com um canal de condução e o spin é apenas parcialmente compensado.

Quando $r > 1$ o spin é blindado de uma única vez. Porém, para $r \leq 1$ a compensação total do spin é feita em duas etapas (correspondendo a cada uma das escalas de energia) numa forma semelhante aos encontrados em nosso estudo. Esses são os primeiro trabalhos com resultados quantitativos para o efeito Kondo de dois estágios.

Nossa curva numérica pode ser bem ajustada por curvas apropriadas para descrever cada região. Na região ascendente ($k_B T > 10^{-3} D$) a interação *RKKY* contribui para aumentar o momento das impurezas e pode ser descrita pela susceptibilidade de dois spin $\frac{1}{2}$ livres e acoplados entre si por uma interação ferromagnética efetiva $\bar{I}$, isto é

$$\chi_l = \frac{2}{3 + \exp(\bar{I}/k_B T)}. \quad (3.13)$$

Ao mesmo tempo, os elétrons da banda de condução progressivamente tendem a blindar cada impureza individualmente e isso pode ser descrito pela curva universal do efeito Kondo para impurezas isoladas, ou seja, é a susceptibilidade quando as impurezas estão infinitamente separadas $\chi_{R \rightarrow \infty}$.

Vamos descrever a região ascendente fenomenologicamente multiplicando a susceptibilidade de duas impurezas infinitamente separadas $\chi_{R \rightarrow \infty}(T)$ por um fator de correção, proporcional a χ_l , (Eq. 3.13), ajustado de forma que para $T \rightarrow \infty$, esse fator seja igual a 1. Nossos resultados numéricos são muito bem ajustados pela função dada por

$$\bar{\chi}(T) = \chi_{R \rightarrow \infty}(T) \frac{4}{3 + \exp(\bar{I}/k_B T)} \quad (3.14)$$

calculada com $\bar{I} = I_{FM}$, (Eq. 3.10) e é mostrado na Fig. 3.3 pela curva $\bar{\chi}_{FM}$. Portanto, no caso ferromagnético, o acoplamento efetivo $\bar{I}$ é essencialmente o mesmo do cálculo perturbativo I_{FM} .

Na região correspondente ao efeito Kondo de dois estágios ($k_B T < 10^{-3} D$) os resultados são ajustados com as curvas universais do modelo Kondo de 1 impureza e 1

canal obtidos pelo método *Bethe-Ansatz* [17,57], com temperaturas de Kondo apropriadas. A primeira etapa é ajustada para impureza com spin 1 e $T_K = T_{Ke}$ (3.11) e mostrada na Fig. 3.3 pela linha sólida ($S = 1 \rightarrow 1/2$) enquanto que a parte final é descrita para impureza com spin $\frac{1}{2}$ e $T_K = T_{Ko}$ (3.12) dada pela linha sólida ($S = 1/2 \rightarrow 0$). O ajuste, excelente em ambas as regiões, sanciona a interpretação discutida acima.

Em toda a região descendente o ideal seria fazer a comparação dos nossos resultados com os obtidos para o modelo Kondo de uma impureza com spin $S = 1$ acoplados com dois canais de condução anisotrópicos. A equivalência, ou não, dos dois modelos seria particularmente importante na região de transição entre os dois estágios que, como pode ser observado no gráfico, não é bem descrita pelas curvas universais de uma impureza. Até o momento, no entanto, os resultados publicados [57] se referem apenas a um único conjunto de parâmetros, não permitindo que uma comparação quantitativa com nossos resultados.

Regime antiferromagnético: ($k_F R = \pi$)

O primeiro máximo antiferromagnético ocorre para $k_F R = \pi$, como pode ser observado pela fig 3.2, onde a interação *RKKY* entre as impurezas calculada perturbativamente por (3.3) é

$$I_{AFM} = 1.4 \times 10^{-3} D \gg k_B T_K. \quad (3.15)$$

Neste caso, quando a temperatura diminui as impurezas se acoplam antiferromagneticamente num estado singleto $S = 0$ e o momento efetivo decai abruptamente a zero para uma temperatura $T \simeq \frac{I_{AFM}}{k_B}$. Isso é mostrado na curva *B* (•). Como a temperatura de formação do singleto é muito maior que T_K não há momento residual a ser compensado pelos elétrons de condução e o efeito Kondo praticamente não existe.

Analogamente ao caso ferromagnético, esse decaimento rápido pode ser bem ajustado

pela função (3.14), sendo que o acoplamento efetivo entre as impurezas é agora antiferromagnético, dado por $\bar{I} = 3 \times 10^{-3}D$. Este ajuste é mostrado na Fig. 3.3 pela curva $\bar{\chi}_{AFM}$. No caso antiferromagnético, portanto, a correlação *RKKY* efetiva $\bar{I}$ é modestamente renormalizada quando comparada com a obtida perturbativamente I_{AFM} (3.15).

Consequentemente, a altas temperaturas ($T > T_K$), tanto o caso ferromagnético quanto o antiferromagnético podem ser bem descrito pela função (3.14) com os valores apropriados da interação efetiva entre as impurezas magnéticas.

Os três casos descritos anteriormente praticamente esgotam as análises relevantes para a susceptibilidade em função da temperatura. Uma variação nos parâmetros do modelo recairia nestes regimes ou numa região intermediária sem praticamente nenhuma outra informação adicional relevante. Um exame detalhado do caso antiferromagnético para baixas temperaturas, no entanto, mostra outra face interessante do problema.

3.4 $T \rightarrow 0$ no regime antiferromagnético: susceptibilidade de Van-Vleck

No caso antiferromagnético para temperaturas $k_B T \ll I_{AFM}$ a susceptibilidade passa a ter um decaimento linear e não é mais ajustada pela curva $\bar{\chi}_{AFM}$. Isso é mostrado na Fig. 3.4. Portanto, a física do problema deve ser descrita por outro mecanismo. De fato, a baixas temperaturas, o estado fundamental singleto ($S = 0$) é separado do estado excitado ($S = 1$) por uma energia $I = I_{AFM}$ e estes subespaços são interligados por uma interação proporcional a uma constante de acoplamento J_{eff} . Representamos esquematicamente esse quadro na Fig. 3.5.

As excitações virtuais do singleto ao tripleto dominam as propriedades de baixas temperaturas. A contribuição para a susceptibilidade por esse mecanismo é conhecida

Figura 3.4: Susceptibilidade magnética a baixas temperaturas no regime antiferromagnético. A curva $\bar{\chi}_{AFM}$ que descreve a formação do singlete a altas temperaturas claramente não se ajusta aos resultados numéricos(■). Para $T \rightarrow 0$ as contribuições de Van-Vleck, dadas pela reta $\chi_0 T$ [ver Eq. (3.16)] , tornam-se dominantes.

Figura 3.5: Representação esquemática do estado fundamental do regime antiferromagnético. A diferença de energia entre o estado fundamental singlete e o tripleto é dada pela interação $RKKY$ I_0 . Os dois subespaços estão interligados indiretamente através de um acoplamento efetivo J_{eff} , que pode ser determinado pela técnica do *scaling* perturbativo.

como susceptibilidade de *Van-Vleck*. Para calcular essa contribuição usaremos uma combinação da teoria de perturbação em J_{eff} com o formalismo do *scaling* perturbativo [5].

Considerando um Hamiltoniano perturbativo da forma

$$H_{per} = \rho J_{eff} \vec{S}_{BC} \cdot (\vec{S}_1 - \vec{S}_2),$$

onde $\vec{S}_{BC}$ representa os spins da banda de condução, $(\vec{S}_1 - \vec{S}_2)$ as impurezas e J_{eff} é o acoplamento efetivo, Jayaprakash e Krishna-murthy (comunicação privada) calcularam a susceptibilidade usando a teoria de perturbação de segunda ordem e encontraram que

$$\chi_0 \sim \frac{(\rho J_{eff})^2}{I}. \quad (3.16)$$

Nesta expressão o denominador I é a diferença de energia entre o estado fundamental singleto e o estado excitado tripleto ($I = I_{AFM}$) e o numerador é proporcional a H_{per}^2 .

A próxima questão é: “Qual o acoplamento efetivo J_{eff} apropriado para a expressão anterior?”. Esse acoplamento é determinado usando a técnica do *scaling* perturbativo, que foi usado por Jayaprakash et al. [5], para estudar o modelo Kondo de duas impurezas. O formalismo do *scaling* perturbativo é baseado numa transformação de grupo de renormalização que transforma o Hamiltoniano inicial $H(D)$, com largura da banda de condução $2D$, para um *Hamiltoniano efetivo* $H(D')$, com uma largura da banda reduzida para $2D'$. [58] Desta forma é possível encontrar a evolução de um *Hamiltoniano efetivo* que descreve sucessivamente escalas de energias menores e consequentemente temperaturas mais baixas ($k_B T \sim D'$). Nessa técnica geram-se relações de recorrência para as constantes de acoplamento que caracterizam o *Hamiltoniano efetivo*. Em particular, o acoplamento J satisfaz a seguinte relação de recorrência [5]

$$\frac{d\rho J}{d \ln(D/D')} = (\rho J)^2, \quad (3.17)$$

cuja solução mostra como J é renormalizado quando a largura da banda (ou a temperatura) decresce. Teremos, portanto, que o acoplamento aumenta com o decréscimo da temperatura como

$$\rho J(D') = \frac{1}{\log(\frac{D'}{k_B T_K})} \quad (3.18)$$

onde T_K , neste contexto, é a temperatura onde J torna-se divergente e a teoria de perturbação se esgota, dada por $T_K = D \exp(-\frac{1}{\rho J})$.

No regime antiferromagnético a renormalização da constante de acoplamento J é interrompida quando a temperatura é da ordem da interação $RKKY$ I , ou seja, quando as impurezas se acoplam no estado singleto. Portanto, para temperatura (ou equivalentemente D') dada por

$$k_B T = \eta I, \quad (3.19)$$

onde η é uma constante adimensional da ordem da unidade, o acoplamento efetivo torna-se:

$$\rho J_{eff} = \frac{1}{\log(\frac{\eta I}{k_B T_K})}. \quad (3.20)$$

Substituindo esse valor na expressão (3.16) teremos susceptibilidade de Van-Vleck para o regime antiferromagnético a baixas temperaturas.

$$\chi_0 \sim \frac{1}{I \log^2(\frac{\eta I}{k_B T_K})}. \quad (3.21)$$

A baixas temperaturas ($T \ll I_{AFM}$) a susceptibilidade é dominada por esse mecanismo, sendo portanto independente da temperatura. Na Fig. 3.4 mostramos o ajuste de $T\chi$ pela reta $T\chi_0$ que confirma essa interpretação.

O valor de χ_0 , que corresponde à suscetibilidade a temperatura zero, pode ser obtido pelo espectro de energias a baixas temperaturas, que iremos discutir extensivamente no

próximo capítulo, ou pelo coeficiente angular da reta que melhor se ajuste aos pontos da simulação numérica. Os resultados de χ_0 calculados dessas duas formas são equivalentes, porém, a primeira fornece resultados bem mais precisos.

Esse é o primeiro trabalho que calcula com precisão a susceptibilidade nessa faixa de temperatura e mostra claramente a contribuição de Van Vleck. Cabe ressaltar que somente métodos como o GRN, que podem atingir temperaturas arbitrariamente baixas são capazes de descrever resultados como esse.

Neste capítulo obtivemos uma variedade de resultados do modelo Kondo de duas impurezas *convencional*, que mostra como a competição entre duas escalas de energias (ou interações características), neste caso $k_B T_K$ e I_{RKKY} , pode gerar uma riqueza de comportamento.

Capítulo 4

Propriedades termodinâmicas para $T=0$

Neste capítulo vamos nos restringir à região antiferromagnética, pois, como vimos no capítulo 1, é nessa região paramétrica que ocorrem as propriedades interessantes do modelo tais como a divergência do calor específico e a descontinuidade da fase no modelo *simétrico*. Calcularemos a defasagem da banda de condução, o coeficiente linear do calor específico e a susceptibilidade em função da razão $I/k_B T_K$. Mostraremos como obter essas propriedades a partir do espectro de baixas energias obtido da diagonalização iterativa. A seguir, mostraremos que essas propriedades variam continuamente com $I/k_B T_K$, ou seja, que o sistema sempre se comporta como líquido de Fermi, e que a *assimetria* Δ do Hamiltoniano *convencional* destrói o ponto crítico obtido no modelo *simétrico*.

4.1 A transformação do GRN e os pontos fixos

Antes de mostrar os resultados das propriedades termodinâmicas para $T = 0$ vamos fazer uma breve descrição dos pontos fixos do nosso Hamiltoniano. Os pontos fixos são conceitos mais gerais do GRN e que serão necessários para se entender os cálculos das propriedades a $T = 0$.

Como vimos no capítulo 2, o método do GRN é baseado na transformação $\mathcal{T}[H_N] = H_{N+1}$ (Eq. 2.55) que permite definir o processo recursivo de diagonalização. Um ponto

fixo H^* da transformação $\mathcal{T}$ é um Hamiltoniano que mantém-se invariante sob essa operação, isto é, $\mathcal{T}[H^*] = H^*$. Na realidade, como mostraremos a seguir, os pontos fixos desse problema são pontos fixos de $\mathcal{T}^2$ (aplicação do operador $\mathcal{T}$ duas vezes), isto é, $\mathcal{T}^2[H_N] = H_{N+2}$ que é, também, uma transformação do GRN.

Um ponto fixo de $\mathcal{T}^2$ é caracterizado numericamente quando um conjunto das autoenergias de muitos corpos e elementos de matriz entre f_n se repetem (ou, na prática, mudam muito pouco) quando realizamos o processo iterativo duas vezes. Nesse processo quando N aumenta, o Hamiltoniano passa por vários pontos fixos até atingir o ponto fixo estável do estado fundamental, cujas propriedades determinam a física de baixas temperaturas, sendo portanto o único que vamos analisar com detalhes. A determinação de todos os pontos fixos é um assunto interessante, porém, está fora do contexto que queremos discutir nesta tese. Para o modelo Kondo de duas impurezas *simétrico*, uma análise detalhada dos pontos fixos pode ser encontrado nos trabalhos de Jones et al [9, 56] e Silva [11].

A determinação dos pontos fixos é feita encontrando um Hamiltoniano efetivo que forneça as mesmas energias e autoestados resultantes da diagonalização iterativa. Os vários pontos fixos de $\mathcal{T}^2$ estão relacionados com o Hamiltoniano de elétrons livres H_{Np}^0 , cuja estrutura devemos inicialmente entender. Esse ponto fixo está geralmente associado com a região de altas temperaturas.

4.1.1 Ponto fixo de elétrons livres

O Hamiltoniano de elétrons livres H_{Np}^0 , é dado somente pela banda de condução sem a presença das impurezas, isto é,

$$H_{Np}^0 = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \sum_{n=0}^{N-1} \Lambda^{-n/2} \left[t'_{np} (f_{np}^\dagger f_{(n+1)p} + f_{(n+1)p}^\dagger f_{np}) + \varepsilon'_{np} f_{np}^\dagger f_{np} \right] \quad p = o, e \quad (4.1)$$

e geralmente corresponde ao ponto fixo das iterações iniciais.

Esse Hamiltoniano, assintoticamente simétrico no limite de N grande, é quadrático e, diagonalizado, gera um conjunto de $N + 1$ níveis de energias de partículas independentes. As energias são obtidas a partir da representação do Hamiltoniano na forma matricial,

$$H_{Np}^0 = f^\dagger \mathcal{H}_{Np}^0 f, \quad (4.2)$$

onde $\mathcal{H}_{Np}^0$ é uma matriz $(N + 1) \times (N + 1)$, cujos únicos elementos não nulos são

$$\begin{cases} (\mathcal{H}_{Np}^0)_{n,n+1} = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \Lambda^{-n/2} t'_{np} \\ (\mathcal{H}_{Np}^0)_{n,n} = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \Lambda^{-n/2} \varepsilon'_{np} \end{cases} \quad (4.3)$$

e $f^\dagger = (f_0^\dagger, f_1^\dagger, \dots, f_N^\dagger)$ é o vetor formado pelos operadores fermiônicos.

Os autoestados da matriz $\mathcal{H}_{Np}^0$ são obtidos numericamente. Devido a simetria partícula-buraco de $\mathcal{H}_{Np}^0$ para cada autovalor η existe um simétrico $-\eta$. Desta forma, para N ímpar, os autovalores simétricos denotaremos $\pm \eta_{jp}^*$ ($j = 1, \dots, \frac{N+1}{2}$). Para N par, por outro lado, deve haver um autovalor com energia zero que denotaremos $\hat{\eta}_{0p}^*$, enquanto que os outros são dados pelo conjunto $\pm \hat{\eta}_{jp}^*$ ($j = 1, \dots, \frac{N}{2}$).

No estado fundamental todos estados com energia negativa devem estar completamente ocupados. Para subtrair a energia do estado fundamental introduzimos um operador de buraco associado com as energias negativas e fazemos uma ordenação normal. Os elétrons e os buracos terão, então, o mesmo conjunto de energias positivas.

Além dos autovalores podemos encontrar a expansão dos operadores f_N em termos dos operadores de elétron e buraco que diagonalizam $\mathcal{H}_{Np}^0$. Esse é um processo padrão e consiste em inverter os autovetores obtidos durante a diagonalização numérica.

Os valores de η_{jp}^* e $\hat{\eta}_{jp}^*$ avaliados numericamente para um dado Λ aproximam-se rapidamente de valores limites. Esses valores, bem como as expansões dos operadores f_{0p} e f_{1p} são dados abaixo para N par e ímpar. Como podemos observar, o conjunto de autovalores η_{jp}^* e $\hat{\eta}_{jp}^*$ são diferentes.

N ímpar

$$H_{Np}^0 = \sum_{j=1}^{(N+1)/2} \eta_{jp}^* (g_{jp}^\dagger g_{jp} + h_{jp}^\dagger h_{jp}) \quad (4.4)$$

$$f_{0p} = \Lambda^{-\frac{N-1}{4}} \sum_{j=1}^{(N+1)/2} (\alpha_{0jp}^{*+} g_{jp} + \alpha_{0jp}^{*-} h_{jp}^\dagger) \quad (4.5)$$

$$f_{1p} = \Lambda^{-\frac{3(N-1)}{4}} \sum_{j=1}^{(N+1)/2} (\alpha_{1jp}^{*+} g_{jp} - \alpha_{1jp}^{*-} h_{jp}^\dagger) \quad (4.6)$$

Para N grande, os valores limites das energias e coeficientes dos operadores são dados por:

$$\eta_{jp}^* = \Lambda^{j-z_p} \quad (4.7)$$

$$\begin{cases} \alpha_{0jp}^{*+} = N_p \frac{\int_{\Lambda^{-\frac{N-1}{2}+j-z_p-1}}^{\Lambda^{-\frac{N-1}{2}+j-z_p}} A_p(\varepsilon) d\varepsilon}{(1-\Lambda^{-1})^{-1/2} \Lambda^{-\frac{N-1}{4}+\frac{j-z_p}{2}}} \\ \alpha_{0jp}^{*-} = N_p \frac{\int_{-\Lambda^{-\frac{N-1}{2}+j-z_p}}^{-\Lambda^{-\frac{N-1}{2}+j-z_p-1}} A_p(\varepsilon) d\varepsilon}{(1-\Lambda^{-1})^{-1/2} \Lambda^{-\frac{N-1}{4}+\frac{j-z_p}{2}}} \end{cases} \quad (4.8)$$

Os resultados numéricos confirmam essas expressões.

Para j próximo de 1, que corresponde aos níveis com mais baixa energia, podemos aproximar o integrando das Eq.(4.8) para $A_p(\varepsilon_F)$ e teremos os seguintes comportamentos assintóticos:

$$\begin{cases} \alpha_{0jp}^{*+} = \alpha_{0p}(k_F) \left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2}\right)^{1/2} \Lambda^{(j-z_p)/2} \\ \alpha_{0jp}^{*-} = \alpha_{0p}(k_F) \left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2}\right)^{1/2} \Lambda^{(j-z_p)/2} \end{cases} \quad \begin{cases} \alpha_{1jp}^{*+} = \alpha_1^+ \Lambda^{(j-z_p)/2} \\ \alpha_{1jp}^{*-} = \alpha_1^- \Lambda^{(j-z_p)/2} \end{cases} \quad (4.9)$$

onde $\alpha_{0p}(k_F)$ é dado por:

$$\alpha_{0p}(k_F) = \left\{ \frac{2k_F R \Delta / D \left[1 \pm \frac{\sin(k_F R)}{k_F R} \right]}{2k_F R \Delta \pm [\text{Si}((\Delta + 1)k_F R) - \text{Si}((1 - \Delta)k_F R)]} \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (4.10)$$

A expressão 4.9 é muito semelhante à obtida no processo tradicional de Wilson [48], a menos do fator multiplicativo $\alpha_{0p}(k_F)$.

