UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

Novo método de grupo de renormalização
numérico aplicado ao cálculo da
susceptibilidade magnética no modelo de
Anderson de duas impurezas

Jeremias Borges da Silva

OK

USP / IFSC / SDI

8-2-001044

Tese apresentada ao IFSC-USP para
obtenção do título de Doutor em
Ciências Física Básica.

Orientador. Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

Departamento de Física e Ciência dos Materiais

São Carlos - São Paulo
1994

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E
INFORMAÇÃO

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

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

Av. Dr. Carlos Botelho, 1465
Caixa Postal 369
CEP 13560.970 - São Carlos - SP
Brasil

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE JEREMIAS BORGES DA SILVA APRESENTADA AO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 01/06/1994

COMISSÃO JULGADORA:

Luiz Nunes de Oliveira

Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

Amir Treguer

Prof. Dr. Amir Treguer

Maurício Figueira

Prof. Dr. Maurício Figueira

Amir Drosacos Calceira

Prof. Dr. Amir Drosacos Calceira

Roberto Moraes

Prof. Dr. Roberto Moraes

a minha esposa Christiane

Agradecimentos

Agradeço ao professor Luiz Nunes a oportunidade que me concedeu de tê-lo como orientador. Toda a admiração e respeito daqueles que o conhecem são solidamente fundamentados, assim, espero poder transmitir toda as experiências que pude absorver, sob sua orientação, durante esse meu doutorado.

Agradeço aos meus companheiros de grupo Wanda e Melquisedech pelas discussões bastantes proveitosas e suas amizades desde o início dos nossos trabalhos; ao professor Valter e a Washington que chegaram para enriquecer cientificamente as discussões do grupo e compartilhar nossas amizades.

A Nilton Guedes, que dividiu moradia comigo durante dois anos, meu especial agradecimento. Sua amizade foi a melhor que encontrei em São Carlos. Agradeço a Facin por sua amizade no início da melhor mudança em minha vida, e que esse novo cruzamento em nossos destinos possa servir para solidificá-la.

Agradeço a todos os companheiros e amigos que comigo conviveram durante esses anos do meu doutorado. Perdoem-me por deixar de mencioná-los aqui. Se assim o fizesse, esta parte se tornaria mais um capítulo da tese. Pois melhor que escrever seus nomes em um pedaço de papel, que o tempo descolorirá, é levá-los comigo e retribuir de forma sincera e sadia vossas amizadas. E isto eu prometo!!

Agradeço a minha maior companheira e amiga, minha esposa Christiane. Sua compreensão, incentivo e exemplo foram um estímulo decisivo para realização desse trabalho. Agradeço aos meus pais e irmãos que são responsáveis por ter chegado aqui.

Finalmente, agradeço aos órgãos financiadores CNPq e FAPESP pela bolsa de estudos e infraestrutura que permitiram a realização do trabalho.

Resumo

Este trabalho introduz uma nova discretização da banda de condução no método de Grupo de Renormalização Numérico. Com essa técnica, a susceptibilidade magnética do modelo de Anderson de duas impurezas, no limite Kondo, é calculada. Como ilustração, a densidade espectral do modelo também é calculada.

A nova técnica baseia-se na simetria de paridade do modelo para discretizar diferentemente a banda de condução associada a cada paridade. Sua extensão ao modelo de rede é indicada. A técnica reduz o tempo computacional e permite usar maiores valores do parâmetro de discretização do que no método tradicional. Para um mesmo tempo de cálculo, nossos resultados são muito mais precisos do que os encontrados na literatura.

A susceptibilidade é calculada na aproximação de acoplamento independente da energia. Uma interação de troca, tipo RKKY, é somado ao Hamiltoniano do modelo. Para acoplamento ferromagnético, obtém-se efeito Kondo de dois estágios. O estado fundamental é singleto com defasagem de $\pi/2$ na banda de condução. Para acoplamento antiferromagnético fraco, um efeito Kondo é obtido. Para fortes acoplamentos antiferromagnéticos, o estado fundamental é singleto sem defasagens. Um ponto fixo instável é observado separando as regiões de estado fundamental Kondo e antiferromagnético. Nesse ponto a susceptibilidade é nula e a defasagem é indefinida.

Abstract

This work introduces an extension of the Numerical Renormalization Group approach to compute thermodynamical properties of impurities in metals, based on a novel logarithmic discretization of the conduction band. On the basis of the new method, the thermal dependence of the magnetic susceptibility for the Kondo limit of the two-impurity Anderson model is computed. As another illustration, the impurity spectral density for the same model is calculated analytically in the weakly correlated regime.