Para o ponto fixo de N par teremos uma situação análoga e os resultados são os seguintes.

N par

$$H_{Np}^0 = \sum_{j=1}^{(N)/2} \hat{\eta}_{jp}^* (g_{jp}^\dagger g_{jp} + h_{jp}^\dagger h_{jp}) + \hat{\eta}_{0p}^* g_{0p}^\dagger g_{0p} \quad (4.11)$$

$$f_{0p} = \Lambda^{-\frac{N-1}{4}} \left[\sum_{j=1}^{(N+1)/2} (\hat{\alpha}_{0jp}^{*+} g_{jp} + \hat{\alpha}_{0jp}^{*-} h_{jp}^\dagger) + \hat{\alpha}_{00p}^{*+} g_{0p} \right] \quad (4.12)$$

$$f_{1p} = \Lambda^{-\frac{3(N-1)}{4}} \sum_{j=1}^{(N+1)/2} (\hat{\alpha}_{1jp}^{*+} g_{jp} - \hat{\alpha}_{1jp}^{*-} h_{jp}^\dagger) \quad (4.13)$$

Para N grande, teremos:

$$\hat{\eta}_{jp}^* = \Lambda^{j-z_p+\frac{1}{2}} \quad (4.14)$$

$$\begin{cases} \hat{\alpha}_{0jp}^{*+} = N_p \frac{\int_{\Lambda^{-\frac{N-1}{2}+j-z_p-\frac{1}{2}}}^{\Lambda^{-\frac{N-1}{2}+j-z_p+\frac{1}{2}}} A_p(\epsilon) d\epsilon}{(1-\Lambda^{-1})^{-1/2} \Lambda^{-\frac{N-1}{4}+\frac{j-z_p+\frac{1}{2}}}} \\ \hat{\alpha}_{0jp}^{*-} = N_p \frac{\int_{-\Lambda^{-\frac{N-1}{2}+j-z_p+\frac{1}{2}}}^{-\Lambda^{-\frac{N-1}{2}+j-z_p-\frac{1}{2}}} A_p(\epsilon) d\epsilon}{(1-\Lambda^{-1})^{-1/2} \Lambda^{-\frac{N-1}{4}+\frac{j-z_p+\frac{1}{2}}} \end{cases} \quad (4.15)$$

Os valores assintóticos dos coeficientes são:

$$\begin{cases} \hat{\alpha}_{0jp}^{*+} = \alpha_{0p}(k_F) \left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2}\right)^{1/2} \Lambda^{(j-z_p+\frac{1}{2})/2} \\ \hat{\alpha}_{0jp}^{*-} = \alpha_{0p}(k_F) \left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2}\right)^{1/2} \Lambda^{(j-z_p+\frac{1}{2})/2} \end{cases} \quad \begin{cases} \hat{\alpha}_{1jp}^{*+} = \hat{\alpha}_1^+ \Lambda^{(j-z_p)/2} \\ \hat{\alpha}_{1jp}^{*-} = \hat{\alpha}_1^- \Lambda^{(j-z_p)/2} \end{cases} \quad (4.16)$$

onde $\alpha_0(k_F)$ é o mesmo do N ímpar dado pela expressão (4.10).

4.1.2 Ponto fixo de elétrons livres com potencial de espalhamento

Para o regime antiferromagnético, onde estamos interessados, o Hamiltoniano H_N se aproxima assintoticamente a baixas temperaturas (limite de número N de iterações grande) de um ponto fixo estável cujos autoestados são bem descrito pelo Hamiltoniano

$$H_{Np}(\tilde{K}) = \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \left\{ \sum_{n=0}^{N-1} \Lambda^{-n/2} \left[t'_{np} (f_{np}^\dagger f_{n+1p} + f_{n+1p}^\dagger f_{np}) + \varepsilon'_{np} f_{np}^\dagger f_{np} \right] + \tilde{K} f_{0p}^\dagger f_{0p} \right\} \quad p = o, e. \quad (4.17)$$

Onde $\tilde{K} f_{0p}^\dagger f_{0p}$ descreve um potencial de espalhamento dos elétrons de condução no sítio da impureza e $\tilde{K} = K \frac{2}{1+\Lambda^{-1}}$.

A diagonalização desse Hamiltoniano está mostrada, em detalhe, no Apêndice B. Os resultados para os autovalores e a expansão de f_{0p} na base que o diagonaliza, são dados abaixo para N par e ímpar.

N ímpar

$$H_{Np}^0 = \sum_{j=1}^{(N+1)/2} (\eta_{jp}^+ g_{jp}^\dagger g_{jp} + \eta_{jp}^- h_{jp}^\dagger h_{jp}) \quad (4.18)$$

$$f_{0p} = \Lambda^{-\frac{N-1}{4}} \sum_{j=1}^{(N+1)/2} (\alpha_{0jp}^+ g_j + \alpha_{0jp}^- h_{jp}^\dagger), \quad (4.19)$$

onde os comportamentos assintóticos de α_{0jp}^+ e das energias são

$$\eta_{jp}^\pm = \Lambda^{j-z_p \pm \delta/\pi} \quad (4.20)$$

$$\alpha_{0jp}^\pm = \alpha_{0p}(k_F) \left(\frac{1 - \Lambda^{-1}}{2} \right)^{1/2} (\eta_{jp}^\pm)^{\frac{1}{2}} \cos \delta \quad (4.21)$$

N par

$$H_{Np}^0 = \sum_{j=1}^{(N)/2} \hat{\eta}_{jp} (g_{jp}^\dagger g_{jp} + h_{jp}^\dagger h_{jp}) + \hat{\eta}_{0p} g_{0p}^\dagger g_{0p} \quad (4.22)$$

$$f_{0p} = \Lambda^{-\frac{N-1}{4}} \left[\sum_{j=1}^{(N+1)/2} (\hat{\alpha}_{0jp}^+ g_{jp} + \hat{\alpha}_{0jp}^- h_{jp}^\dagger) + \hat{\alpha}_{00p}^+ g_{0p} \right], \quad (4.23)$$

para N par os valores assintóticos são:

$$\hat{\eta}_{jp} = \Lambda^{j-z_p+\frac{1}{2}\pm\delta/\pi} \quad (4.24)$$

$$\hat{\alpha}_{0jp}^\pm = \alpha_{0p}(k_F) \left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2} \right)^{1/2} (\hat{\eta}_{jp}^\pm)^{\frac{1}{2}} \cos \delta \quad (4.25)$$

Nestas expressões δ representa a defasagem sofrida pela banda de condução devido ao potencial de espalhamento K e é dada por:

$$\frac{1}{K} = \frac{\pi}{\ln \Lambda} \alpha_{0p}^2(k_F) \left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2} \right) [\cot \delta - \cot \delta_0], \quad (4.26)$$

onde δ_0 é a defasagem no limite de potencial infinito dada por:

$$\cot \pi \delta_0 = \frac{1}{\pi^2} A_\Lambda [2 \operatorname{Si}(\pi \Delta) - \operatorname{Si}(\pi(1+\Delta)) + \operatorname{Si}(\pi(1-\Delta))], \quad (4.27)$$

onde $A_\Lambda = [(\Lambda+1)/(\Lambda-1)] \log(\sqrt{\Lambda})$, que sempre aparece nos calculos do GRN e tende a unidade no limite de $\Lambda \rightarrow \infty$.

Um importante resultado desse Hamiltoniano é que as energias $\eta_{jp}^\pm(\tilde{K})$ e $\hat{\eta}_{jp}^\pm(\tilde{K})$ variam monotonicamente com $\tilde{K}$ como é mostrado nas Fig. B.1 e B.2 do Apêndice B. Portanto temos, na realidade, uma linha de pontos fixos de $\mathcal{T}^2$, ou seja, um ponto fixo para cada valor de $\tilde{K}$.

O valor de $\tilde{K}$ associado ao nosso problema depende dos parâmetros iniciais do modelo ($J, k_F R$ e Δ). Ele é determinado a partir dos resultados numéricos da seguinte forma: analisando as energias de muitos corpos obtida na diagonalização iterativa, para N ímpar

(Q,S,P,r)	estado	energia
$(1,1,0,\{2\}^1)$	$\begin{cases} g_{1e\mu}^\dagger \Omega\rangle \\ g_{2e\mu}^\dagger \Omega\rangle \end{cases}$	$\begin{cases} \eta_{1e}^+ \\ \eta_{2e}^+ \end{cases}$
$(1,1,1,\{2\}^1)$	$\begin{cases} g_{1o\mu}^\dagger \Omega\rangle \\ g_{2o\mu}^\dagger \Omega\rangle \end{cases}$	$\begin{cases} \eta_{1o}^+ \\ \eta_{2o}^+ \end{cases}$
$(0,2,1,1)$	$h_{0e\downarrow}^\dagger g_{0o\uparrow}^\dagger \Omega\rangle$	$\eta_{0e}^- + \eta_{0o}^+$
$(0,0,1,1)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(h_{0e\downarrow}^\dagger g_{0o\downarrow}^\dagger + h_{0e\uparrow}^\dagger g_{0o\uparrow}^\dagger) \Omega\rangle$	$\eta_{0e}^- + \eta_{0o}^+$
$(0,2,0,\{2\}^1)$	$\begin{cases} h_{0o\downarrow}^\dagger g_{0e\uparrow}^\dagger \Omega\rangle \\ h_{0e\downarrow}^\dagger g_{0e\uparrow}^\dagger \Omega\rangle \end{cases}$	$\begin{cases} \eta_{0e}^- + \eta_{0o}^+ \\ \eta_{0e}^- + \eta_{0e}^+ \end{cases}$

Tabela 4.1: Autoestados para o ponto fixo de elétrons livres com potencial de espalhamento. Estão listados alguns estados de muitos corpos, para iterações com N ímpar, representados pelos índices quânticos (Q,S,P,r) .

em particular, observamos que ela pode ser construída por níveis de energia dados pela expressão (4.20), com valores apropriados da defasagem δ para o canal par (δ_e) e para o canal ímpar (δ_o), como por exemplo, para os estados mostrados na Tab. 4.1.

Podem-se construir vários outros estados. Observe, em particular, que os estados (021) e (001) devem ser degenerados, o que não necessariamente é verdade para iterações intermediárias, ou seja, antes de atingir o ponto fixo. Portanto, comparando os resultados numéricos das energias de muitos corpos do processo iterativo, no limite de N grande, com as energias construídas a partir dos níveis de partículas independentes do ponto fixo podemos encontrar facilmente as defasagens δ_e e δ_o . Esta é a parte mais importante da determinação do ponto fixo pois as defasagens das bandas par e ímpar são, de fato, os parâmetros mais relevantes no entendimento das propriedades de baixas temperaturas.

Determinadas as fases podemos encontrar o valor do espalhamento $\tilde{K}_p$, que em princípio pode ser diferente entre banda par ou ímpar, por diagonalização sucessivas de $H_{Np}(\tilde{K})$ para diferentes $\tilde{K}$, até encontrar aquele que gerem as fases corretas. Isso é fundamental, pois permite se determinarem também os coeficientes da expansão dos f_{np} [Eq. (4.21)(4.25)] que serão usados nos cálculos das propriedades termodinâmicas para $T = 0$, como veremos a seguir.

4.2 Defasagens da banda de condução

Para estudar as propriedades de baixas temperaturas no regime antiferromagnético vamos fixar a distância das impurezas no primeiro mínimo da interação $RKKY$, isto é, $k_F R = \pi$. O objetivo é estudar a transição do regime Kondo para o regime $RKKY$, que no modelo *simétrico*, como discutimos, é caracterizado por um ponto fixo instável. No modelo *simétrico* as propriedades dependem apenas da razão $\frac{I}{k_B T_K}$, enquanto que em nosso modelo há uma dependência adicional na *assimetria* Δ definida no capítulo 2 pela Eq. (2.1).

Os deslocamentos de fase das bandas par e ímpar, calculadas a partir do espectro de energias do estado fundamental, conforme discutimos anteriormente, apresentam sinais contrários com o mesmo valor absoluto. Isto é compreendido através da relação entre a defasagem da banda de condução no nível de Fermi com o número de impurezas compensadas que é dado pela regra de soma de Friedel [59]

$$\delta(\varepsilon_F) = \frac{\pi}{2} n_{imp} \quad (4.28)$$

onde $\delta(\varepsilon_F) = \delta_e + \delta_o$ é a defasagem total, ou seja, a soma das fases dos canais de condução, e n_{imp} é o numero total das impurezas. Portanto, em nosso problema $\delta_e + \delta_o = \pi$. Como o deslocamento de fase é definido a menos de π , as fases das bandas par e ímpar são consequentemente simétricas $\delta_e = -\delta_o$ e vamos caracterizá-las apenas por um valor δ .

$$\delta_e = -\delta_o \equiv \delta \quad (4.29)$$

Na Fig. 4.1 mostramos a defasagem em função da razão $\frac{I}{k_B T_K}$ para diferentes valores da *assimetria* Δ . Os principais resultados que podemos extrair destes gráficos são os seguintes:

- (i) A transição de regime antiferromagnético forte ($\frac{I}{k_B T_K} \gg 1$) para o regime Kondo ($\frac{I}{k_B T_K} \rightarrow 0$) é suave com a fase crescendo de zero para um valor máximo (δ_0), observado

Figura 4.1: Defasagem δ da banda de condução no nível Fermi em função de $I/k_B T_K$ para três valores de Δ . As bandas de condução par e ímpar têm defasagens simétricas ($\delta_e = -\delta_o = \delta$). As defasagens variam continuamente de zero (no regime Kondo) para um valor máximo δ_0 [Eq. (4.26)] indicado no gráfico por flechas. No limite de $\Delta \rightarrow 0$, a defasagem δ_0 tende a $\frac{\pi}{2}$ e a curva se aproxima de uma função degrau.

nos patamares das curvas. Esse comportamento contrasta com o caso *simétrico*, que como já discutimos, apresenta uma transição abrupta com uma descontinuidade para $I \sim k_B T_K$.

(ii) O comportamento depende fortemente da *assimetria* Δ . Com a diminuição de Δ o valor limite da fase no regime Kondo (δ_0) aumenta, a transição torna-se abrupta e aproxima-se da função degrau no limite de $\Delta \rightarrow 0$.

(iii) A valor assintótico da fase limite no regime Kondo(δ_0) obtido numericamente pode, também, ser calculado analiticamente. Esse limite corresponde ao máximo de acoplamento das impurezas com a banda de condução ($J \rightarrow \infty$) e pode ser obtido a partir da expressão (4.26) tomando a constante de espalhamento $K \rightarrow \infty$. Portanto a fase (δ_0) calculada analiticamente é dada pela expressão (4.27) e seus valores são indicados no gráfico pelas flechas. Observe que os resultados da curva numérica tendem exatamente para esses valores.

(iv) No limite de $\Delta \rightarrow 0$ a defasagem δ_0 se aproxima do valor $\frac{\pi}{2}$ e a curva tende a uma função degrau, que são os resultados encontrados no caso *simétrico*.

Portanto, enquanto que no modelo *simétrico* o estado fundamental é caracterizado por dois pontos fixos estáveis separados por um ponto fixo instável, nosso modelo apresenta uma linha de pontos fixos estáveis caracterizadas por uma fase δ , dependente da separação das impurezas R e da *assimetria* Δ , e que varia de zero, no regime antiferromagnético forte, para um valor limite δ_0 no regime Kondo.

Nossos resultados são os primeiros a prever uma fase diferente de $\frac{\pi}{2}$ no limite Kondo de acoplamento forte ($\frac{I}{k_B T_K} \rightarrow 0$) e mostrar a sua dependência com o parâmetro Δ . A defasagem da banda de condução no modelo Kondo é, portanto, bem diferente do quadro descrito pelos estudos que utilizaram aproximação ECC, isto é, trabalharam com Hamiltonianos *simétricos*.

Esses resultados são particularmente importantes para propriedades, como por exemplo a densidade espectral a baixas energias, que dependem do valor da fase no nível

de Fermi [50], uma vez que este valor pode ser encontrado diretamente dos parâmetros do modelo através da expressão analítica por nós obtida.

4.3 Susceptibilidade e o coeficiente do calor específico a T=0

Conforme discutimos no início deste capítulo, a região de baixas temperaturas ($T \rightarrow 0$) corresponde a região de N grande na qual o Hamiltoniano H_N está próximo do ponto fixo de elétrons livres com potencial de espalhamento $H_N(\tilde{K})$. As propriedades de baixas temperaturas podem ser derivadas usando um Hamiltoniano efetivo, construído em torno do ponto fixo, que é a soma de $H_N(\tilde{K})$ com uma perturbação composta por seis outros operadores. A perturbação é proporcional aos coeficientes $t_e, t_o, U_e, U_o, U_{eo}$ e J_{eo} , definidos no apêndice C, que são obtidos a partir dos níveis de energias gerados pela diagonalização iterativa. Uma vez determinados esses coeficientes as propriedades termodinâmicas, tais como susceptibilidade e calor específico, podem ser deduzidas analiticamente. Todos os detalhes relativos à determinação do Hamiltoniano efetivo, cálculo dos coeficientes e a obtenção das quantidades termodinâmicas, são apresentadas naquele apêndice.

Para a susceptibilidade encontramos a seguinte expressão

$$\frac{\chi_{imp}(0)}{\frac{(2\mu_B)^2}{D}} = \sum_{p=e,o} -\frac{t_p \alpha_{0p}^2(k_F) \cos^2(\delta)}{2A_\Lambda} + \sum_{p=e,o} [U_p \alpha_{0p}^4(k_F) - 2J_{eo} \alpha_{0e}^2(k_F) \alpha_{0o}^2(k_F)] \frac{(1 + \Lambda^{-1})}{8A_\Lambda^2} \cos^4(\delta), \quad (4.30)$$

enquanto que o coeficiente linear do calor específico é dado por

$$C_{imp} = \gamma_{imp} T; \quad \frac{\gamma_{imp}}{\frac{4\pi^2}{3} \frac{k_B}{D}} = \sum_{p=e,o} -\frac{t_p \alpha_{0p}^2(k_F) \cos^2(\delta)}{2A_\Lambda}, \quad (4.31)$$

onde δ é a defasagem da banda de condução que discutimos acima.

Na Fig. 4.2 mostramos os resultados para a susceptibilidade magnética a temperatura zero em função da razão $\frac{I}{k_B T_K}$ para diferentes valores da *assimetria* Δ . Na Fig. 4.3

mostramos os gráficos análogos para o coeficiente linear do calor específico. Observamos que estas propriedades se comportam de maneira semelhante e vamos discutí-las em paralelo.

Figura 4.2: Susceptibilidade magnética das impurezas χ_{imp} a $T = 0$ para diferentes valores da assimetria Δ . χ_{imp} varia continuamente em função de $\ln(\frac{I}{k_B T_K})$ e apresenta um pico que aumenta com Δ , porém, ele nunca é divergente.

As figuras mostram que essas propriedades variam continuamente com a razão $\frac{I}{k_B T_K}$ com valores finitos em toda a região paramétrica. As curvas apresentam um pico na região de transição ($I \sim k_B T_K$) entre o regime Kondo e o RKKY, porém não apresentam divergências. No caso simétrico, como discutimos no capítulo 1 (ver Fig. 1.3), o coeficiente do calor específico é divergente, e nossos resultados mostram, portanto, que essa divergência é um artefato da aproximação ECC e não uma propriedade intrínseca do modelo Kondo de duas impurezas.

Os resultados são, assim como a defasagem, dependentes fortemente da *assimetria* Δ . As curvas tornam-se estreitas e o pico cresce rapidamente quando Δ vai a zero. O pico

de γ_{imp} , por exemplo, varia de quatro ordens de magnitude quando Δ muda de 1 para $\frac{1}{8}$. Poderia isso indicar uma divergência em alguma dessas propriedades no limite $\Delta \rightarrow 0$? Essa questão será analisada no decorrer deste capítulo.

Para a região Kondo ($I \ll k_B T_K$), que corresponde ao patamar $\delta \simeq \delta_0$, podemos entender nossos resultados comparando-os com os do modelo Kondo de uma impureza ($\delta = \frac{\pi}{2}$) [4, 17] para os quais a susceptibilidade e o coeficiente linear do calor específico são dados por

$$\begin{cases} \chi_{1imp}(0) = \frac{0.103}{k_B T_K} \\ \frac{\gamma_{1imp}}{k_B} = \frac{2\pi^2}{3} \frac{0.103}{T_K} \end{cases} \quad (1 \text{ impureza}).$$

Desta forma, devemos esperar χ e γ proporcionais a $\frac{1}{T_K}$. Observa-se dos resultados, porém, que esses valores dependem adicionalmente da *assimetria* Δ (ou equivalentemente da fase δ_0). À medida que Δ decresce, χ e γ aumentam, e os dados numéricos mostram, de fato, que eles são diretamente proporcionais a δ_0 . Desta forma teremos para essas propriedades

Figura 4.3: Coeficiente linear do calor específico das impurezas γ_{imp} para $T = 0$. γ_{imp} varia continuamente com $\frac{I}{k_B T_K}$ e apresenta um pico que aumenta rapidamente quando Δ cresce. No limite $\Delta \rightarrow 0$ o calor específico diverge.

que

Regime Kondo (4.32)

$$\begin{cases} \chi_{2imp}(0) \propto \frac{\delta_0}{T_K} \\ \frac{\gamma_{2imp}}{k_B} \propto \frac{\delta_0}{T_K} \end{cases} \quad (2 \text{ impurezas}).$$

com a constante de proporcionalidade sendo dependente da assimetria. Portanto, na região Kondo o modelo convencional apresenta um comportamento análogo ao do modelo Kondo de uma impureza mas com um parâmetro adicional, que é a proporcionalidade com defasagem limite (δ_0) da banda de condução.

No regime RKKY ($I \gg k_B T_K$), que corresponde ao patamar $\delta \simeq 0$, as contribuições dominantes devem ser de mecanismos do tipo Van-Vleck, ou seja, excitações virtuais do estado fundamental singleto para os tripletos. Essa contribuição, para a susceptibilidade, é dada pela Eq. (3.21) e foi detalhadamente discutida no capítulo 3. Para o coeficiente linear do calor específico o cálculo perturbativo é semelhante, e temos a mesma dependência em I e T_K . Nossos resultados mostram que o decaimento das duas propriedades com o aumento da interação RKKY pode ter exatamente este comportamento e são dados por

Regime RKKY (4.33)

$$\begin{cases} \chi_{imp}(0) \propto \frac{1}{I \log^2(\frac{\eta_\chi I}{k_B T_K})} \\ \gamma_{imp} \propto \frac{1}{I \log^2(\frac{\eta_\gamma I}{k_B T_K})} \end{cases} \quad (2 \text{ impurezas}).$$

Cada uma das curvas nas Fig. 4.2 e 4.3, na região RKKY, são bem descritas por essas funções com valores apropriados de η_χ e η_γ que, assim como a constante de proporcionalidade, são dependentes do valor da assimetria Δ . Voltaremos a esse assunto nas discussões seguintes onde será feita análise quantitativa desse regime.

A região de transição ($I \sim k_B T_K$) separa os dois regimes assintóticos de comportamentos distintos. No regime Kondo χ e γ são crescentes com $\frac{I}{k_B T_K}$ enquanto

que no regime *RKKY* essas propriedades são decrescentes; portanto, o pico das funções nessa região reflete essa mudança de comportamento.

4.4 Universalidade no regime antiferromagnético

Com a descrição qualitativa para toda região do espaço paramétrico fizemos um estudo quantitativo mais detalhado e encontramos um comportamento universal para a susceptibilidade magnética e para o coeficiente linear do calor específico em $T = 0$. A universalidade nesse contexto significa que, com escalas apropriadas em ambos eixos dos gráficos, as curvas para diferentes valores da assimetria Δ são reduzidas a uma única curva.

4.4.1 Susceptibilidade

Para descrever o comportamento universal da susceptibilidade vamos mostrar a susceptibilidade $\chi(0)$ multiplicada pelo fator $(0.1/\delta_0)T_K + I$ e dividida por uma normalização N_χ , como função de $\log(\alpha_\chi I/k_B T_K)$ dividido pela normalização w_χ . As constantes de escala N_χ , α_χ e w_χ tem valores diferentes para cada assimetria Δ e, juntamente com outros parâmetros relevantes do modelo, estão descritas na Tabela 4.2. Portanto teremos para a curva universal os seguintes eixos normalizados

$$\begin{cases} x = \frac{\log(\frac{\alpha_\chi I}{k_B T_K})}{w_\chi} \\ y = \frac{(\frac{0.1}{\delta_0})k_B T_K + I}{N_\chi} \chi(0) \end{cases} \quad (\text{Susceptibilidade}). \quad (4.34)$$

O gráfico, para susceptibilidade, é mostrado na Fig. 4.4. Podemos observar que em toda a região paramétrica as curvas para os diferentes valores de Δ são indistinguíveis.

As regiões assintóticas do modelo podem ser analisadas a partir da curva universal. No regime Kondo ($I \ll k_B T_K$) a curva tende a uma constante. Neste regime podemos desprezar I na abscissa da Eq. (4.34), ou seja, $y \equiv \frac{(\frac{0.1}{\delta_0})k_B T_K}{N_\chi} \chi(0) \simeq 0.1$ que é da forma

Δ	$\frac{\delta_0}{\pi}$	$\frac{ID}{T^2}$	α_χ	w_χ	N_χ	α_γ	w_γ	N_γ
1	0.345	0.073	-0.27	3.0	0.026	0.42	8.9	0.024
1/2	0.381	0.039	-0.11	2.1	0.052	0.49	5.1	0.066
1/4	0.432	0.010	-0.05	1.6	0.089	0.52	2.6	0.225
1/6	0.453	0.003	0.01	1.4	0.110	0.55	1.7	0.479
1/8	0.464	0.001	0.03	1.4	0.116	0.55	1.3	0.817

Tabela 4.2: Parâmetros de escala das curvas universais. A interação RKKY é obtida pela expressão perturbativa 3.3. As fases limites do regime Kondo (δ_0) são dadas pela eq. 4.21 e tende a $\pi/2$ quando a assimetria $\Delta \rightarrow 0$. Neste limite a normalização do calor específico N_γ diverge enquanto que a normalização da susceptibilidade N_χ permanece finita.

(4.32). N_χ , neste limite, basicamente mostra como a proporcionalidade da Eq. (4.32) muda com Δ .

Figura 4.4: Curva universal da susceptibilidade como função da razão $\frac{I}{k_B T_K}$. Com apropriada normalização dos eixos as curvas para diferentes Δ são indistinguíveis. No regime Kondo ($I \ll k_B T_K$) a susceptibilidade escalada tende a uma constante proporcional a $\frac{k_B T_K}{\delta_0}$. No regime RKKY a curva se ajusta bem à linha sólida que descreve o mecanismo Van-Vleck (Eq.4.33).

No Regime RKKY ($I \gg k_B T_K$) a abscissa da Eq. (4.34) é aproximadamente y

$\equiv \frac{I}{N_\chi} \chi(0)$ e deve ter um comportamento descrito pela Eq. (4.33). De fato, nesta região, a curva universal é bem descrita pela função

$$y = \frac{1.2}{(1+x)^2} \quad (4.35)$$

que está mostrada na Fig. 4.4 por uma linha sólida. Esta função é a contribuição para a susceptibilidade do tipo Van-Vleck dada por $\chi_{imp}(0) = \frac{A_\chi}{I \log^2(\frac{\eta_\chi I}{k_B T_K})}$, com as relações apropriadas entre (A_χ, η_χ) e $(\delta_0, N_\chi, w_\chi, \alpha_\chi)$. Observe que a expressão (4.35) descreve muito bem a susceptibilidade em praticamente toda a região de $I > k_B T_K$, sendo que um desvio mínimo só acontece quando $I \sim k_B T_K$. Essa análise confirma a nossa interpretação de que o mecanismo dominante na região antiferromagnética são as excitações virtuais singleto-triplete ou seja, o mecanismo de Van-Vleck.

A constante de normalização N_χ determina a altura do pico da susceptibilidade e é de particular importância conhecer como ela varia com a assimetria. Na Fig. 4.5

Figura 4.5: Inverso do fator de normalização da susceptibilidade N_χ em função da defasagem limite da banda de condução. N_χ permanece finito quando $\Delta \rightarrow 0$ ($\delta_0 = \frac{\pi}{2}$) indicando que a susceptibilidade magnética nunca é divergente.

mostramos o gráfico de $\frac{1}{N_x}$ em função da defasagem δ_0 da banda de condução. Quando a fase aumenta o parâmetro $\frac{1}{N_x}$ diminui mas permanece finito quando $\delta_0 \rightarrow \frac{\pi}{2}$. Portanto, o pico da susceptibilidade aumenta continuamente com o decréscimo da assimetria, mas nunca é divergente mesmo para $\Delta \rightarrow 0$ ($\delta_0 \rightarrow \frac{\pi}{2}$).

4.4.2 Coeficiente linear do calor específico

A descrição do comportamento universal para o coeficiente linear calor específico é análogo ao da susceptibilidade. Teremos, portanto, para o calor específico a curva universal, com os seguintes eixos normalizados

$$\begin{cases} x = \frac{\log(\frac{\alpha_\gamma I}{k_B T_K})}{w_\gamma} \\ y = \frac{(\frac{0.1}{\delta_0}) k_B T_K + I}{N_\gamma} \gamma \end{cases} \quad \text{Calor específico,} \quad (4.36)$$

cujo gráfico é mostrado na Fig. 4.6 para cinco assimetrias diferentes. As constantes de escala N_γ , α_γ e w_γ estão escritas na Tab. (4.2) e são variáveis com a assimetria Δ . De forma análoga à susceptibilidade, as curvas para os diferentes valores de Δ são reduzida a uma única curva.

As análises desta curva universal segue a mesma linha descrita no caso da susceptibilidade. No Regime *RKKY* ($I \gg k_B T_K$) a física é dominada por mecanismos tipo Van-Vleck e a curva universal é bem descrita pela função

$$y = \frac{0.15}{(1+x)^2} \quad (4.37)$$

que está mostrada na Fig. 4.6 por uma linha sólida. Ao contrário da susceptibilidade, a descrição de γ pela expressão perturbativa (4.37) só é válida na região de acoplamento antiferromagnético forte. Quando a curva se aproxima da região de transição ($I \approx k_B T_K$) o calor específico cresce rapidamente e se desvia da curva sólida conforme podemos observar do gráfico. Como seria de se esperar, o calor específico mostra mais sensibilidade a flutuações antiferromagnéticas que a susceptibilidade.

Figura 4.6: Curva universal para o coeficiente linear do calor específico. Os parâmetros de escalas dos eixos (dados na Tab. 4.2) reduzem as curvas com diferentes Δ a uma única curva. No regime Kondo C/T cresce proporcional a $1/T_K$. No regime *RKKY* a curva é bem ajustada pela linha sólida que descreve os mecanismos de Van-Vleck. Na transição ($I \approx k_B T_K$) o calor específico se desvia rapidamente da expressão perturbativa (Eq. 4.33).

Figura 4.7: Inverso do fator de normalização do calor específico N_γ em função da defasagem limite da banda de condução. N_γ tende a infinito no limite $\Delta \rightarrow 0$ ($\delta_0 = \frac{\pi}{2}$). Portanto, o coeficiente linear do calor específico diverge para $I \approx 2k_B T_K$.

A altura do pico do coeficiente linear do calor específico, determinado pela constante de normalização N_γ , mostra um comportamento que é muito importante no nosso estudo. Na Fig. 4.7 mostramos o gráfico de $\frac{1}{N_\gamma}$ em função da defasagem δ_0 da banda de condução. Com o aumento da fase o parâmetro $\frac{1}{N_\gamma}$ diminui e, ao contrário da susceptibilidade, vai a zero quando $\delta_0 \rightarrow \frac{\pi}{2}$. Portanto, o pico de γ , que ocorre para $I \approx 2k_B T_K$, aumenta continuamente com o decréscimo da assimetria Δ e **diverge** quando $\Delta \rightarrow 0$ mostrando que esse ponto apresenta um comportamento não regular dessa propriedade.

4.5 Discussão

Nossos resultados para o modelo Kondo de duas impurezas *convencional* mostram que o deslocamento fase da banda de condução tem um valor bem definido e que as propriedades calculadas são finitas em toda a região do espaço paramétrico. Assim, o modelo *assimétrico* tem sempre um comportamento tipo líquido de Fermi. As propriedades termodinâmicas calculadas neste trabalho — a susceptibilidade e o coeficiente do calor específico a $T = 0$ — tem um comportamento universal pela primeira vez relatado para este modelo.

No limite particular $\Delta \rightarrow 0$ o modelo *convencional* tem propriedades do estado fundamental que se assemelham às do modelo *simétrico*, isto é: (i) a defasagem da banda de condução se aproxima de uma função degrau, com a defasagem no limite Kondo $\delta_0 \rightarrow \frac{\pi}{2}$ e uma descontinuidade para $I \approx 2k_B T_K$, (ii) a susceptibilidade é regular e (iii) coeficiente linear do calor específico é divergente para o ponto correspondente à descontinuidade da fase cujas propriedades é de líquido não de Fermi. É importante notar que este limite não corresponde a uma situação física real, isto é, não tem sentido o valor $\Delta = 0$. Vemos, no entanto, que a aproximação ECC ($k = k_F$) pode ser razoável para Δ pequenos.

Apesar dos Hamiltonianos *simétrico* e *assimétrico* apresentarem propriedades semelhantes no limite $\Delta \rightarrow 0$, eles nunca são equivalentes. O modelo *simétrico*, discutido

no capítulo 2, tem um ponto crítico devido a uma regra de seleção que proíbe a mistura dos subespaços singlete e tripleto. No modelo *convencional* por outro lado, existem dois fatores a serem considerados. Primeiro, a interação antiferromagnética I é sempre gerada naturalmente no modelo, ao contrário do que acontece no modelo *simétrico*. Essa interação desloca a energia do estado fundamental do subespaço singlete em relação à do tripleto; essa separação, proporcional a J^2 , é pequena para $J \rightarrow 0$, comparada com o termo de acoplamento entre os dois subespaços, proporcional a $J \cdot (\vec{S}_1 - \vec{S}_2)$ (Eq. 2.26). Se houvesse regra de seleção — como existe no modelo simétrico — proibindo acoplamento entre os dois estados fundamentais, o termo proporcional a $J \cdot (\vec{S}_1 - \vec{S}_2)$ poderia mesmo assim ser desprezado.

No modelo convencional, no entanto, a defasagem do estado fundamental não está presa aos valores 0 e $\frac{\pi}{2}$. Ela pode variar continuamente entre esses dois extremos, o que mostra que não existe a regra de seleção. Para entender melhor esta questão, convém discutir o efeito da *assimetria* Δ . A *assimetria* separa os orbitais $f_{0e,o}$ por uma energia cinética, da ordem de $\pm D\Delta$, dada pelos coeficientes ε_{op} (Eq.2.46). Essa contribuição gera um termo $\varepsilon_0 f_0^\dagger f_0$ no Hamiltoniano, que é semelhante a um potencial de espalhamento e cujo efeito, de acordo com a regra de soma de Friedel, é defasar os estados de condução (o valor da defasagem depende do potencial espalhador) [60,61]. Portanto, esse efeito compete com a interação *RKKY*, que é proporcional a Δ^2 . No limite $\Delta \rightarrow 0$, ε_{op} é sempre maior que I e a regra de seleção é violada.

Capítulo 5

Conclusões

Neste trabalho discutimos as propriedades termodinâmicas do modelo *convencional* de Kondo com duas impurezas, ou seja, preservando todas as suas *simetrias* originais. Calculamos a susceptibilidade magnética em função da temperatura $\chi(T)$ para diferentes valores da distância entre as impurezas. Obtivemos, também, o coeficiente linear do calor específico γ e a defasagem da banda de condução δ para $T = 0$.

Como ferramenta, utilizamos o grupo de renormalização numérico (GRN), que é uma técnica essencialmente exata e possibilita atingir temperaturas arbitrariamente baixas. No entanto, para o modelo Kondo *convencional*, que não apresenta *simetria* partícula-buraco, o GRN tradicional não se aplica. Desenvolvemos, então, uma extensão do método que possibilitou o estudo do modelo sem a necessidade de nenhuma aproximação adicional. Nossa contribuição foi encontrar uma forma simples de se determinarem os coeficientes codiagonais t_n e diagonais ε_n , da banda de condução tridiagonal, para Hamiltonianos quaisquer. Esta extensão possibilita a aplicação do GRN à nova classe de problemas fora do alcance do método original.

As propriedades do estado fundamental ($T = 0$), no regime antiferromagnético, distinguem o modelo *simétrico* do *assimétrico*. O modelo *simétrico* é caracterizado por um ponto crítico instável, com propriedades de líquido não de Fermi, separando o regime Kondo do regime *RKKY*. No ponto crítico o coeficiente linear do calor específico

é divergente e a defasagem da banda de condução muda descontinuamente de 0 para $\frac{\pi}{2}$. Além disso as propriedades do modelo *simétrico* dependem apenas da razão $\frac{I}{k_B T_K}$.

Nosso estudo mostra que, no modelo *assimétrico*, as propriedades dependem adicionalmente da assimetria $\Delta = \frac{D}{v_F k_F}$. Mostramos que as defasagens da banda de condução par e ímpar são simétricas ($\delta_e = -\delta_o$) e variam suavemente (ao contrário do que acontece no modelo *simétrico*) de zero, no limite antiferromagnético forte, para um valor máximo $\delta_0 < \frac{\pi}{2}$, no regime Kondo. O valor de δ_0 depende de Δ e pode ser encontrado analiticamente pela expressão (4.27). No limite $\Delta \rightarrow 0$ a defasagem $\delta_0 \rightarrow \pi/2$ aproxima-se da função degrau, típica dos modelos *simétricos*.

O coeficiente linear do calor específico γ e a susceptibilidade $\chi(T = 0)$ variam continuamente com a razão $I/k_B T_K$ e podem ser descritos por curvas universais parametrizadas pela *assimetria* Δ . No limite Kondo, γ e χ são proporcionais a $\frac{\delta_0}{T_K}$ e, no outro extremo, (regime antiferromagnético) são bem ajustados pelas curvas de Van-Vleck. Ambas as curvas apresentam um pico no regime de transição ($I \approx k_B T_K$). Esse pico aumenta continuamente com o decréscimo da *assimetria*, porém enquanto a susceptibilidade é sempre finita, o calor específico diverge no limite $\Delta \rightarrow 0$.

Nossos resultados para o estado fundamental, resumidos acima, confirmam que a *assimetria* partícula-buraco elimina o ponto crítico obtido em trabalhos anteriores e a transição do regime Kondo para o antiferromagnético é suave e pode ser descrita por líquido de Fermi. Apenas no limite especial de $\Delta \rightarrow 0$ é que o comportamento crítico emerge e o modelo *convencional* se assemelha ao *simétrico*, apesar de nunca serem equivalentes, conforme discutimos no final do capítulo 4.

Calculamos $\chi(T)$ para diferentes valores da separação R , correspondendo aos vários regimes característicos do sistema: Kondo, antiferromagnético e ferromagnético. Estes são os primeiros gráficos essencialmente exatos em todo o intervalo de temperatura para o modelo *convencional*. Para o modelo *simétrico* essa propriedade foi recentemente

calculada por Silva [11]. Seus resultados são qualitativamente equivalentes aos nossos. Ambos os modelos mostram a competição entre as duas escalas de energias características do sistema: a temperatura Kondo (T_K) e a interação $RKKY$ entre as impurezas (I) consolidando a descrição qualitativa obtida por Jayprakash et al. [5] pela técnica do *scaling* perturbativo. No regime ferromagnético forte o momento magnético das impurezas é compensado por um efeito Kondo de dois estágios. Neste caso há duas energias de Kondo características, associada a cada um dos canais de condução. No regime antiferromagnético forte os momentos se acoplam num singleto, numa temperatura bem maior que T_K , e o efeito Kondo praticamente não existe.