The new approach takes advantage of the parity-inversion symmetry of the model to discretize differently the odd and the even conduction channels (for N_i impurities, the conduction band could likewise be divided into N_i channels, each of which would be discretized in a different way). The resulting mesh describes better the continuum of the conduction states than the mesh in the standard Numerical Renormalization Group method; as a consequence, the new procedure is substantially less expensive when computing any given thermodynamical property with a given accuracy, thus we are able to compute the temperature dependence of the magnetic susceptibility with a small fraction of the effort involved in the recently reported computation of the ground state properties for the two impurity Kondo model.

As in previous Renormalization Group work, the model Hamiltonian is diagonalized within the energy-independent coupling approximation. One well-known shortcoming of this approximation is its inability to generate antiferromagnetic RKKY couplings between the impurities; to compensate, again following previous work, we have added to the Hamiltonian an artificial exchange coupling I_0 . For weak antiferromagnetic or ferromagnetic couplings, the

effective magnetic moment of the impurities decreases with temperature, and as in the one-impurity Kondo effect, the ground-state conduction band is phase shifted by $\pi/2$. For strong ferromagnetic coupling, the Kondo effect takes place in two stages, one for each conduction channel. For strong antiferromagnetic coupling, the magnetic moment also decreases, rapidly, with temperature, but the ground state conduction-band phase shift is zero. The regions of zero and $\pi/2$ ground-state phase shifts are separated by an unstable fixed point. At this point, the magnetic susceptibility vanishes.

Este trabalho contou com o apoio financeiro do CNPq e da FAPESP

Conteúdo

1	Introdução	1
1.1	Modelo de Anderson	1
1.1.1	Apresentação do modelo	2
1.2	Estudos e Aplicações	8
1.2.1	férmions pesados	11
1.3	Duas Impurezas Magnéticas em Metal não Magnético	16
1.3.1	Propriedades e características	16
1.3.2	Revisão da teoria	22
1.3.3	Resumo dos resultados	28
2	O Método de Grupo de Renormalização Numérico	30
2.1	GRN no modelo de Anderson sem Correlação Coulombiana	31
2.1.1	Preparação do Hamiltoniano	31
2.1.2	Discretização	34
2.1.3	Diagonalização	39
2.2	Cálculo da densidade Espectral	41
2.2.1	Densidade Espectral para $U = 0$	43
2.2.2	Densidade Espectral para $U \ll \Gamma$	45
3	O GRN aplicado ao Modelo de Anderson com duas impurezas correlacionadas	49
3.1	A Nova Abordagem	50

3.1.1	As simetrias	52
3.2	Cálculo da Susceptibilidade	56
3.3	Procedimento Computacional	57
4	Resultados e Discussões	64
4.1	Diagramas de Fluxo de Energia	65
4.2	Gráficos da Susceptibilidade	72
4.3	Conclusões	78
4.4	Perspectivas e trabalhos futuros	81
A	Cálculo Perturbativo da Densidade Espectral	89
B	Detalhes sobre a diagonalização iterativa	91

Lista de Figuras

1.1	Modelo de Anderson de uma impureza, com correlação Coulombiana U entre elétrons de spins diferentes ocupando o mesmo orbital na impureza.	3
1.2	Modelo Kondo de uma impureza.	6
1.3	Calor específico, a pressão constante, característico de alguns sistemas de férmions pesados.	12
1.4	Modelo de Anderson de duas impurezas	17
1.5	Interação RKKY em função de $K_F.R$	18
1.6	Estado fundamental para uma forte interação RKKY negativa.	20
1.7	Estado fundamental tipo Kondo.	21
1.8	Resultado obtido por Jayaprakash et al para a susceptibilidade magnética no modelo de Anderson com duas impurezas.	23
1.9	Resultados obtidos por Jones et al para o modelo Kondo de duas impurezas.	24
2.1	Discretização das bandas de condução par e ímpar na nova abordagem.	35
2.2	Ilustração da transformação de escala mantendo a banda invariante.	37
2.3	Espectro de energia do Hamiltoniano de condução par e ímpar diagonalizado.	40
2.4	Diagrama de fluxo para o Hamiltoniano de Anderson de uma impureza (par, $z=1$), com energia $\bar{\epsilon}_d = 0$	42
2.5	Densidade espectral para o modelo de Anderson com duas impurezas sem correlação Coulombiana (os sinais +=parte par e - = ímpar), com $z_e = 1.0$ e $z_o = 0.5$	45