Nossos resultados para $\chi(T)$ a baixas temperaturas no regime antiferromagnético, por outro lado, apresentam características que praticamente ainda não tinham sido exploradas. Neste regime a susceptibilidade tende a uma constante χ_0 e é dominada por excitações virtuais do estado fundamental singleto para o tripleto — susceptibilidade de Van-Vleck. Mostramos que essa contribuição ($\chi_0 \sim \frac{1}{I \log \frac{\eta I}{k_B T_K}}$) pode ser calculada usando uma combinação da teoria de perturbação com o formalismo do *scaling* perturbativo. Esse efeito só é visto a temperaturas muito baixas e somente métodos como o GRN podem descrever quantitativamente resultados como esse.

Portanto, nosso trabalho traz uma visão unificada do modelo Kondo de duas impurezas. Confirmamos quantitativamente o quadro descrito pelo *scaling* perturbativo. Mostramos que o ponto crítico obtido por Jones não aparece no modelo *convencional* (para este modelo o ponto crítico é, realmente, um artefato da aproximação ECC). Concordamos, porém, com os argumentos gerais de *simetria* [8] ao mostrar que o comportamento crítico emerge no limite de $\Delta \rightarrow 0$. Além disso obtivemos descrições ainda não relatadas na literatura, como a contribuição de Van-Vleck e o comportamento universal no regime antiferromagnético.

Na sequência deste trabalho pretendemos efetuar o cálculo do calor específico em

função da temperatura $C(T)$ no modelo *convencional*. Como vimos, $\chi(T)$ não permite distinguir qualitativamente os dois modelos, o que não surpreende, já que $\chi(T = 0)$, insensível a flutuações antiferromagnéticas, não diverge no modelo simétrico. Por outro lado, enquanto que no modelo *simétrico* γ apresenta divergência para $(I \sim k_B T_K)$ ele é finito no modelo *assimétrico*. Portanto esperamos que $C(T)$, a baixas temperaturas, seja qualitativamente bem diferente nos dois modelos e possa trazer informações adicionais para o problema. O cálculo de $\chi(T)$ é um pouco mais difícil pois envolve médias da energia ao quadrado (E^2) sendo necessário considerar energias limites bem maiores no processo de truncamento (para a susceptibilidade temos $E_{\max} = 20$ enquanto que para o calor específico devemos ter $E_{\max} = 25$) exigindo, dessa forma, maior esforço computacional. Outra dificuldade é que as oscilações originárias da discretização são mais intensas no calor específico que na susceptibilidade. Portanto, conforme recente cálculo do calor específico no modelo de uma impureza [53], o processo de integração em z , para $\Lambda = 10$, deve ser feito como média aritmética de quatro valores de z , ao contrário da susceptibilidade, em que dois valores de z já são suficientes.

Outra linha de ação é estudar Hamiltonianos mais complexos, com relações de dispersão e densidade de estados arbitrárias, possibilidades que se tornaram viáveis com o nosso procedimento generalizado de tridiagonalização. Uma aplicação imediata que pretendemos implementar é o estudo do deslocamento *Knigh* no modelo Kondo [62]. Esta e outras propriedades, tais como correlações entre dois spins, que dependam de estados (esféricos) da banda de condução separadas por uma distância R são, agora, possíveis de serem calculadas exatamente pelo GRN.

Outra questão que desperta interesse é a formulação matemática da tridiagonalização. Infelizmente, nosso procedimento não é estável para calcular os coeficientes t_n e ε_n com n grande, ao contrário do método alternativo de Chen e Jayapraksh [55]. No problema descrito neste trabalho, essa limitação não foi séria, porque conseguimos encontrar formas

assintóticas para $n \gg 1$. Em geral, no entanto, a instabilidade é indesejável porque poderá prejudicar o cálculo dos coeficientes tridiagonais e diagonais para outros modelos. Um estudo interessante, então, é procurar desenvolver uma transformação que combine a simplicidade do nosso procedimento com a estabilidade do outro.

Para finalizar gostaríamos de dizer que esse trabalho é resultado de um esforço de longa data do nosso grupo. Ele combina as ferramentas do método *intercalado*, desenvolvido nas teses de mestrado e doutorado de Mello [63] (que implantou o processo de diagonalização do Hamiltoniano de Falicov-Kimball com diferentes $z's$), Oliveira [52] (que desenvolve o cálculo das propriedades termodinâmicas, como médias em diferentes $z's$, e o aplica na obtenção de $\chi(T)$ do modelo de Falicov-Kimball de duas impurezas) e Silva [11] (que aplica o método para calcular $\chi(T)$ do modelo Kondo de duas impurezas *simétrico*), com o processo de tridiagonalização mostrado nesta tese. Uma parte de nossos resultados estão compilados num artigo já publicado [64]. Submeteremos, em breve, para publicação um novo trabalho, no qual a parte do método que desenvolvemos será explicitada.

Apêndice A

Tridiagonalização da banda de condução

Este apêndice discute a tridiagonalização da banda de condução para o caso geral.

Considere uma banda de condução, numa base discreta dada por:

$$H_{BC} = \sum_{m=1}^M E_m a_m^\dagger a_m, \quad (\text{A.1})$$

onde os operadores a_m ($m = 1, \dots, M$) são operadores de férmions com relações de anticomutações padrões. As energias E_m são arbitrárias, porém devem ser não degeneradas.

Considere que a impureza (ou outro centro espalhador) esteja acoplado à banda de condução pelo operador f_0 que é essencialmente o operador de campo no sítio da impureza.

Seja então o operador f_0 descrito na base a_m dado por:

$$f_0 = \sum_{m=1}^M \alpha_m a_m. \quad (\text{A.2})$$

Os coeficientes α_m devem ser todos diferentes de zero e o operador f_0 deve ser normalizado, $\sum_m \alpha_m^2 = 1$. No caso particular em que algum valor de $\alpha_m = 0$ basta desacoplar os elementos associados a este particular valor de m na Eq. (A.1) e efetuar normalmente o procedimento.

O nosso objetivo é fazer uma transformação na banda de condução de uma base diagonal $a_m (m = 1, \dots, M)$ para uma nova base $f_n (n = 0, \dots, M-1)$ na forma tridiagonal

$$H_{BC} = \sum_{n=0}^{M-2} \left[\varepsilon_n f_n^\dagger f_n + t_n \left(f_n^\dagger f_{(n+1)} + f_{(n+1)}^\dagger f_n \right) \right] + \varepsilon_{M-1} f_{(M-1)}^\dagger f_{(M-1)}, \quad (\text{A.3})$$

onde o operador f_0 é dado por (A.2). O conjunto dos novos M operadores f_n forma uma base ortonormal completa e deve ser relacionado aos M operadores a_m por uma transformação unitária. Inicialmente somente o operador f_0 está definido, isto é, em princípio deveríamos encontrar os $M-1$ operadores $f_n (n = 1, \dots, M-1)$ remanescentes e todos os coeficientes diagonais $\varepsilon_n (n = 0, \dots, M-1)$ e codiagonais $t_n (n = 0, \dots, M-2)$. Na prática, contudo, somente os coeficientes necessitam ser determinados. Discutiremos abaixo todo o formalismo necessário para a determinação desses coeficientes e uma forma prática para seu cálculo numérico. As transformações para os operadores f_n , embora possam ser derivadas, não serão discutidas.

Para determinarmos ambos os conjuntos de coeficientes usaremos o formalismo das quadraturas Gaussianas. Inicialmente vamos discutir o formalismo e como podemos usá-lo para obter os coeficientes. Em seguida mostraremos uma forma prática e bem simples para obtenção dos mesmos. Caso o leitor esteja interessado apenas nas relações que determinam os coeficientes ε_n e t_n , sem se importar com a derivação dessas relações, poderá passar diretamente para a seção A.4.

A.1 Procedimento Formal das Quadraturas Gaussianas

O formalismo das quadraturas Gaussianas [65] é um método matemático usado para resolver numericamente uma certa classe de integrais. O método é baseado na definição de um produto interno e é bem parecido com a teoria de polinômios ortogonais. Definimos

produto escalar de duas funções f e g , definidas no domínio de energia, sobre uma função peso W como

$$\langle f|g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} W(\epsilon) f(\epsilon) g(\epsilon) d\epsilon \quad (\text{A.4})$$

onde a função peso $W(\epsilon)$, deve ser normalizada

$$\int_{-\infty}^{\infty} W(\epsilon) d\epsilon = 1. \quad (\text{A.5})$$

Um conjunto de funções é chamado *ortonormal* se o produto escalar entre funções diferentes for zero (*funções ortogonais*) e o produto escalar de uma função com ela mesma for a unidade (*funções normalizadas*).

É possível encontrar um conjunto de funções polinomiais (i) que inclui exatamente um polinômio de ordem j , chamado p_j , para cada $j = 0, 1, \dots$, e (ii) todos sejam exatamente ortogonais sobre uma especificada função peso $W(\epsilon)$. Um procedimento para encontrar este conjunto é a relação de recorrência

$$\begin{aligned} p_0(\epsilon) &= 1 \\ p_{i+1}(\epsilon) &= \left[\epsilon - \frac{\langle \epsilon p_i | p_i \rangle}{\langle p_i | p_i \rangle} \right] p_i(\epsilon) - \left[\frac{\langle p_i | p_i \rangle}{\langle p_{i-1} | p_{i-1} \rangle} \right] p_{i-1}(\epsilon) \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

juntamente com a regra que o segundo termo da equação anterior é omitido para $i = 0$ ou seja, não há p_{-1} .

A.2 Quadratura Gaussiana e banda de condução tridiagonal

Para aplicar o formalismo das quadraturas Gaussianas, resumidamente abordado acima, na transformação unitária da banda de condução são necessários algumas considerações.

Vamos inicialmente definir um Hamiltoniano truncado

$$H_N = \sum_{n=0}^{N-2} \left[\varepsilon_n f_n^\dagger f_n + t_n \left(f_n^\dagger f_{(n+1)} + f_{(n+1)}^\dagger f_n \right) \right] + \varepsilon_{N-1} f_{(N-1)}^\dagger f_{(N-1)} \quad (1 \leq N \leq M) \quad (\text{A.7})$$

que para o caso particular $N = M$ deve coincidir com a banda de condução tridiagonal A.3.

Para todos os valores de N , o Hamiltoniano H_N é quadrático e pode ser representado por uma matriz $\mathcal{H}_N$ ($N \times N$), com seus elementos diagonais dados por ε_n ($n = 0, \dots, N-1$) e os codiagonais por t_n ($n = 0, \dots, N-2$). A relação padrão entre a matriz e o Hamiltoniano é dada por

$$H_N = \sum_{i,j=0}^{N-1} f_i^\dagger [\mathcal{H}_N]_{ij} f_j.$$

Para cada matriz $\mathcal{H}_N$ podemos encontrar o seu polinômio característico $P_N(\epsilon) \equiv \det[\mathcal{H}_N - I\epsilon]$, onde I é a matriz identidade $N \times N$. Por exemplo, caso mais simples $N = 1$ temos

$$P_1(\epsilon) = \varepsilon_0 - \epsilon. \quad (\text{A.8})$$

Por conveniência, vamos estender nossa discussão para $N = 0$, definindo $H_{N=0} \equiv 0$ e $P_{N=0}(\epsilon) \equiv 1$.

Os polinômios característicos das matrizes $\mathcal{H}_N$ formam um conjunto de polinômios P_N ($N = 0, 1, \dots, M$) que podem ser mutuamente ortogonais sobre uma determinada função peso $W(\epsilon)$. Calculando explicitamente o polinômio característico P_{N+1} a partir da matriz $\mathcal{H}_N$ encontraremos a relação abaixo entre os polinômios P_{N+1} , P_N e P_{N-1} .

$$P_{N+1}(\epsilon) = (\varepsilon_N - \epsilon)P_N - t_{N-1}^2 P_{N-1} \quad (\text{A.9})$$

Por conveniência redefinimos os polinômios P_N como $(-1)^N P_N$, sendo o fator -1 irrelevante nesse contexto. Comparando a relação anterior com as dadas em (A.6)

podemos determinar as seguintes relações de recorrência para os coeficientes ε_N e t_{N-1} a partir dos polinômios característicos P_{N-1} e P_N :

$$\varepsilon_N = \frac{\langle \epsilon P_N | P_N \rangle}{\langle P_N | P_N \rangle} \quad (N = 0, \dots, M-1) \quad (\text{A.10})$$

e

$$t_{N-1}^2 = \frac{\langle P_N | P_N \rangle}{\langle P_{N-1} | P_{N-1} \rangle} \quad (N = 1, \dots, M-1). \quad (\text{A.11})$$

Estas expressões definem um procedimento recursivo que determina todos os coeficientes diagonais e codiagonais da banda tridiagonalizada.

Para $N = 1$, a matriz $\mathcal{H}_1$ tem um único elemento, $\mathcal{H}_1 = \varepsilon_0$. Como, por definição $P_0(\epsilon) = 1$, este coeficiente pode ser calculado pela Eq. (A.10)

$$\varepsilon_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon W(\epsilon) d\epsilon. \quad (\text{A.12})$$

Calculado este coeficiente, podemos, imediatamente, determinar o polinômio característico $P_1(\epsilon)$ (ver Eq. A.6).

Para $N > 1$, supomos que P_{N-1} , P_N e $\mathcal{H}_N$ são conhecidos e, a partir das Eq. (A.10) e (A.11), determinamos $\mathcal{H}_{N+1}$ e consequentemente P_{N+1} . Veja que estas duas equações determinam ε_N e t_{N-1} . Os outros coeficientes diferentes de zero da matriz $\mathcal{H}_{N+1}$ [$\varepsilon_n (n = 0, \dots, N-1)$ e $t_n (n = 0, \dots, N-2)$] já são conhecidos, pois eles são elementos de $\mathcal{H}_N$. Em resumo, temos que: (i) construindo a matriz truncada $\mathcal{H}_N$, (ii) calculando seu polinômio característico $P_N(\epsilon)$, e (iii) determinando ε_N e t_{N-1} a partir das Eq. (A.10) e (A.11) para $N = 0, \dots, M-1$, podemos determinar todos os coeficientes da banda de condução tridiagonal (ver Eq. A.3).

Para o cálculo das Eq. (A.10) e (A.11) no procedimento recursivo acima descrito é necessário que se conheça a função peso $W(\epsilon)$. A questão natural é encontrar, se possível,

uma função peso $W(\epsilon)$ que seja adequada ao nosso problema ,ou seja , que gere o conjunto de polinômios ortogonais P_N .

A.3 Função peso

Nesta seção vamos definir a função peso $W(\epsilon)$ necessária para a aplicação do formalismo das quadraturas Gaussianas. Basicamente vamos usar as relações de comutação e anti-comutação entre f_0 e a banda de condução H_{BC} para extrair explicitamente as expressões para ϵ_0 e t_0 e, por comparação direta com as Eq. (A.10) e (A.11), extrair a expressão de $W(\epsilon)$ apropriada.

Das equações para H_{BC} e f_0 na base original, Eq. (A.1) e (A.2), podemos encontrar as seguintes relações

$$\left\{ \left[H_{BC}, f_0^\dagger \right], f_0 \right\} = \sum_{m=1}^M E_m \alpha_m^2 \quad (\text{A.13})$$

e

$$\left\{ \left[H_{BC}, f_0^\dagger \right], [f_0, H_{BC}] \right\} = \sum_{m=1}^M E_m^2 \alpha_m^2. \quad (\text{A.14})$$

Por outro lado, a partir de H_{BC} na base tridiagonal, Eq. (A.3), teremos as seguintes expressões para ϵ_0 e t_0 .

$$\epsilon_0 = \left\{ \left[H_{BC}, f_0^\dagger \right], f_0 \right\} \quad (\text{A.15})$$

e

$$t_0^2 = \left\{ \left[H_{BC}, f_0^\dagger \right], [f_0, H_{BC}] \right\} - \left\{ \left[H_{BC}, f_0^\dagger \right], f_0 \right\}^2 \quad (\text{A.16})$$

ou

$$t_0^2 = \left\{ \left[H_{BC}, f_0^\dagger \right], [f_0, H_{BC}] \right\} - \epsilon_0^2.$$

Observe que as quatro equações acima resultam em expressões explícitas para ε_0 e t_0 em função das energias E_m e os coeficientes α_m .

Para introduzir a função peso resolvemos as Eq. (A.10) e (A.11) para $N = 0$. Lembrando que $P_0(\epsilon) = 1$ e $P_1(\epsilon) = \varepsilon_0 - \epsilon$ teremos:

$$\varepsilon_0 = \frac{\langle \epsilon P_0 | P_0 \rangle}{\langle P_0 | P_0 \rangle} = \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon W(\epsilon) d\epsilon \quad (\text{A.17})$$

e

$$t_0^2 = \frac{\langle P_1 | P_1 \rangle}{\langle P_0 | P_0 \rangle} = \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon^2 W(\epsilon) d\epsilon - \varepsilon_0^2 \quad (\text{A.18})$$

Comparando as Eq. (A.17), (A.15) e (A.13) podemos mostrar que

$$\sum_{m=1}^M E_m \alpha_m^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon W(\epsilon) d\epsilon . \quad (\text{A.19})$$

Analogamente, comparando as Eq. (A.18), (A.16) e (A.14) teremos que

$$\sum_{m=1}^M E_m^2 \alpha_m^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon^2 W(\epsilon) d\epsilon \quad (\text{A.20})$$

Logo, para satisfazer a condição de normalização, Eq. (A.5), e as Eq. (A.19) e (A.20), nós definimos a função peso adequada ao nosso problema como

$$W(\epsilon) = \sum_{m=1}^M \alpha_m^2 \delta(\epsilon - E_m) . \quad (\text{A.21})$$

Com esta escolha da função peso completa-se o instrumental necessário neste contexto e podemos aplicar diretamente o procedimento iterativo descrito na seção anterior. Poderia argumentar-se que esta não seria a única função peso que satisfaz as Eq. (A.19) e (A.20). Embora não contestemos esta observação, ela não prejudica nosso raciocínio pois, como mostraremos na última parte deste apêndice, esta escolha gera os coeficientes corretos neste problema.

A.4 Procedimento prático

Na prática, não usamos o procedimento iterativo descrito acima para determinar os coeficientes ε_n e t_n . Descreveremos abaixo uma forma não iterativa de calcular numericamente esses coeficientes, onde cada um deles pode ser calculado independentemente.

Considere os momentos da energia, definidos por

$$\phi_n = \langle \epsilon^n | P_0 \rangle = \langle \epsilon^{n-m} | \epsilon^m \rangle. \quad (\text{A.22})$$

Usando a nossa definição da função peso, Eq. (A.21), o produto escalar acima é dado por

$$\phi_n = \sum_{m=1}^M E_m^n \alpha_m^2. \quad (\text{A.23})$$

Como os valores de E_m e α_m são conhecidos, esta expressão determina numericamente todos os momentos ϕ_n ($n = 0, \dots$).

Lembrando das propriedades da teoria das quadraturas Gaussianas, em que os polinômios característicos P_N formam um conjunto ortogonal,

$$\langle P_N | P_K \rangle = 0 \quad (N, K = 0, \dots, M; \quad N \neq K)$$

com cada polinômio de ordem N sendo combinação linear de potências ϵ^j com $j \leq N$. Portanto, para qualquer ($0 \leq n < N$), temos que ϵ^n é uma combinação linear de $P_0, \dots, P_n$ sendo conseqüentemente ortogonal a $P_N(\epsilon)$. Podemos, com isso, montar as seguintes equações:

$$\begin{aligned} \langle P_N | P_0 \rangle &= 0, \\ \langle P_N | \epsilon \rangle &= 0, \\ &\vdots \\ \langle P_N | \epsilon^{N-1} \rangle &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

$P_N(\epsilon)$ é o polinômio característico da matriz H_N [ver Eq. (A.7)] e tem a forma geral

$$P_N(\epsilon) = (-1)^N [\epsilon^N + \gamma_1 \epsilon^{N-1} + \dots + \gamma_N], \quad (\text{A.25})$$

onde γ_n ($n = 1, \dots, N$) são constantes relacionadas com os coeficientes ϵ_m e t_m , em particular [66]

$$\gamma_1 = - \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_n. \quad (\text{A.26})$$

Usando os momentos definidos na Eq. (A.23) podemos expandir o sistema de equações (A.24) encontrando

$$\begin{aligned} \phi_N + \gamma_1 \phi_{N-1} + \dots + \gamma_N \phi_0 &= 0 \\ \phi_{N+1} + \gamma_1 \phi_N + \dots + \gamma_N \phi_1 &= 0 \\ \vdots & \\ \phi_{2N-1} + \gamma_1 \phi_{2N-2} + \dots + \gamma_N \phi_{N-1} &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

Este sistema linear, com N equações inhomogêneas e N variáveis γ_n ($n = 1, \dots, N$) não conhecidas, pode ser resolvido usando a regra de Cramer. Em particular, considerando a expressão que determina γ_1 e substituindo o resultado na Eq. (A.26), encontramos que

$$\sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_n = \frac{\tilde{\Delta}_N}{\Delta_N} \quad (1 \leq N \leq M), \quad (\text{A.28})$$

onde

$$\Delta_N = \det \begin{bmatrix} \phi_0 & \dots & \phi_{N-2} & \phi_{N-1} \\ \phi_1 & \dots & \phi_{N-1} & \phi_N \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_{N-1} & \dots & \phi_{2N-3} & \phi_{2N-2} \end{bmatrix} \quad (\text{A.29})$$

e

$$\tilde{\Delta}_N = \det \begin{bmatrix} \phi_0 & \dots & \phi_{N-2} & \phi_N \\ \phi_1 & \dots & \phi_{N-1} & \phi_{N+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_{N-1} & \dots & \phi_{2N-3} & \phi_{2N-1} \end{bmatrix}. \quad (\text{A.30})$$

Observe que os dois determinantes são diferentes apenas pela última coluna. $\tilde{\Delta}_N$ é obtido substituindo todos ϕ_K da última coluna de Δ_N por ϕ_{K+1} .

Com a Eq. (A.28), podemos obter uma expressão explícita para o cálculo dos coeficientes diagonais ε_N

$$\varepsilon_N = \frac{\tilde{\Delta}_{N+1}}{\Delta_{N+1}} - \frac{\tilde{\Delta}_N}{\Delta_N} \quad (1 \leq N \leq M). \quad (\text{A.31})$$

Essa expressão determina todos os ε_N a exceção de ε_0 . Este particular coeficiente é dado por (ver Eq. (A.17))

$$\varepsilon_0 = \phi_1. \quad (\text{A.32})$$

Sendo que ϕ_1 é obtido diretamente da Eq. (A.23).

Para calcular os coeficientes codiagonais vamos acrescentar mais uma equação ao sistema linear acima. Partindo da Eq. (A.11) temos que

$$\langle P_N | P_N \rangle = \prod_{n=0}^{N-1} t_n^2 \quad (1 \leq N \leq M). \quad (\text{A.33})$$

Já que, como argumentamos acima, P_N é ortogonal a todos os ϵ^n ($n = 1, \dots, N-1$), o produto escalar acima pode ser reescrito como

$$\langle P_N | \epsilon^N \rangle = (-1)^N \prod_{n=0}^{N-1} t_n^2 \quad (1 \leq N \leq M) \quad (\text{A.34})$$

que pode ser expandida, analogamente aos casos anteriores, resultando

$$\phi_{2N} + \gamma_1 \phi_{2N-1} + \dots + \gamma_N \phi_N - \prod_{n=0}^{N-1} t_n^2 = 0 \quad (1 \leq N \leq M) \quad (\text{A.35})$$

Combinando esta equação com as Eq. (A.27) obtemos um novo sistema linear inhomogêneo de $N+1$ equações com $N+1$ variáveis $\gamma_1, \dots, \gamma_N$ e $\prod_{n=0}^{N-1} t_n^2$. A última, se determinada pela regra de Cramer, nos dá

$$\prod_{n=0}^{N-1} t_n^2 = \frac{\Delta_{N+1}}{\Delta_N} \quad (\text{A.36})$$

onde Δ_N e Δ_{N+1} são determinantes definidos pela Eq. (A.29). Da equação anterior resulta a seguinte expressão para o cálculo dos coeficientes codiagonais t_n :

$$t_N = \frac{\sqrt{\Delta_{N+2}\Delta_N}}{\Delta_{N+1}} \quad (1 \leq N \leq M-2) \quad (\text{A.37})$$

Em resumo, o método prático para determinar os coeficientes da transformação unitária da banda de condução da base diagonal a_m para a base tridiagonal f_m consiste de (i) calcular os momentos ϕ_n a partir da Eq.(A.23) (lembrar que os E_m e os α_m são conhecidos), (ii) montar e calcular os determinantes Δ_N e $\tilde{\Delta}_N$ usando as Eq. (A.29) e (A.30) e (iii) finalmente determinar os coeficientes t_N e ε_N pelas Eq. (A.31) e (A.37).

A.5 Autovalores do Hamiltoniano tridiagonal e as energias da banda de condução

Nesta parte vamos provar que a função peso definida na Eq. (A.21) é adequada ao nosso problema. O teste incontestável é mostrar que os autovalores da matriz tridiagonal (A.3) são exatamente as energias E_m da Eq. (A.1).

Considere o sistema de equações (A.24). O produto interno pode ser calculado em função das energias da banda de condução. Usando a definição da função peso

$$W(\epsilon) = \sum_{m=1}^M \alpha_m^2 \delta(\epsilon - E_m)$$

teremos

$$\langle P_N | \epsilon^n \rangle = \sum_{m=1}^M P_N(E_m) E_m^n \alpha_m^2. \quad (\text{A.38})$$

Com essa expressão o sistema de equações (A.24), para o caso particular $N = M$, torna-se

$$\begin{aligned}
 \sum_{m=1}^M P_M(E_m) \alpha_m^2 &= 0, \\
 \sum_{m=1}^M P_M(E_m) E_m^1 \alpha_m^2 &= 0, \\
 \sum_{m=1}^M P_M(E_m) E_m^2 \alpha_m^2 &= 0, \\
 &\vdots \\
 \sum_{m=1}^M P_M(E_m) E_m^{M-1} \alpha_m^2 &= 0.
 \end{aligned} \tag{A.39}$$

onde P_M é o polinômio característico da matriz $\mathcal{H}_M$ que representa o Hamiltoniano tridiagonal (A.3).

Para que esse sistema de M equações lineares homogêneas com M variáveis $P_M(E_m) \alpha_m^2$ ($m = 0, \dots, M$) admita soluções não triviais o determinante

$$\det \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ E_0 & E_1 & \dots & E_M \\ E_0^2 & E_1^2 & \dots & E_M^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ E_0^{M-1} & E_1^{M-1} & \dots & E_M^{M-1} \end{bmatrix} \tag{A.40}$$

deve ser igual a zero.

O determinante acima, conhecido como determinante de Vandermond ou *alternado*, [66] somente se anularia se dois ou mais elementos da segunda coluna forem iguais. Como supomos que as energias E_m são não-degeneradas garantimos que todos esses elementos são diferentes entre si. Portanto, o sistema acima tem somente a solução trivial

$$P_M(E_m) \alpha_m^2 = 0.$$

Como $\alpha_m \neq 0$ ($m = 1, \dots, M$), por hipótese, temos que $P_M(E_m) = 0$, ou seja, que as energias E_m da banda de condução são os zeros do polinômio característico de $\mathcal{H}_M$, que é a representação matricial do Hamiltoniano tridiagonal (Eq. A.3).

Apêndice B

Ponto fixo para $T=0$

Neste apêndice vamos analisar o ponto fixo de baixas temperaturas dado pelo Hamiltoniano de elétrons livres com potencial de espalhamento. Este é um Hamiltoniano quadrático cuja solução gera os estados de muitos corpos da solução numérica do GRN no limite do número de iterações N muito grande.

B.1 Hamiltoniano de elétrons livres com potencial de espalhamento

A baixas temperaturas os autoestados do Hamiltoniano Kondo de duas impurezas é bem descrito pelo ponto fixo de potencial de espalhamento cujo Hamiltoniano é dado por:

$$H_{Np}^0(K) = H_{Np}^0 + \tilde{K} \Lambda^{\frac{(N-1)}{2}} f_{0p}^\dagger f_{0p} \quad (\text{B.1})$$

onde H_{Np}^0 é dado por (4.1), $\tilde{K} = \frac{K}{D} \frac{2}{1+\Lambda^{-1}}$ e os índices de spin, irrelevantes nessa análise, são desconsiderados.

Como este Hamiltoniano é quadrático podemos diagonalizá-lo num conjunto de níveis de partículas independentes. Para isso vamos expressar a equação anterior em termos dos operadores que diagonalizam H_{Np}^0 e teremos

$$H_{Np}^0 = \sum_l \epsilon_l a_l^\dagger a_l \quad (\text{B.2})$$

e

$$f_{0p} = \Lambda^{-\frac{(N-1)}{4}} \sum_l \gamma_{0l} a_l \quad (\text{B.3})$$

No capítulo 4 foi discutido os autovetores e autovalores de H_{Np}^0 e foi encontrado que:

Para N ímpar

$$l = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{N+1}{2} \quad (\text{B.4})$$

$$\epsilon_l = \eta_{lp}^*; a_l = g_{lp}; \gamma_{0l} = \alpha_{l0p}^{*+} (l > 0)$$

$$\epsilon_l = -\eta_{-lp}^*; a_l = h_{-lp}^\dagger; \gamma_{0l} = \alpha_{-l0p}^{*-} (l > 0)$$

Para N par

$$l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{N}{2} \quad (\text{B.5})$$

$$\epsilon_l = \hat{\eta}_{lp}^*; a_l = \hat{g}_{lp}; \gamma_{0l} = \hat{\alpha}_{l0p}^{*+} (l \geq 0)$$

$$\epsilon_l = -\hat{\eta}_{-lp}^*; a_l = \hat{h}_{-lp}^\dagger; \gamma_{0l} = \hat{\alpha}_{-l0p}^{*-} (l > 0)$$

Reescrevendo o Hamiltoniano $H_{Np}^0(K)$ em termos dos operadores a_l encontraremos

$$H_{Np}^0(K) = H_{Np}^0 + \tilde{K} \sum_{ll'} \gamma_{0l} \gamma_{0l'} a_l^\dagger a_{l'} \quad (\text{B.6})$$

Vamos construir um novo conjunto de operadores c_j que devem diagonalizar $H_{Np}^0(K)$ num conjunto de níveis de energia de partículas independentes $\eta_j(N)$. Seja u_{ij} , elementos de uma matriz ortogonal, definimos

$$c_j = \sum_l u_{lj} a_l \quad (\text{B.7})$$

que, para diagonalizar $H_{Np}^0(K)$ deve satisfazer a seguinte equação:

$$(\eta_j - \epsilon_l)u_{lj} = \tilde{K} \gamma_{0l} \sum_{l'} \gamma_{0l'} u_{l'j} \quad (\text{B.8})$$

Resolvendo a Eq. (B.8) podemos determinar as expressões a serem satisfeitas pelos autovetores u_{lj} e autovalores η_j , isto é:

autovalores

$$\frac{1}{\tilde{K}} = \sum_l \frac{\gamma_{0l}^2}{(\eta_j - \epsilon_l)} = X(\eta_j) \quad (\text{B.9})$$

autovetores

$$u_{lj} = \frac{\gamma_{0l}}{(\eta_j - \epsilon_l)} \left[\sum_{l'} \frac{\gamma_{0l'}^2}{(\eta_j - \epsilon_{l'})} \right]^{-1/2} \quad (\text{B.10})$$

Logo os autovalores podem ser determinados raízes da equação $X(\eta) = \tilde{K}^{-1}$, que podem ser encontradas graficamente pela interseção da função $f_1(\eta) = X(\eta)$ com a linha $f_2 = \tilde{K}^{-1}$. Conhecendo os autovalores podemos calcular os autovetores a partir de (B.10).

Vamos analisar o caso de N ímpar (para N par a análise é semelhante). Usando as expressões (B.4) encontramos:

$$\frac{1}{\tilde{K}} = X(\eta_j) = \sum_{l=1}^{\frac{N+1}{2}} \left[\frac{\alpha_{0lp}^{*-2}}{(\eta_{jp} - \eta_{lp}^*)} + \frac{\alpha_{0lp}^{*-2}}{(\eta_{jp} + \eta_{lp}^*)} \right] \quad (\text{B.11})$$

Neste caso a solução gráfica mostra que temos $\frac{N+1}{2}$ autovalores positivos que denotaremos de η_j^+ e $\frac{N+1}{2}$ autovalores negativos que denotaremos de η_j^- . A essas energias vamos associar respectivamente os estados de partículas (g_j) e de buracos (h_j).

Temos interesse, também, de conhecer a expansão do operador f_0 na nova base g_j e h_j . Substituindo (B.7) na definição de f_0 (B.3) encontramos para N ímpar:

$$f_{0p} = \Lambda^{-(N-1)/4} \sum_j \left[\sum_l \gamma_{0l} u_{lj} \right] c_{jp} \quad (\text{B.12})$$

e podemos facilmente mostrar, combinando as equações (B.11), (B.9) e (B.10), que

$$f_{0p} = \Lambda^{-(N-1)/4} \sum_j (\alpha_{0jp}^+ g_{jp} + \alpha_{0jp}^- h_{jp}^+), \quad (\text{B.13})$$

onde os coeficientes são dados por

$$\alpha_{0jp}^\pm = \frac{1}{\bar{K}} \left\{ \sum_{l=1}^{\frac{N+1}{2}} \left[\frac{\alpha_{0l}^{*+2}}{(\eta_{jp}^\pm - \eta_l^*)^2} + \frac{\alpha_{0l}^{*-2}}{(\eta_{jp}^\pm + \eta_l^*)^2} \right] \right\}^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{B.14})$$

$$= \frac{1}{\bar{K}} [X'(\eta_{jp}^\pm)]^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{B.15})$$

B.1.1 Solução assintótica

No limite de N grande e $j \gg 1$ as quantidades acima $\eta_{jp}^\pm$, $\alpha_{0jp}^\pm$ podem ser avaliadas analiticamente. Devemos usar as expressões assintóticas para os parâmetros do Hamiltoniano livre, isto é, α_{0l}^{*-2} e η_l^* .

$$\frac{1}{\bar{K}} = X(\eta_j^\pm) = \sum_{l=1}^{\frac{N+1}{2}} \left[\frac{\alpha_{0lp}^{*+2}}{(\eta_{jp}^\pm - \eta_{lp}^*)} + \frac{\alpha_{0lp}^{*-2}}{(\eta_{jp}^\pm + \eta_{lp}^*)} \right] + \sum_{l=1}^{\frac{N+1}{2}} \left[\frac{\alpha_{0lp}^{*-2} - \alpha_{0lp}^{*+2}}{(\eta_{jp}^\pm + \eta_{lp}^*)} \right] \quad (\text{B.16})$$

$$= X_1(\eta_j) + \Delta X(\eta_j) \quad (\text{B.17})$$

Os coeficientes α_{0lp}^{*+} e α_{0lp}^{*-} são aproximadamente iguais com diferenças significativas apenas para l próximo do limite superior [ver Eq. (4.8) e (4.9)]. Portanto a parte dominante na equação acima vem do termo $X_1(\eta_j)$ sendo $\Delta X(\eta_j)$ apenas uma correção.

Inicialmente vamos calcular $X_1(\eta_j)$. De acordo com as análises do no cap. 4 [Eq. (4.7) e (4.9)] sabemos que $\eta_{lp}^* = \Lambda^{l-z_p}$ e $\alpha_{0l}^{*-2} \propto \Lambda^{l-z_p}$. Logo, observando que os termos dominantes na soma $X_1(\eta_j)$ são aqueles com $\eta_{jp}^\pm \simeq \eta_{lp}^* \gg 1$, podemos estender os limites superior e inferior para $\pm\infty$.

Substituindo as expressões assintóticas de η_{lp}^* [eq. 4.7] e α_{0l}^* [eq. 4.9] em $X_1(\eta_j)$ teremos

$$X_1(\eta_{jp}^\pm) = 2\eta_{jp}^\pm \alpha_{0p}^2(k_F) \left(\frac{1 - \Lambda^{-1}}{2} \right) \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left[\frac{\Lambda^{l-z_p}}{(\eta_{jp}^\pm - \Lambda^{2(l-z_p)})} \right]. \quad (\text{B.18})$$

Esta soma pode ser avaliada usando a transformação de Sommerfeld-Watson [67] e resulta em

$$X_1(\eta_{jp}^\pm) = \frac{\pi \alpha_{0p}^2(k_F) \left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2}\right)}{\ln \Lambda} \cot \left[\frac{\pi \ln \eta_{jp}^\pm}{\ln \Lambda} \right] + \mathcal{O}(e^{-2\pi^2/\ln \Lambda}). \quad (\text{B.19})$$

Considerando que os valores assintóticos de $\eta_{jp}^\pm$ podem ser escritos como

$$\eta_{jp}^\pm = \Lambda^{l-z_p \pm \delta_p} \quad (\text{B.20})$$

e substituindo essa expressão em (B.19) teremos finalmente que

$$\frac{1}{\tilde{K}} = \frac{\pi \alpha_{0p}^2(k_F) \left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2}\right)}{\ln \Lambda} \cot \pi \delta_p \quad (\text{B.21})$$

onde δ_p é a defasagem da banda de condução devido ao potencia de espalhamento K .

Substituindo (B.19) em (B.15) podemos derivar a expressão assintótica para $\alpha_{0jp}^\pm$.

$$\alpha_{0jp}^\pm = \frac{1}{\tilde{K}} [X'(\eta_{jp}^\pm)]^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{B.22})$$

$$= \frac{1}{\tilde{K}} \left[\frac{\pi^2 \alpha_{0p}^2(k_F) \left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2}\right)}{(\ln \Lambda)^2 \eta_{jp}^\pm} \csc^2 \left(\pi \frac{\ln \eta_{jp}^\pm}{\ln \Lambda} \right) \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{B.23})$$

que, usando o resultado (B.21), pode ser simplificada para

$$\alpha_{0jp}^\pm = \alpha_0(\tilde{K}) (\eta_{jp}^\pm)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{B.24})$$

onde

$$\alpha_0(\tilde{K}) = \alpha_{0p}(k_F) \left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \left[1 + \frac{\pi^2 \alpha_{0p}^4(k_F) \left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2}\right)}{(\ln \Lambda)^2} \tilde{K}^2 \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{B.25})$$

$$= \alpha_{0p}(k_F) \left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2}\right) \cos \pi \delta_p \quad (\text{B.26})$$

Observe que a expressão para $\alpha_{0jp}^\pm$ [Eq. (B.26)] é muito semelhante à de $\alpha_{0jp}^{*\pm}$ [Eq. (4.9)] a menos do fator $\cos \pi \delta_p$ multiplicativo.

Esses resultado assintóticos foram comparados com os resultados exatos da diagonalização numérica e observamos que a solução (B.21) para a defasagem é muito boa para $\tilde{K}$ pequeno porém se faz necessário incluir a correção $\Delta X(\eta_j)$ a medida que $\tilde{K}$ aumenta. No entanto para uma dada defasagem a equação (B.26), que relaciona o coeficiente $\alpha_{0jp}^\pm$ com a defasagem δ_p é sempre satisfeita.