2.6	Densidade espectral para o modelo de Anderson com duas impurezas com $\bar{U} \ll \bar{\Gamma}$, obtido usando teoria de perturbação.	48
3.1	Desenho esquemático do procedimento computacional.	61
4.1	Diagrama de fluxo para $s = 0,1$ (impurezas distantes uma da outra) que significa fraco acoplamento ferromagnético.	67
4.2	Diagrama de fluxo de energia para $s = 0,7$	68
4.3	Diagrama de fluxo para impurezas muito próximas ($s = 0,9$).	69
4.4	Diagrama de fluxo destacando o efeito da inclusão do termo de interação $-I_0 \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ no Hamiltoniano.	70
4.5	Diagrama de fluxo para fraco acoplamento antiferromagnético ($I_0 = -1.91938 \times 10^{-4}$).	72
4.6	Diagrama de fluxo para acoplamento antiferromagnético moderado ($I_0 = 1.91944 \times 10^{-4}$).	73
4.7	Gráfico da susceptibilidade magnética obtido usando $s = 0,1$	74
4.8	Gráfico da susceptibilidade para $s = 0,7$, mostrando o efeito Kondo de dois estágios.	83
4.9	Gráfico da susceptibilidade para o caso das impurezas muito próximas uma da outra ($s = 0,9$).	84
4.10	Gráfico da susceptibilidade mostrando o efeito de um acoplamento ferromagnético direto I_0 incluído ao Hamiltoniano.	85
4.11	Gráfico da susceptibilidade para acoplamento antiferromagnético próximo e abaixo do acoplamento de ponto crítico.	86
4.12	Gráfico da susceptibilidade obtido para acoplamento antiferromagnético próximo e acima do acoplamento de ponto crítico.	87
4.13	Diagrama esquemático mostrando a relação entre T_K e I_0	88

Lista de Tabelas

3.1 Autoestados e autovalores do Hamiltoniano inicial 55

3.2 Geração da base primitiva para o primeiro passo na iterção $N + 1$, usando a
base propria obtido no segundo passo da iteração N 59

3.3 Elementos de matriz invariantes na primeira iteração. 60

Capítulo 1

Introdução

1.1 Modelo de Anderson

No início da década de 60 a existência de momentos magnéticos localizados em metais não magnéticos com impurezas de orbitais d e f não totalmente preenchidos era um fenômeno bastante conhecido experimentalmente, mas sem uma análise profunda sobre significado ou condições para sua ocorrência. Em 1961, P. W. Anderson^[1] apresentou a primeira descrição formal de momentos magnéticos localizados em metais. Ele propôs um modelo simples levando em conta a correlação Coulombiana entre elétrons de spins opostos ocupando o mesmo orbital da impureza. Essa interação dificulta a dupla ocupação no orbital, possibilitando a ocorrência de momento magnético líquido na impureza.

O grande sucesso do modelo de Anderson na descrição de metais com impurezas magnéticas diluídas, e a facilidade de inclusão de termos mais realísticos, o tornou um dos principais modelos nos estudos desse tipo de sistema. Esse modelo foi muito importante no entendimento do problema Kondo^[2] e atualmente é o modelo mais promissor nos estudos das propriedades anômalas dos sistemas férmions pesados e de sistemas com flutuações de valência.

Neste trabalho nós usamos o modelo de Anderson para estudar o problema de duas impurezas interagentes num metal como aplicação de uma nova abordagem do método do Grupo de Renormalização Numérico desenvolvido por Wilson^[3]. Na seção 1.1.1 apresentaremos o modelo analisando todos os seus termos e discutindo alguns limites de

interesse. Também faremos uma revisão da evolução e variações do modelo e discutiremos algumas características importantes. Na seção 1.2 faremos uma revisão de estudos e aplicações do modelo. Finalmente, na seção 1.2.1 faremos uma discussão do modelo de Anderson aplicado a sistemas de férmions pesados, apresentando as principais características desses sistemas.

1.1.1 Apresentação do modelo

Momentos magnéticos localizados ocorrem em metais não magnéticos contendo impurezas iônicas com camadas de valência interna (orbitais d ou f incompletos). Os orbitais de valência são blindados por orbitais mais externos completamente cheios. Exemplos de impurezas desse tipo são os metais de transição, os lantanídeos e actinídeos.

Para descrever esse tipo de sistema, Anderson^[1] supôs que o metal hospedeiro não magnético poderia ser representado por uma banda de elétrons de condução com estados de Bloch com energia ϵ_k e momentum k . O nível acrescentado pela impureza magnética é caracterizado pela energia do orbital d (f) $\epsilon_{d\sigma}$, com degenerescência de spin σ . No metal real os elétrons de condução consistem de elétrons de camadas s ou p . A banda de condução pode ser suposta simétrica em torno do zero de energias, colocada no nível de Fermi. A impureza é um nível separado da banda de condução—as autofunções são ortogonais.