Para N par, seguindo os mesmo procedimento, encontraremos:

$$\hat{\eta}_{jp}^\pm = \Lambda^{l-1/2-z_p \pm \delta_p} \quad (\text{B.27})$$

$$\hat{\alpha}_{0jp}^\pm = \alpha_0(\tilde{K})(\hat{\eta}_{jp}^\pm)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{B.28})$$

B.1.2 Correção $\Delta X(\eta_j)$ e defasagem para $\tilde{K} \rightarrow \infty$

Para incluir os efeitos da correção

$$\Delta X(\eta_j^\pm) = \sum_{l=1}^{\frac{N+1}{2}} \left[\frac{\alpha_{0lp}^{*-2} - \alpha_{0lp}^{*+2}}{(\eta_{jp}^\pm + \eta_{lp}^*)} \right] \quad (\text{B.29})$$

não podemos usar os valores assintóticos de α_{0jp}^* que, por simetria, daria um resultado zero. Usamos as expressões exatas para os coeficientes (4.8). Em cada intervalo l consideramos a função $A_p(\varepsilon)$ como uma constante $A_p(k_l)$, onde k_l é o momento médio naquele intervalo, dado por

$$k_l = \frac{D}{v_F} \frac{(1 + \Lambda^{-1})}{2} \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \eta_l^*$$

teremos então:

$$\begin{cases} \alpha_{0pl}^{*+} = N_p A_p(k_l) (1 - \Lambda^{-1})^{-\frac{1}{2}} \Lambda^{\frac{l-z_p}{2}} \\ \alpha_{0pl}^{*-} = N_p A_p(-k_l) (1 - \Lambda^{-1})^{-\frac{1}{2}} \Lambda^{\frac{l-z_p}{2}} \end{cases} \quad (\text{B.30})$$

consequentemente:

$$\alpha_{0lp}^{*-2} - \alpha_{0lp}^{*+2} = N_p^2 (1 - \Lambda^{-1}) \Lambda^{l-z_p} [A_p^2(-k_l) - A_p^2(k_l)]$$

onde a diferença entre colchetes é avaliada usando a definição de $A_p(\varepsilon)$ (2.14)

$$A_p^2(-k_l) - A_p^2(k_l) = \frac{1}{2} \left(\frac{\sin((-k_l + k_F)R)}{(-k_l + k_F)R} - \frac{\sin((k_l + k_F)R)}{(k_l + k_F)R} \right). \quad (\text{B.31})$$

Observando que a diferença no numerador de (B.29) somente é importante para $l \gg 1$ e neste caso, em geral $\eta_{lp}^* \gg \eta_{jp}^\pm$, vamos desprezar $\eta_{jp}^\pm$ no denominador e calcularemos $\Delta X(\eta_j^\pm)$ independente da energia. Logo devemos avaliar a seguinte soma:

$$\Delta X = N_p^2(1 - \Lambda^{-1}) \sum_{l=1}^{\frac{N+1}{2}} \frac{1}{2} \left(\frac{\sin((-k_l + k_F)R)}{(-k_l + k_F)R} - \frac{\sin((k_l + k_F)R)}{(k_l + k_F)R} \right) \quad (\text{B.32})$$

No limite de $N \rightarrow \infty$ a soma pode ser transformada numa integral. Temos $dk_l = k_l \ln \Lambda$ e o limite superior da integral é D/v_F , portanto devemos resolver a integral:

$$\Delta X = N_p^2 \frac{(1 - \Lambda^{-1})}{\ln \Lambda} \int_0^{D/v_F} \frac{1}{k_l} \frac{1}{2} \left(\frac{\sin((-k_l + k_F)R)}{(-k_l + k_F)R} - \frac{\sin((k_l + k_F)R)}{(k_l + k_F)R} \right) dk_l \quad (\text{B.33})$$

Vamos expandir os integrandos da seguinte forma:

$$\frac{1}{k_l} \frac{\sin((-k_l + k_F)R)}{(-k_l + k_F)R} = \frac{\sin((-k_l + k_F)R)}{k_F R k_l} + \frac{\sin((-k_l + k_F)R)}{k_F R (-k_l + k_F)} \quad (\text{B.34})$$

e

$$\frac{1}{k_l} \frac{\sin((k_l + k_F)R)}{(k_l + k_F)R} = \frac{\sin((k_l + k_F)R)}{k_F R k_l} - \frac{\sin((k_l + k_F)R)}{k_F R (k_l + k_F)} \quad (\text{B.35})$$

Agrupando os termos das expressões anteriores com mesmo denominador e substituindo essa expansão na Eq. (??) teremos:

$$\begin{aligned} \Delta X &= N_p^2 \frac{(1 - \Lambda^{-1})}{\ln \Lambda k_F R} \int_0^{D/v_F} \left[-\frac{\cos k_F R \sin(k_l R)}{k_l} + \frac{\sin((-k_l + k_F)R)}{2(-k_l + k_F)} + \frac{\sin((k_l + k_F)R)}{2(k_l + k_F)} \right] dk_l \\ &= N_p^2 \frac{(1 - \Lambda^{-1})}{\ln \Lambda k_F R} \left[-\cos k_F R \text{Si}\left(\frac{D}{v_F} R\right) + \frac{1}{2} \text{Si}\left(\left(\frac{D}{v_F} + k_F\right)R\right) - \frac{1}{2} \text{Si}\left(\left(-\frac{D}{v_F} + k_F\right)R\right) \right] \end{aligned}$$

Que pode ser reescrita em termos da assimetria como

$$\Delta X = N_p^2 \frac{(1 - \Lambda^{-1})}{\ln \Lambda k_F R} \left[-\cos k_F R \operatorname{Si}(\Delta k_F R) + \frac{1}{2} \operatorname{Si}((\Delta + 1)k_F R) - \frac{1}{2} \operatorname{Si}((-\Delta + 1)k_F R) \right] \quad (\text{B.36})$$

Combinando as equações (B.36), (B.21) e (B.16) podemos escrever que:

$$\frac{1}{\tilde{K}} = \frac{\pi \alpha_{0p}^2 (k_F) \left(\frac{1 - \Lambda^{-1}}{2} \right)}{\ln \Lambda} [\cot \pi \delta_p - \cot \pi \delta_0] \quad (\text{B.37})$$

onde o último termo do colchete é dado por

$$\cot \pi \delta_0 = \frac{N_p^2}{\pi^2 \alpha_{0p}^2 (k_F) k_F R} \left[2 \cos k_F R \operatorname{Si}(\Delta k_F R) - \frac{1}{2} \operatorname{Si}((\Delta + 1)k_F R) + \frac{1}{2} \operatorname{Si}((-\Delta + 1)k_F R) \right]. \quad (\text{B.38})$$

Usando as expressões (2.23) e (4.10) para N_p e α_{0p} , respectivamente, teremos finalmente que

$$\cot \pi \delta_0 = \frac{1}{\pi \left(1 \pm \frac{\sin(k_F R)}{k_F R} \right) k_F R} \left[2 \cos k_F R \operatorname{Si}(\Delta k_F R) - \frac{1}{2} \operatorname{Si}((\Delta + 1)k_F R) + \frac{1}{2} \operatorname{Si}((-\Delta + 1)k_F R) \right] \quad (\text{B.39})$$

δ_0 é, desta forma, a defasagem da banda de condução no limite de um potencial infinito ($\tilde{K} \rightarrow \infty$).

Para o caso particular do regime antiferromagnético que discutimos no capítulo 4, onde $k_F R = \pi$, teremos

$$\cot \pi \delta_0 = \frac{1}{\pi^2} \left[2 \operatorname{Si}(\pi \Delta) - \frac{1}{2} \operatorname{Si}((\Delta + 1)\pi) + \frac{1}{2} \operatorname{Si}((-\Delta + 1)\pi) \right] \quad (\text{B.40})$$

Observe que este resultado é diferente do caso simétrico onde sempre teremos $\delta_0 = \frac{1}{2}$.

B.2 Gráficos das energias em função de K

De acordo com os resultados da seção anterior podemos representar graficamente a evolução dos níveis de energia do Hamiltoniano com espalhamento em função de K cujas

Figura B.1: Níveis de energia do ponto fixo de elétrons livres com potencial de espalhamento K para N par. Os autovalores são caracterizados pela defasagem δ que é uma função monotônica do parâmetro K .

defasagens são dadas pela equação (B.21) para $(K \ll D)$ ou (B.37) para $(K \gg D)$. Na Fig. B.1 representamos os níveis de energia do ponto fixo de potencial de espalhamento em função do parâmetro K para N par. O mesmo gráfico, para N ímpar, é representado na Fig. (B.2)

B.3 O operador A_1

Para cálculos de propriedades termodinâmicas a $T = 0$ é importante encontrar um operador que tenha um decaimento $\Lambda^{-3\frac{N-1}{4}}$. Para o Hamiltoniano de elétrons livres ($\mathcal{H}_N^0$) sabemos, conforme Eq. (4.6) e (4.13), que o operador f_{1p} tem essa característica. Para o ponto fixo com potencial de espalhamento, no entanto, f_{1p} não conserva essa propriedade e o novo operador com decaimento $\Lambda^{-3\frac{N-1}{4}}$ será conhecido como A_1 , que encontraremos a seguir.

Considere a diagonalização da Eq. (B.1) numericamente. Neste caso devemos

Figura B.2: Níveis de energia do ponto fixo de elétrons livres com espalhamento K para N ímpar.

diagonalizar uma matriz $\mathcal{H}_N^0(K)$ com $(N + 1) \times (N + 1)$ elementos em que os não nulos são dados por

$$(\mathcal{H}_N^0)_{n,n+1} = (\mathcal{H}_N^0)_{n+1,n} = \Lambda^{(N-1-n)/2} t'_{np} \quad (\text{B.41})$$

e

$$(\mathcal{H}_N^0)_{n,n} = \Lambda^{(N-1)/2} \tilde{K} + \Lambda^{(N-1-n)/2} \varepsilon'_{np}$$

Os níveis de energia de partícula independente η_{jp} são dados pela autovalores desta matriz. Considere a matriz ortogonal $\mathcal{M}$ que diagonaliza esse Hamiltoniano, teremos, então, as seguintes relações:

$$\sum_{n'=0}^N (\mathcal{H}_N^0)_{n,n'} \mathcal{M}_{n',j} = \eta_{jp}(N) \mathcal{M}_{n,j} \quad (\text{B.42})$$

A relação entre os novos operadores c_j que diagonalizam $\mathcal{H}_N^0(K)$ e os operadores f_n são dados por

$$\begin{aligned} f_n &= \sum_j \mathcal{M}_{nj} c_j \\ c_j &= \sum_n \mathcal{M}_{nj} f_n \end{aligned} \quad (\text{B.43})$$

onde a matriz $\mathcal{M}$ e os níveis η_{jp} podem ser avaliadas facilmente no computador.

Considere agora a Eq.(B.42) para $n = 0$ juntamente com os elementos de matriz (B.41) teremos:

$$(\tilde{K} + \varepsilon'_{0p}) \mathcal{M}_{0,j} + t'_{0p} \mathcal{M}_{1,j} = \Lambda^{-(N-1)/2} \eta_{jp} \mathcal{M}_{0,j} \quad (\text{B.44})$$

podemos somar sobre j esta relação e, observando através da Eq.(B.43) que $\mathcal{M}_{0,j}$ e $\mathcal{M}_{1,j}$ são os coeficientes de f_0 e f_1 , respectivamente, teremos:

$$(\tilde{K} + \varepsilon'_{0p}) \sum_j \mathcal{M}_{0,j} c_j + t'_{0p} \sum_j \mathcal{M}_{1,j} c_j = \Lambda^{-(N-1)/2} \sum_j \eta_{jp} \mathcal{M}_{0,j} c_j \quad (\text{B.45})$$

Além disso sabemos da relação para f_0 [eq.(B.13)] que $\mathcal{M}_{0,j} = \Lambda^{-(N-1)/4} \alpha_{0jp}^\pm$. Substituindo c_j pelos operadores de partícula g_j e buraco h_j podemos finalmente definir o operador A_{1p} como a combinação linear de f_{0p} e f_{1p} que decai como $\Lambda^{-3(N-1)/4}$ dado por:

$$A_{1p} = (\tilde{K} + \varepsilon'_{0p}) f_{0p} + t'_{0p} f_{1p} = \Lambda^{-3(N-1)/4} \sum_j (\eta_{jp}^+ \alpha_{0jp}^+ g_{jp} + \eta_{jp}^\pm \alpha_{0jp}^- h_{jp}^+) \quad (\text{B.46})$$

Similarmente, para N par, teremos:

$$A_{1p} = (\tilde{K} + \varepsilon'_{0p}) f_{0p} + t'_{0p} f_{1p} = \Lambda^{-3(N-1)/4} \sum_j (\hat{\eta}_{jp}^+ \hat{\alpha}_{0jp}^+ \hat{g}_{jp} + \hat{\eta}_{jp}^\pm \hat{\alpha}_{0jp}^- \hat{h}_{jp}^+) \quad (\text{B.47})$$

Apêndice C

Termodinâmica para $T \rightarrow 0$

Neste apêndice vamos mostrar como as propriedades termodinâmicas a $T = 0$ podem ser calculadas a partir do espectro de energia, obtido da diagonalização iterativa no limite de N grande, ou seja, a partir do ponto fixo de baixas temperaturas.

C.1 Hamiltoniano efetivo no ponto fixo e relevância dos operadores

Para o caso antiferromagnético no limite do número de interações (N) grande, o Hamiltoniano Kondo de duas impurezas se aproxima do ponto fixo de potencial de espalhamento $H(K)$ (B.1), cujo valor de K depende das condições iniciais do modelo ($J, k_F R$ e Δ), conforme discutido no capítulo 4. O Hamiltoniano deste ponto fixo vamos denotar por H^* . Considere agora a forma truncada deste Hamiltoniano, H_N^* , tal que $\lim_{N \rightarrow \infty} H_N^* = H^*$.

Em geral, o Hamiltoniano Kondo de duas impurezas é bem descrito, para N grande, por um Hamiltoniano efetivo H_N^{eff} que é soma do Hamiltoniano de ponto fixo H_N^* (cuja propriedades podem ser calculadas com certa facilidade) com pequenos desvios ΔH_N , que podem ser tratados perturbativamente. Em geral podemos escrever:

$$H_N^{eff} = H_N^* + \Delta H_N \quad (C.1)$$

A perturbação ΔH_N é uma pequena correção que depende dos graus de liberdade consistente com H_N^* e que obedece as mesmas simetrias do Hamiltoniano original.

Antes de encontrar o operador ΔH_N apropriado ao nosso estudo e determinar as suas propriedades vamos primeiramente analisar dois pontos específicos de operadores ΔH_N em geral. O primeiro é relativo a dependência em N . Ambos operadores H_N^{eff} e H_N^* obedecem a relação de recorrência (2.55). Para N grande devemos ter $H_{N+2}^{eff} - H_{N+2}^* = \Lambda(H_N^{eff} - H_N^*)$. Logo devemos ter que $\Delta H_N = \Lambda \Delta H_{N+2}$, ou seja, que ΔH_N deve depender de N como $\Lambda^{\frac{N-1}{2}}$. Em geral, o operador ΔH_N deverá ser a soma de vários termos e ao fatorarmos a dependência em N podemos reescrever a Eq. (C.1) como:

$$H_N^{eff} = H_N^* + \sum_i \omega_i \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \delta H_i \quad (C.2)$$

onde δH_i são diversos operadores com as simetrias apropriadas e dependem do particular ponto fixo e ω_i são os coeficientes associados a estes operadores. Observe que esta é apenas uma forma apropriada de escrever a perturbação, que será útil para os cálculos a seguir.

O segundo ponto refere-se a estabilidade do ponto fixo e é um conceito importante no método do grupo de renormalização numérico. O Hamiltoniano efetivo deve obedecer a transformação (2.55) do GRN, istoé, $H_{N+2}^{eff} = \mathcal{T}^2 [H_N^{eff}]$. Lembrando que para o ponto fixo, por definição, $H_{N+2}^* = \mathcal{T}^2 [H_N^*] = H_N^*$, teremos a seguinte transformação para ΔH_{N+2} :

$$\Delta H_{N+2} = H_{N+2}^{eff} - H_{N+2}^* = \mathcal{T}^2 [H_N^* + \Delta H_N] - H_N^* \quad (C.3)$$

Já que ΔH_N é pequeno comparado com H_N^* podemos expandir o lado direito da equação acima em potências de ΔH_N e manter somente o termo linear em ΔH_N resultando:

$$\Delta H_{N+2} = \mathcal{L}_{(H_N^*)} \Delta H_N + \dots \equiv \mathcal{L}^* \Delta H_N \quad (C.4)$$

onde $\mathcal{L}^*$ é uma transformação linear [4, 60] que depende do ponto fixo H^* .

Para a transformação linear $\mathcal{L}^*$ deve existir alguns operadores $\mathcal{O}_i^*$ que são *auto-operadores* de $\mathcal{L}^*$ com *autovalores* λ_i^* , isto é:

$$\mathcal{L}^* \mathcal{O}_i^* = \lambda_i^* \mathcal{O}_i^*$$

onde $\mathcal{O}_i^*$ e λ_i^* dependem do particular ponto fixo. Podemos expandir o operador ΔH_N em combinações lineares dos $\mathcal{O}_i^*$ e *autovalores* λ_i^* do operador linear $\mathcal{L}^*$ [60], resultando em

$$\Delta H_N = \sum_l c_l \lambda_l^{*N/2} \mathcal{O}_l^*, \quad (\text{C.5})$$

que satisfaz a Eq. (C.4) para constantes c_l arbitrárias.

A partir dos valores $\{\lambda_i^*\}$ podemos encontrar a relevância dos operadores $\{\mathcal{O}_i^*\}$ e consequentemente a estabilidade do ponto fixo. Se $\lambda_i^* > 1$ a contribuição dos operadores $\mathcal{O}_i^*$ aumenta rapidamente com N e são denominados *relevantes*; se $\lambda_i^* < 1$ são denominados *irrelevantes*; e para $\lambda_i^* = 1$ são denominados *marginais*. Se todos operadores $\mathcal{O}_i^*$ são *irrelevantes* o ponto fixo é *estável* enquanto que a presença de um operador *relevante*, e geralmente de um operador *marginal*, indica que o ponto fixo é *instável*. Para uma discussão mais completa ver a seção IV. A da ref. [60].

C.2 Operadores do Hamiltoniano efetivo para ponto fixo de baixas temperaturas

A discussão acima é geral. Vamos agora discutir como obter os coeficientes $\{\omega_i\}$ e os operadores $\{\delta H_i\}$ da Eq.(C.2), que determinam o Hamiltoniano efetivo para baixas temperaturas. Os operadores δH_i devem conservar a simetria original do Hamiltoniano, isto é, a carga, o spin e a paridade e devem ser consistentes com os graus de liberdade do Hamiltoniano de ponto fixo $H_N(K)$ (Eq. B.1). Os graus de liberdade para esse ponto fixo são os operadores $f_{0p}, A_{1p}, \dots (p = e, o)$ que, para esse propósito, devem ser expandidos em termos dos operadores de partículas e buracos que diagonalizam $H_N(K)$. Em particular,

para este ponto fixo, temos os seguintes operadores [ver Eq. (B.13) e (B.47) no apêndice B],

$$f_{0p\mu} = \Lambda^{-\frac{N-1}{4}} \sum_j (\hat{\alpha}_{0jp}^+ g_{jp\mu} + \hat{\alpha}_{0jp}^- h_{jp\mu}^\dagger) \quad (C.6)$$

$$A_{1p\mu} = \Lambda^{-3\frac{N-1}{4}} \sum_j (\hat{\alpha}_{0je}^+ \eta_{jp}^+ \hat{g}_{je\mu} - \hat{\alpha}_{0jp}^- \eta_{jp}^- \hat{h}_{je\mu}^\dagger) \quad (C.7)$$

Observe que o uso de $f_{0p\mu}$ em δH_i gera um fator $\Lambda^{-\frac{N-1}{4}}$ enquanto que $A_{1p\mu}$ gera um fator $\Lambda^{-3\frac{N-1}{4}}$. Logo para gerar um operador de máxima relevância devemos usar o mínimo possível de produtos dos operadores com os menores índices entre $\{f_{0p\mu}, A_{1p\mu}, \dots\}$. Para conservar os números quânticos do problema podemos mostrar que devemos ter o produto de no mínimo quatro operadores $f_{0p\mu}$ ou um $f_{0p\mu}$ e um $A_{1p\mu}$. Temos que $(f_0)^2$ e $f_0 A_1 \propto \Lambda^{-(N-1)}$, logo $\Lambda^{\frac{N-1}{2}} \delta H \propto \Lambda^{-\frac{N-1}{2}}$. Consequentemente, [conforme Eq.(C.5)], esses são operadores irrelevantes com autovalores $\lambda^* = \Lambda^{-1}$ e, desta forma, entendemos porque o ponto fixo é estável.

Temos seis operadores que preservam as simetrias com autovalores Λ^{-1} . Para maiores detalhes de como encontrar esses operadores ver vasta discussão na seção IV.B da ref. [48], na seção II.C da ref. [60] e na tese de Jones [56]. Os operadores são os seguintes:

$$\delta H_1 = O_{Ue} = (n_e - 1)^2$$

$$\delta H_2 = O_{Uo} = (n_o - 1)^2$$

$$\delta H_3 = O_{Jeo} = (f_{0e\mu}^\dagger \vec{\sigma}_{\kappa\kappa'} f_{0e\mu'}) (f_{0o\mu}^\dagger \vec{\sigma}_{\kappa\kappa'} f_{0o\mu'})$$

$$\delta H_4 = O_{Ueo} = \left[(n_e - 1)(n_o - 1) + 2(f_{0e\uparrow}^\dagger f_{0e\downarrow}^\dagger f_{0o\downarrow} f_{0o\uparrow} + f_{0o\uparrow}^\dagger f_{0o\downarrow}^\dagger f_{0e\downarrow} f_{0e\uparrow}) \right]$$

$$\delta H_5 = O_{te} = (A_{1e\mu}^\dagger f_{0e\mu} + f_{0e\mu}^\dagger A_{1e\mu})$$

$$\delta H_6 = O_{to} = (A_{1o\mu}^\dagger f_{0o\mu} + f_{0o\mu}^\dagger A_{1o\mu})$$

Onde $n_p = f_{0p\uparrow}^\dagger f_{0p\uparrow} + f_{0p\downarrow}^\dagger f_{0p\downarrow}$, para $p = e, o$. Logo podemos reescrever o Hamiltoniano efetivo H_N^{eff} (C.2) como

$$\begin{aligned} H_N^{eff} = & H_N^*(\tilde{K}) + \{U_e O_{Ue} + U_o O_{Uo} + J_{eo} O_{Jeo} + U_{eo} O_{Ueo} \\ & + t_e O_{te} + t_o O_{to}\} \Lambda^{\frac{N-1}{2}} \end{aligned} \quad (C.8)$$

onde os vários operadores O devem ser escritos em termos dos operadores de partícula e buraco e os coeficientes $U_e, U_o, \dots$ dependem dos parâmetros $J, k_F R$ e Δ e são determinados a partir dos resultados numéricos do processo iterativo como veremos abaixo.

Os coeficientes $U_e, U_o, \dots$ são determinados diretamente das energias dos estados gerados pelo GRN comparando com as energias calculadas a partir de H_N^{eff} . Primeiramente reescrevemos os operadores $O_{Ue}, O_{Uo}, \dots$ explicitamente em termos dos estados de partícula e buraco do ponto fixo $H_N^*(\tilde{K})$. Desenvolvemos cada operador com as seguintes restrições (i) vamos desprezar qualquer termo que seja uma constante pois somente dará um desvio na energia do estado fundamental sem alterar os cálculos posteriores, (ii) vamos fazer um ordenamento normal dos operadores de partícula e buraco e manter somente os termos diagonais já que os cálculos são em primeira ordem na perturbação.

Escolhendo, por conveniência, N par teremos as seguintes relações para estes operadores,

$$O_{Ue} = (2\beta_e^2 - 1) \left[\hat{g}_{e\uparrow}^\dagger \hat{g}_{e\uparrow} + \hat{g}_{e\downarrow}^\dagger \hat{g}_{e\downarrow} - \hat{h}_{e\uparrow}^\dagger \hat{h}_{e\uparrow} - \hat{h}_{e\downarrow}^\dagger \hat{h}_{e\downarrow} \right] +$$

$$2 \left[\hat{g}_{e\uparrow}^\dagger \hat{g}_{e\uparrow} - \hat{h}_{e\uparrow}^\dagger \hat{h}_{e\uparrow} \right] \left[\hat{g}_{e\downarrow}^\dagger \hat{g}_{e\downarrow} - \hat{h}_{e\downarrow}^\dagger \hat{h}_{e\downarrow} \right]$$

$$O_{Uo} = (2\beta_o^2 - 1) \left[\hat{g}_{o\uparrow}^\dagger \hat{g}_{o\uparrow} + \hat{g}_{o\downarrow}^\dagger \hat{g}_{o\downarrow} - \hat{h}_{o\uparrow}^\dagger \hat{h}_{o\uparrow} - \hat{h}_{o\downarrow}^\dagger \hat{h}_{o\downarrow} \right] + \\ 2 \left[\hat{g}_{o\uparrow}^\dagger \hat{g}_{o\uparrow} - \hat{h}_{o\uparrow}^\dagger \hat{h}_{o\uparrow} \right] \left[\hat{g}_{o\downarrow}^\dagger \hat{g}_{o\downarrow} - \hat{h}_{o\downarrow}^\dagger \hat{h}_{o\downarrow} \right]$$

$$O_{Jeo} = \left[\hat{g}_{e\uparrow}^\dagger \hat{g}_{e\uparrow} - \hat{g}_{e\downarrow}^\dagger \hat{g}_{e\downarrow} - \hat{h}_{e\uparrow}^\dagger \hat{h}_{e\uparrow} + \hat{h}_{e\downarrow}^\dagger \hat{h}_{e\downarrow} \right] \left[\hat{g}_{o\uparrow}^\dagger \hat{g}_{o\uparrow} - \hat{g}_{o\downarrow}^\dagger \hat{g}_{o\downarrow} - \hat{h}_{o\uparrow}^\dagger \hat{h}_{o\uparrow} + \hat{h}_{o\downarrow}^\dagger \hat{h}_{o\downarrow} \right] + \\ 2 \left[\left(\hat{g}_{e\uparrow}^\dagger \hat{g}_{e\downarrow} - \hat{h}_{e\downarrow}^\dagger \hat{h}_{e\uparrow} \right) \left(\hat{g}_{o\downarrow}^\dagger \hat{g}_{o\uparrow} - \hat{h}_{o\uparrow}^\dagger \hat{h}_{o\downarrow} \right) + \left(\hat{g}_{e\downarrow}^\dagger \hat{g}_{e\uparrow} - \hat{h}_{e\uparrow}^\dagger \hat{h}_{e\downarrow} \right) \left(\hat{g}_{o\uparrow}^\dagger \hat{g}_{o\downarrow} - \hat{h}_{o\downarrow}^\dagger \hat{h}_{o\uparrow} \right) \right]$$

$$O_{Ueo} = (2\beta_o^2 - 1) \left[\hat{g}_{e\uparrow}^\dagger \hat{g}_{e\uparrow} + \hat{g}_{e\downarrow}^\dagger \hat{g}_{e\downarrow} - \hat{h}_{e\uparrow}^\dagger \hat{h}_{e\uparrow} - \hat{h}_{e\downarrow}^\dagger \hat{h}_{e\downarrow} \right] \\ (2\beta_e^2 - 1) \left[\hat{g}_{o\uparrow}^\dagger \hat{g}_{o\uparrow} + \hat{g}_{o\downarrow}^\dagger \hat{g}_{o\downarrow} - \hat{h}_{o\uparrow}^\dagger \hat{h}_{o\uparrow} - \hat{h}_{o\downarrow}^\dagger \hat{h}_{o\downarrow} \right] + \\ \left[\hat{g}_{e\uparrow}^\dagger \hat{g}_{e\uparrow} + \hat{g}_{e\downarrow}^\dagger \hat{g}_{e\downarrow} - \hat{h}_{e\uparrow}^\dagger \hat{h}_{e\uparrow} - \hat{h}_{e\downarrow}^\dagger \hat{h}_{e\downarrow} \right] \left[\hat{g}_{o\uparrow}^\dagger \hat{g}_{o\uparrow} + \hat{g}_{o\downarrow}^\dagger \hat{g}_{o\downarrow} - \hat{h}_{o\uparrow}^\dagger \hat{h}_{o\uparrow} - \hat{h}_{o\downarrow}^\dagger \hat{h}_{o\downarrow} \right] \\ 2 \left[\left(\hat{g}_{e\uparrow}^\dagger \hat{g}_{e\downarrow} + \hat{h}_{e\uparrow}^\dagger \hat{h}_{e\downarrow} \right) \left(\hat{g}_{o\downarrow}^\dagger \hat{g}_{o\uparrow} + \hat{h}_{o\downarrow}^\dagger \hat{h}_{o\uparrow} \right) + \left(\hat{g}_{o\uparrow}^\dagger \hat{g}_{o\downarrow} + \hat{h}_{o\uparrow}^\dagger \hat{h}_{o\downarrow} \right) \left(\hat{g}_{e\downarrow}^\dagger \hat{g}_{e\uparrow} + \hat{h}_{e\downarrow}^\dagger \hat{h}_{e\uparrow} \right) \right]$$

$$O_{te} = 2\Lambda^{-N-1} \sum_{j,\mu} \left(\hat{\alpha}_{0je}^{+2} \hat{\eta}_{je}^+ \hat{g}_{je\mu}^\dagger \hat{g}_{je\mu} + \hat{\alpha}_{0je}^{-2} \hat{\eta}_{je}^- \hat{h}_{je\mu}^\dagger \hat{h}_{je\mu} + \hat{\alpha}_{00e}^{-2} \hat{\eta}_{0e}^- \hat{h}_{0e\mu}^\dagger \hat{h}_{0e\mu} \right)$$

$$O_{to} = 2\Lambda^{-N-1} \sum_{j,\mu} \left(\hat{\alpha}_{0jo}^{+2} \hat{\eta}_{jo}^+ \hat{g}_{jo\mu}^\dagger \hat{g}_{jo\mu} + \hat{\alpha}_{0jo}^{-2} \hat{\eta}_{jo}^- \hat{h}_{jo\mu}^\dagger \hat{h}_{jo\mu} + \hat{\alpha}_{00o}^{-2} \hat{\eta}_{0o}^- \hat{g}_{0o\mu}^\dagger \hat{g}_{0o\mu} \right)$$

onde usamos as definições abaixo

$$\hat{g}_{p\mu} = \Lambda^{-\frac{N-1}{4}} \sum_{j=1}^{N/2} \hat{\alpha}_{0jp}^+ \hat{g}_{jp\mu}$$

$$\hat{h}_{p\mu} = \Lambda^{-\frac{N-1}{4}} \sum_{j=0}^{N/2} \hat{\alpha}_{0jp}^- \hat{h}_{jp\mu}$$

$$\beta_p^2 = \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \sum_{j=1}^{N/2} \hat{\alpha}_{0jp}^{-2}$$

A seguir escolhemos alguns estados convenientes, construídos como excitações de partículas e(ou) buracos do estado fundamental e calculamos o valor esperado de H_{eff} para cada um deles. Essas energias são dadas por combinações das energias do ponto fixo mais correções que dependem de $t_e, t_o, \dots$ vezes $\Lambda^{-\frac{N-1}{2}}$. Essas expressões analíticas são igualadas aos valores numéricos das energias em cada iteração N e conseqüentemente os valores dos coeficientes podem ser obtidos. Os estados e suas energias apropriados para o nosso estudos são relacionados abaixo

Estados:

$$E_{110} \equiv g_{1e\uparrow}^\dagger |\Omega\rangle$$

$$E_{-110} \equiv h_{0e\downarrow}^\dagger |\Omega\rangle$$

$$E_{111} \equiv g_{0o\uparrow}^\dagger |\Omega\rangle$$

$$E_{-111} \equiv h_{1o\uparrow}^\dagger |\Omega\rangle$$

$$E_{200} \equiv g_{1e\uparrow}^\dagger g_{1e\downarrow}^\dagger |\Omega\rangle$$

$$E_{200}^* \equiv g_{0o\downarrow}^\dagger g_{0o\uparrow}^\dagger |\Omega\rangle$$

$$E_{021} \equiv h_{0e\downarrow}^\dagger g_{0o\uparrow}^\dagger |\Omega\rangle$$

$$E_{100} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(h_{0e\downarrow}^\dagger g_{0o\downarrow}^\dagger + h_{0e\uparrow}^\dagger g_{0o\uparrow}^\dagger) |\Omega\rangle$$

Energias:

$$E_{110} = \hat{\eta}_{1e}^+ + \{U_e(2\beta_e^2 - 1) + U_{eo}(2\beta_o^2 - 1)\} \hat{\alpha}_{01e}^{+2} + 2t_e \hat{\eta}_{1e}^+ \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \hat{\alpha}_{01}^{+2}$$

$$E_{-110} = \hat{\eta}_{0e}^- - \{U_e(2\beta_e^2 - 1) + U_{eo}(2\beta_o^2 - 1)\} \hat{\alpha}_{00e}^{-2} + 2t_e \hat{\eta}_{0e}^- \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \hat{\alpha}_{00e}^{-2}$$

$$E_{111} = \hat{\eta}_{0o}^+ + \{U_o(2\beta_o^2 - 1) + U_{eo}(2\beta_e^2 - 1)\} \hat{\alpha}_{00o}^{+2} + 2t_o \hat{\eta}_{0o}^+ \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \hat{\alpha}_{00o}^{+2}$$

$$E_{-111} = \hat{\eta}_{1o}^- - \{U_e(2\beta_o^2 - 1) + U_{eo}(2\beta_e^2 - 1)\} \hat{\alpha}_{01o}^{-2} + 2t_o \hat{\eta}_{1o}^- \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \hat{\alpha}_{01o}^{-2}$$

$$E_{200} = 2\hat{\eta}_{1e}^+ + \{2U_e(2\beta_e^2 - 1) + 2U_{eo}(2\beta_o^2 - 1)\} \hat{\alpha}_{01e}^{+2} + \{4t_e \hat{\eta}_{1e}^+ + 2U_e \hat{\alpha}_{01e}^{+2}\} \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \hat{\alpha}_{01e}^{+2}$$

$$E_{200}^* = 2\hat{\eta}_{0o}^+ + \{2U_o(2\beta_o^2 - 1) + 2U_{eo}(2\beta_e^2 - 1)\} \hat{\alpha}_{00o}^{+2} + \{4t_o \hat{\eta}_{0o}^+ + 2U_o \hat{\alpha}_{00o}^{+2}\} \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \hat{\alpha}_{00o}^{+2}$$

$$\begin{aligned} E_{021} = & \hat{\eta}_{0e}^- + \hat{\eta}_{0o}^+ + \{U_o(2\beta_o^2 - 1) \hat{\alpha}_{00o}^{+2} - U_e(2\beta_e^2 - 1) \hat{\alpha}_{00e}^{-2}\} + \\ & U_{eo} \left\{ [(2\beta_e^2 - 1) \hat{\alpha}_{00o}^{+2} - (2\beta_o^2 - 1) \hat{\alpha}_{00e}^{-2}] - \hat{\alpha}_{00o}^{+2} \hat{\alpha}_{00e}^{-2} \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \right\} \\ & + (2t_e \hat{\alpha}_{00e}^{-2} \hat{\eta}_{0e}^- + 2t_o \hat{\alpha}_{00o}^{+2} \hat{\eta}_{0o}^+ + J_{eo} \hat{\alpha}_{00o}^{+2} \hat{\alpha}_{00e}^{-2}) \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E_{001} = & \hat{\eta}_{0e}^- + \hat{\eta}_{0o}^+ + \{U_o(2\beta_o^2 - 1) \hat{\alpha}_{00o}^{+2} - U_e(2\beta_e^2 - 1) \hat{\alpha}_{00e}^{-2}\} + \\ & U_{eo} \left\{ [(2\beta_e^2 - 1) \hat{\alpha}_{00o}^{+2} - (2\beta_o^2 - 1) \hat{\alpha}_{00e}^{-2}] - \hat{\alpha}_{00o}^{+2} \hat{\alpha}_{00e}^{-2} \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \right\} \\ & + (2t_e \hat{\alpha}_{00e}^{-2} \hat{\eta}_{0e}^- + 2t_o \hat{\alpha}_{00o}^{+2} \hat{\eta}_{0o}^+ - 3J_{eo} \hat{\alpha}_{00o}^{+2} \hat{\alpha}_{00e}^{-2}) \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \end{aligned}$$

Com isso podemos calcular cada um dos coeficientes da perturbação do ponto fixo a partir das seguintes expressões:

$$t_e = \left[\frac{(E_{110} - \hat{\eta}_{1e}^+)}{\hat{\alpha}_{01e}^{+2}} + \frac{(E_{-110} - \hat{\eta}_{0e}^-)}{\hat{\alpha}_{00e}^{-2}} \right] \frac{1}{2\Lambda^{-\frac{N-1}{2}} (\hat{\eta}_{1e}^+ + \hat{\eta}_{0e}^-)}$$

$$t_o = \left[\frac{(E_{111} - \hat{\eta}_0^+)}{\hat{\alpha}_{00o}^{+2}} + \frac{(E_{-111} - \hat{\eta}_1^-)}{\hat{\alpha}_{01o}^{-2}} \right] \frac{1}{2\Lambda^{-\frac{N-1}{2}} (\hat{\eta}_{0o}^+ + \hat{\eta}_{1o}^-)}$$

$$U_e = \frac{E_{200} - 2E_{110}}{2\Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \hat{\alpha}_{01e}^{+4}}$$

$$\begin{aligned}
U_o &= \frac{E_{200}^* - 2E_{111}}{2\Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \hat{\alpha}_{00o}^{+4}} \\
J_{eo} &= \frac{E_{021} - E_{001}}{4\hat{\alpha}_{00o}^{+2} \hat{\alpha}_{00e}^{-2} \Lambda^{-\frac{N-1}{2}}} \\
U_{eo} &= \frac{(E_{110} + E_{-111}) - E_{021}}{\hat{\alpha}_{00o}^{+2} \hat{\alpha}_{00e}^{-2} \Lambda^{-\frac{N-1}{2}}} + J_{eo}
\end{aligned}$$

Na prática o procedimento é o seguinte: (i) a partir das energias da diagonalização iterativa, que para N grande é bem descrita por energias de partículas independentes, encontramos o espectro de energias associado ao Hamiltoniano de ponto fixo $H(K)$; (ii) encontramos, por diagonalizações sucessivas de $H(K)$, o valor de K_c que descreve esse espectro, (iii) calculamos por diagonalização numérica de $H(\tilde{K}_c)$ os coeficientes $\hat{\alpha}_{0jp}^{\pm}$ e os autovalores $\hat{\eta}_{jp}$ e (iv) usamos as expressões anteriores para calcular todos os coeficientes da perturbação.

C.3 Cálculo das propriedades termodinâmicas para T=0:

Para calcular as propriedades termodinâmicas próximas do ponto fixo estável, isto é, a baixas temperaturas, usamos o Hamiltoniano efetivo (C.8) sendo que as contribuições dos operadores $O_{Ue}, O_{Uo}, \dots$ são avaliadas como perturbação de primeira ordem.

A relação entre o Hamiltoniano original e o de interação é dado por:

$$\frac{H}{D} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2} (1 + \Lambda^{-1}) \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} H_N \quad (C.9)$$

As propriedades termodinâmicas envolvem a quantidade βH onde $\beta = \frac{1}{k_B T}$ que pode ser rescrita como

$$\beta H = \lim_{N \rightarrow \infty} D \frac{1}{2} (1 + \Lambda^{-1}) \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \beta H_N = \lim_{N \rightarrow \infty} \beta_N H_N \quad (C.10)$$

Estamos interessados somente na contribuição das impurezas para as propriedades calculadas, portanto, vamos sempre subtrair a parte referente a contribuição quando não há impurezas presentes. Estaremos interessados na susceptibilidade magnética uniforme a campo zero e no calor específico. Para esse fim usaremos as seguintes definições:

$$\chi_{imp}(T) = \frac{(g\mu_B)^2}{k_B T} \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{Tr(S_N^z)^2 e^{-\beta_N H_N}}{Tre^{-\beta_N H_N}} - \frac{Tr(S_N^{0z})^2 e^{-\beta_N H_N^0}}{Tre^{-\beta_N H_N^0}} \right] \quad (C.11)$$

$$F_{imp}(T) = -k_B T \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\ln Tre^{-\beta_N H_N} - \ln Tre^{-\beta_N H_N^0} \right] \quad (C.12)$$

$$C_{imp} = -T \frac{\partial^2}{\partial T^2} F_{imp}(T). \quad (C.13)$$

Onde μ_B é o magneton de Bohr e g é o fator eletrônico, que assumimos igual a 2 tanto para a impureza quanto para os elétrons de condução. H_N é o Hamiltoniano do modelo estudado e H_N^0 é o Hamiltoniano da banda de condução livre.

Para avaliar as expressões (C.11) e (C.12) usamos H_{Neff} (C.8) no lugar de H_N . A teoria padrão de perturbação de primeira ordem produz as seguintes fórmulas práticas:

$$S_0 = \sum_m \langle m | (S_N^z)^2 | m \rangle e^{-\beta_N E_m}, \quad (C.14)$$

e

$$Z_0 = \sum_m e^{-\beta_N E_m}, \quad (C.15)$$

onde a soma em m é sobre todos autoestados de muitos corpos $|m\rangle$ de $H_N^*(K)$, isto é, o Hamiltoniano de ponto fixo não perturbado. Incluindo a perturbação em primeira ordem, vamos calcular os primeiros termos das expressões (C.11) e (C.12) (que correspondem a contribuição de H_N) e devemos, portanto, avaliar as seguintes expressões.

$$\chi(T) = \frac{(g\mu_B)^2}{k_B T} \left\{ \frac{S_0}{Z_0} + \beta_N \sum_{i=1}^6 \omega_i \left[\frac{S_0 \sum_m \langle m | \mathcal{O}_i | m \rangle e^{-\beta_N E_m}}{Z_0} - \frac{\sum_m \langle m | (S_N^z)^2 | m \rangle \langle m | \mathcal{O}_i | m \rangle e^{-\beta_N E_m}}{Z_0} \right] \right\} \quad (C.16)$$

e

$$F(T) = -k_B T \left[\ln Z_0 - \beta_N \sum_{i=1}^6 \omega_i \frac{\sum_m \langle m | \mathcal{O}_i | m \rangle e^{-\beta_N E_m}}{Z_0} \right], \quad (C.17)$$

onde $\omega_i \mathcal{O}_i$ são os vários operadores $\{U_e O_{U_e} + U_o O_{U_o} + \dots\} \Lambda^{\frac{N-1}{2}}$. Destas expressões podemos perceber que somente as partes diagonais de δH_i devem ser consideradas.

O cálculo das equações anteriores, em termos dos autoestados de partículas independentes de $H_N^*(K)$, é imediato, embora um pouco trabalhoso. Para N ímpar (em particular) teremos para a susceptibilidade

$$\chi_{imp}(T) = \chi^0(T) + \frac{(g\mu_B)^2}{k_B T} \left\{ U_e \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \beta_N \chi_{1e}^2 + U_o \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \beta_N \chi_{1o}^2 - 2J_{eo} \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \beta_N \chi_{1e} \chi_{1o} - t_e \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \beta_N \chi_{2e} + t_o \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \beta_N \chi_{2o} \right\} \quad (C.18)$$

e para a função de partição

$$F_{imp}(T) = F^0(T) + 4K_B T \left\{ t_e \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \beta_N F_{1e} + t_o \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \beta_N F_{1o} \right\} \quad (C.19)$$

onde $\chi^0(T)$ e $F^0(T)$ são as contribuições devido ao ponto fixo $H_N^*(K)$ dados por

$$\chi^0(T) = \frac{(g\mu_B)^2}{k_B T} \left\{ \sum_{p=e,o,j=1}^{(N+1)/2} \frac{e^{-\beta_N \eta_{jp}^+}}{(1+e^{-\beta_N \eta_{jp}^+})^2} + \frac{e^{-\beta_N \eta_{jp}^-}}{(1+e^{-\beta_N \eta_{jp}^-})^2} - \left(\sum_{p=e,o,j=1}^{(N+1)/2} 2 \frac{e^{-\beta_N \eta_{j,p}^*}}{(1+e^{-\beta_N \eta_{j,p}^*})^2} \right) \right\} \quad (C.20)$$

$$F^0(T) = -K_B T_N \sum_{j=1,p}^{(N+1)/2} \ln \frac{(1 + e^{-\beta_N \eta_{je}^+}) (1 + e^{-\beta_N \eta_{je}^-}) (1 + e^{-\beta_N \eta_{jo}^+}) (1 + e^{-\beta_N \eta_{jo}^-})}{2 (1 + e^{-\beta_N \eta_{je}^*}) (1 + e^{-\beta_N \eta_{jo}^*})}, \quad (C.21)$$

enquanto que as outras funções são as contribuições devido à perturbação e são dadas por

$$\chi_{1p} = \sum_{j=1}^{(N+1)/2} \left\{ \alpha_{0jp}^{+2} \frac{e^{-\beta_N \eta_{jp}^+}}{(1 + e^{-\beta_N \eta_{jp}^+})^2} + \alpha_{0jp}^{-2} \frac{e^{-\beta_N \eta_{jp}^-}}{(1 + e^{-\beta_N \eta_{jp}^-})^2} \right\} \quad (C.22)$$

$$\chi_{2p} = \sum_{j=1}^{(N+1)/2} \left\{ \alpha_{0j}^{+2} \eta_{jp}^+ \frac{(1 - e^{-\beta_N \eta_{jp}^+})}{(1 + e^{-\beta_N \eta_{jp}^+})^3} + \alpha_{0j}^{-2} \eta_{jp}^- \frac{(1 - e^{-\beta_N \eta_{jp}^-})}{(1 + e^{-\beta_N \eta_{jp}^-})^3} \right\} \quad (C.23)$$

$$F^0(T) = -K_B T_N \sum_{j=1,p}^{(N+1)/2} \ln \frac{(1 + e^{-\beta_N \eta_{je}^+}) (1 + e^{-\beta_N \eta_{je}^-}) (1 + e^{-\beta_N \eta_{jo}^+}) (1 + e^{-\beta_N \eta_{jo}^-})}{2 (1 + e^{-\beta_N \eta_{je}^*}) (1 + e^{-\beta_N \eta_{jo}^*})} \quad (C.24)$$

$$F_{1p} = \sum_{j=1}^{(N+1)/2} \left\{ \alpha_{0jp}^{+2} \eta_{jp}^+ \frac{e^{-\beta_N \eta_{jp}^+}}{(1 + e^{-\beta_N \eta_{jp}^+})} + \alpha_{0jp}^{-2} \eta_{jp}^- \frac{e^{-\beta_N \eta_{jp}^-}}{(1 + e^{-\beta_N \eta_{jp}^-})} \right\}. \quad (C.25)$$

Para efetuar essas somas vamos usar os valores assintóticos de $\alpha_{0j}^{\pm}$ e $\eta_{jp}^{\pm}$ que são dados pelas equações (B.24) e (B.20):

$$\eta_{jp}^{\pm} = \Lambda^{j-z_p \pm \delta_p} \quad (C.26)$$

$$\alpha_{0j}^{\pm} = \alpha_{0p}(k_F) \left(\frac{1 - \Lambda^{-1}}{2} \right)^{1/2} (\eta_{jp}^{\pm})^{\frac{1}{2}} \cos \delta_p \quad (C.27)$$

Com isso as somas (C.22), (C.23) e (C.25) são exatamente as mesmas que surgem na diagonalização do problema de uma impureza [48, 60], a menos do fator multiplicativo $\alpha_{0p}(k_F)$, e podem ser avaliadas usando os métodos apresentados, em detalhes, no apêndice A.c da ref. [60]. Os resultados são:

$$\chi_{0p} = F_{0p} = 0 \quad (C.28)$$

$$\chi_{1p} = \frac{\alpha_{0p}^2(k_F) \left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2}\right) \cos^2(\delta)}{\beta_N \ln \Lambda} \quad (C.29)$$

$$\chi_{2p} = \frac{\alpha_{0p}^2(k_F) \left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2}\right) \cos^2(\delta)}{\beta_N^2 \ln \Lambda} \quad (C.30)$$

$$F_{1p} = \frac{1}{6} \pi^2 \frac{\alpha_{0p}^2(k_F) \left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2}\right) \cos^2(\delta)}{\beta_N^2 \ln \Lambda} \quad (C.31)$$

Resultando para a susceptibilidade e energia livre

$$\begin{aligned} \chi_{imp}(T) = & \frac{(g\mu_B)^2}{k_B T} \left\{ (U_e \alpha_{0e}^4(k_F) + U_o \alpha_{0o}^2(k_F)) \frac{\Lambda^{-\frac{N-1}{2}}}{\beta_N} \left(\frac{\left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2}\right) \cos^2(\delta)}{\ln \Lambda} \right) \right. \\ & - 2J_{eo} \alpha_{0e}^2(k_F) \alpha_{0o}^2(k_F) \frac{\Lambda^{-\frac{N-1}{2}}}{\beta_N} \left(\frac{\left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2}\right) \cos^2(\delta)}{\ln \Lambda} \right) \\ & \left. - (t_e \alpha_{0e}^2(k_F) + t_o \alpha_{0o}^2(k_F)) \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \frac{\left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2}\right) \cos^2(\delta)}{\beta_N \ln \Lambda} \right\} \quad (C.32) \end{aligned}$$

$$F_{imp}(T) = 4k_B T \frac{1}{6} \pi^2 (t_e \alpha_{0e}^2(k_F) + t_o \alpha_{0o}^2(k_F)) \Lambda^{-\frac{N-1}{2}} \frac{\left(\frac{1-\Lambda^{-1}}{2}\right) \cos^2(\delta)}{\beta_N \ln \Lambda} \quad (C.33)$$

Com isso finalmente temos as expressões simplificadas para o coeficiente do calor específico e a susceptibilidade para baixas temperaturas:

Calor Específico

$$\frac{\gamma_{imp}}{\frac{4\pi^2}{3} \frac{k_B}{D}} = C_{imp} T = - \frac{(t_e \alpha_{0e}^2(k_F) + t_o \alpha_{0o}^2(k_F)) \cos^2(\delta)}{2A_\Lambda} \quad (C.34)$$

Susceptibilidade

$$\begin{aligned} \frac{\chi_{imp}(T)}{\frac{(2\mu_B)^2}{D}} = & - \frac{(t_e \alpha_{0e}^2(k_F) + t_o \alpha_{0o}^2(k_F)) \cos^2(\delta)}{2A_\Lambda} \\ & + (U_e \alpha_{0e}^4(k_F) + U_o \alpha_{0o}^2(k_F) - 2J_{eo} \alpha_{0e}^2(k_F) \alpha_{0o}^2(k_F)) \frac{(1 + \Lambda^{-1})}{8A_\Lambda^2} \cos^4(\delta) \quad (C.35) \end{aligned}$$

Observe que a $T \rightarrow 0$ a susceptibilidade tende a uma constante e o calor específico é linear com a temperatura.

Bibliografia

- [1] Ruderman M. A.; Kittel C. Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons. Phys. Rev., **96**(01), 99, 1954.
- [2] Kasuya T. A theory of metallic ferro- and antiferromagnetic on Zener's model. Prog. of Theor. Phys., **16**, 45, 1956.
- [3] Yosida K. Anomalous electrical resistivity and magnetoresistance due to s-d interaction in Cu-Mn alloys. Phys. Rev., **107**(02), 396, 1957.
- [4] Wilson K. G. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem. Reviews of Modern Physics, **47**(04), 773, 1975.
- [5] Jayaprakash C.; Krishna murthy H. R.; Wilkins J. W. Two-Impurity Kondo Problem. Phys. Rev. Lett., **47**(10), 737, 1981.
- [6] Jones B. A.; Varma C. M.; Wilkins J. W. Low-temperature Properties of the Two-Impurity Kondo Hamiltonian. Phys. Rev. Lett., **61**(01), 125, 1988.
- [7] Fye R. M.; Hirsch J. E. Quantum Monte Carlo Study of the two-impurity Kondo Hamiltonian. Phys. Rev. B, **40**(7), 4780, 1989.
- [8] Affleck I.; Ludwig A. W. W.; Jones B. A. Conformal-field-theory approach to the two-impurity Kondo problem: Comparison with numerical renormalization-group results. Phys. Rev. B., **52**(13), 9528, 1995.
- [9] Jones B. A.; Varma C. M. Study of Two Magnetic Impurities in a Fermi gas. Phys. Rev. Lett., **58**(09), 843, 1987.
- [10] Jones B. A.; Varma C. M. Critical point in the solution of the Two Magnetic Impurity problem. Phys. Rev. B, **40**(01), 324, 1989.
- [11] Silva J. B. Novo método de grupo de renormalização numérico aplicado ao cálculo da susceptibilidade magnética no modelo de Anderson de duas impurezas. Tese de Doutorado, Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo, 1994.

- [12] Schlottmann P. Some exact results for dilute mixed-valent and heavy-fermion systems. Phys. Rep., **181**(1-2), 1, 1989.
- [13] Bickers N. E.; Cox D. L.; Wilkins J. W. Self-consistent large-N expansion for normal-state properties of dilute magnetic alloys. Phys. Rev. B, **36**(4), 2036, 1987.
- [14] Kondo
J. Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys. Progress of Theoretical Physics, **32**(01), 37, 1964.
- [15] Oliveira L. N.; Wilkins J. W. Specific heat of the Kondo model. Phys. Rev. Lett., **47**, 1553, 1981.
- [16] Andrei.; Furuya K.; Lowenstein J. Solution of the Kondo Problem. Rev. Mod. Phys., **55**, 331, 1983.
- [17] Tsvelick A. M.; Wiegmann P. B. Exact results in the Theory of Magnetic Alloys. Adv. Phys., **32**, 453, 1983.
- [18] Newns D. M.; Read N. Mean-field theory of intermediate valence/heavy fermion system. Adv. in Phys., **36**, 799, 1987.
- [19] Gunnarson O.; Schönhammer. Electron spectroscopies for Ce compounds in impurity model. Phys. Rev. B, **31**, 4815, 1985.
- [20] Alexander S.; Anderson P. W. Interaction between Localized States in Metals. Phys. Rev., **133**(6A), A1594, 1964.
- [21] Fye R. M.; Hirsch J. E.; Scalapino D. J. Kondo effect versus indirect exchange in the two-impurity Anderson Model: A Monte Carlo Study. Phys. Rev. B, **35**(10), 4901, 1987.
- [22] Millis A. J.; Kotliar B. G.; Jones B. A. Field Theories in Condensed Matter Physics. Addison-Wesley, Redwood City, CA, 1990.
- [23] Jones B. A. Pair correlation effects in heavy fermions. Physica B, **171**, 53, 1991.
- [24] Affleck I. ; Ludwig A. W. W. Exact Critical Theory of Two-impurity Kondo Model. Phys. Rev. Lett., **68**(07), 1046, 1992.
- [25] Sire C.; Varma C. M.; Krishna murthy H. R. Theory of the non-Fermi-liquid transition point in the two impurity Kondo model. Phys. Rev. B, **48**(18), 13.833, 1993.
- [26] J. Gan. Solution of the two impurity Kondo model: Critical point, Fermi-liquid phase, and crossover. Phys. Rev. B, **51**(13), 8287, 1995.

- [27] Affleck I. ; Ludwig A. W. W.; Pang H. B.; Cox D. L. Relevance of anisotropy in the multichannel Kondo effect: Comparison of conformal field theory and numerical renormalization-group results. Phys. Rev. B., **45**(14), 7918, 1992.
- [28] Jones B. A.; Millis A. J. Mean-field analysis of two antiferromagnetically coupled Anderson impurities. Phys. Rev. B, **39**(05), 3415, 1989.
- [29] Sakai O.; Shimizu Y.; Kasuya T. Excitation Spectra of two impurity Anderson Model. Sol. Sta. Comm., **75**(02), 81, 1990.
- [30] Sakai O.; Shimizu Y. Excitation Spectra of two impurity Anderson Model. I. Critical Transition in the Magnetic Impurity Problem and the Roles of the Parity Splitting. J. Phys. Soc. Jpn., **61**(07), 2333, 1992.
- [31] Sakai O.; Shimizu Y. Excitation Spectra of two impurity Anderson Model. I. Interplay between the Kondo Effect and the Inter site Interactions. J. Phys. Soc. Jpn., **61**(07), 2348, 1992.
- [32] Saso T. Variational theory of the two-impurity Kondo problem. Phys. Rev. B, **44**(1), 450, 1991.
- [33] Yanagisawa T. Ground state and staggered Susceptibility of two-impurity problem. J. of the phys. Soc. of Jap., **60**(1), 29, 1991.
- [34] Yanagisawa T. Diagonalization study of the two-impurity Anderson model. J. of the phys. Soc. of Jap., **60**(10), 3449, 1991.
- [35] Andreani L. C.; Beck H. A zero-temperatura variational study of the two-impurity Anderson Model. Sol. Sta. Comm., **79**(1), 17, 1991.
- [36] Andreani L. C.; Beck H. Two-impurity Anderson Model: A Variational study. Phys. Rev. B., **48**(48), 7322, 1993.
- [37] Jayaprakash C.; Krishna murthy H. R. ; Wilkins J. W. Thermodynamic scaling theory for the two-impurity Anderson Model. J. Appl. Phys., **53**(03), 2142, 1982.
- [38] Santoro G. E.; Giuliani G. F. Two-impurity Anderson model: Results of a perturbative expansion in U. Phys. Rev. B, **49**(10), 6746, 1994.
- [39] Fye R. M. Anomalous fixed Point Behavior of Two Kondo Impurities: A reexamination. Phys. Rev. Lett., **76**(06), 916, 1994.
- [40] Lee P. A.; Rice T. M.; Serene J. W.; Sham L. J.; Wilkins J. W. Theory of Heavy-electron Systems. Comments Cond. Mat. Phys., **12**(3), 99, 1986.

- [41] Hewson A. C. The Kondo problem to Heavy Fermions. Cambridge University Press, second edition, 1993.
- [42] Fisk Z.; Hess D. W.; Pethick J. C.; Pines D.; Smith J. L.; Thompson D. J.; Willis J. O. Heavy-electron Metals: New Highly correlated states of matter. Science, **239**, 33, 1988.
- [43] Ott H. R. Open problems in heavy-electron system. Int. J. of Mod. Phys., **6**(5-6), 473, 1992.
- [44] Hess D. W. ; Riseborough P. S. ; Smith J. L. Heavy-Fermion phenomena. Enc. of Appl. Phys., **7**, 435, 1993.
- [45] Steglich F.; Geibel C.; Gloos K.; Olesch G.; Schank C.; Wassilew C.; Loidl A.; Krimmel A.; Stewart G. R. Heavy Fermions: Typical Phenomena and Recent Developments. J. Low Temp. Phys., **95**(1/2), 3, 1994.
- [46] Cox D. L.; Grewe N. Transport Properties of the Anderson lattice. Z. Phys. B - Condensed Matter, **71**, 321, 1988.
- [47] Oliveira L. N. ; Lfbero V. L. ; Frota H. O. ; Yoshida M. Renormalization-group of dynamical properties for impurity models. Physica B, **171**, 61, 1991.
- [48] Krishna murthy H. R.; Wilkins J. W.; Wilson K. G. Renormalization-group approach to the Anderson model of dilute magnetic alloys.I. Static properties for the symmetric case. Phys. Rev. B, **21**(03), 1003, 1980.
- [49] Yoshida M.; Whitaker M. A.; Oliveira L. N. Renormalization-Group calculation of excitation properties for impurity models. Phys. Rev. B, **41**(13), 9403, 1990.
- [50] Oliveira L. N. The Numerical Renormalization Group and the Problem of Impurities in Metals. Brazilian Journal of Physics, **22**(03), 155, 1992.
- [51] Lfbero V. L.; Oliveira L. N. Spectral Density for Fermion Tunneling between Two Centers in a Metallic Environment. Phys. Rev. Lett., **65**(16), 2042, 1990.
- [52] Oliveira W. C.; Oliveira L. N. Generalized numerical renormalization-group method to calculate the thermodynamical properties of impurities in metals. Phys. Rev. B, **49**(17), 11986, 1994.
- [53] Costa S. C.; Paula C. A.; Lfbero V. L.; Oliveira L. N. Numerical renormalization-group computation of specific heats. aceito para publicação no Phys. Rev. B.
- [54] Haydock R. Solid State Physics, volume 35. Academic, New York, 1980.