O modelo introduz a possibilidade de transições banda de condução-impureza através da hibridização entre as funções de onda s dos elétrons de condução e d (ou f) dos orbitais das impurezas. A hibridização, ou taxa de transição, é $V_{kd}^2 = \Gamma/\pi\rho(\epsilon)$, onde Γ é a largura de hibridização e $\rho(\epsilon)$ é a densidade de elétrons de condução por spin. Outro aspecto importante do modelo é a repulsão Coulombiana U entre elétrons de spins opostos que ocupam o mesmo

Figura 1.1: Modelo de Anderson de uma impureza, com correlação Coulombiana U entre elétrons de spins diferentes ocupando o mesmo orbital na impureza. Os orbitais localizados da impureza são tipo d ou f . A interação do orbital com a banda de condução ocorre via hibridização, V .

orbital na impureza, a qual reduz a probabilidade da dupla ocupação do orbital da impureza.

Se a energia ϵ_d for negativa a ocupação simples é favorecida, possibilitando a formação de momento magnético. O Hamiltoniano que descreve o modelo de Anderson é

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \epsilon_d \sum_{\sigma} d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + U d_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow} d_{\downarrow}^\dagger d_{\downarrow} + V \sum_{k\sigma} (c_{k\sigma}^\dagger d_{\sigma} + h.c.). \quad (1.1)$$

onde o operador $c_{k\sigma}^\dagger$ cria um elétron de condução com momentum k e spin σ , enquanto $d_{\sigma}^\dagger$ cria uma partícula no orbital localizado da impureza com spin σ . O modelo é representado, de forma esquemática, na figura 1 com energia da impureza colocada acima do nível de Fermi por conviniência.

Por causa do caráter interno das camadas d e f os efeitos de correlação Coulombiana entre banda de condução e orbital da impureza, muito pequenos, são desprezados. O termo de hibridização representa uma interação de troca onde banda de condução e orbital de impureza compartilham as mesmas partículas, dessa forma, as partículas passam tempo finito no orbital reduzindo a possibilidade de formação de estado magnético. Esse termo [?] independe do número quântico azimutal do orbital e em geral é tratado como uma constante, independente da energia ou vetor de onda. Em metais, a hibridização, em geral, é pequena comparada com a correlação Coulombiana; para a energia do orbital negativa ($\epsilon_d < 0$), a relação entre banda e correlação determina se o estado fundamental é magnético ou não. A hibridização, junto com a correlação entre banda e impureza, é responsável por flutuações de valência.

O Hamiltoniano proposto por Anderson continha inicialmente apenas a degenerescência de spin no orbital da impureza, mas é fácil estendê-lo para levar em conta a degenerescência orbital das camadas d e f . Outros termos ainda podem ser incluídos no modelo para descrever um sistema mais realístico, como por exemplo campo cristalino e interações entre dois elétrons arbitrários de orbitais diferentes. Também pode ser incluído o termo de interação Coulombiana entre impureza e banda de condução. Sua forma estendida para descrever um rede de momentos localizados, o modelo de Anderson periódico (ou mesmo o de múltiplas impurezas) é muito importante para descrever propriedades de férmions pesados.

É interessante observarmos casos limites do modelo de Anderson. No limite onde a largura do nível do orbital localizado é muito menor que a interação Coulombiana ($\Gamma \ll U$ e $\Gamma \ll |\epsilon_d|$), podemos grosseiramente desprezar a hibridização V . O nível é então ocupado pelo menos por um elétron, se $\epsilon_d < 0$ (isto é, abaixo do nível de Fermi). Quando o nível está duplamente ocupado, sua energia é $2\epsilon_d + U$. Se esta for negativa: os momentos magnéticos dos elétrons se compensarão mutuamente, e a impureza será não magnética. Se $2\epsilon_d + U > 0$ o nível será ocupado por apenas um elétron e a impureza será magnética.

Outro caso limite ocorre quando um nível ressonante é formado no nível de Fermi e a

largura da hibridização é muito maior que a interação Coulombiana, $\epsilon_d, U \ll \Gamma$. Nesse caso a impureza é parcialmente ocupada por spins $1/2$ e $-1/2$, ao mesmo tempo. Portanto, a impureza é não magnética; apenas flutuações no número de ocupação para spins diferentes podem resultar em um momento magnético de curto tempo de vida. Esse fenômeno é conhecido como Flutuação de Spins Localizados.

Quando a energia do estado duplamente ocupado é nula, $2\epsilon_d + U = 0$, e a banda é semi-preenchida, o modelo de Anderson é simétrico em relação ao nível de Fermi, i.e., o Hamiltoniano possui simetria partícula-buraco. O modelo torna-se invariante frente à transformação $c \rightarrow c^\dagger, d \rightarrow d^\dagger$. Existe um operador, o qual será discutido mais adiante, relacionado com essa simetria, que comuta com o Hamiltoniano. Esse operador, cuja componente z é a carga tradicional, obedece as regras de comutação de spin $1/2$.

O modelo de Anderson original considera apenas uma impureza interagindo com uma banda de condução, aproximação válida para concentrações menores que 1%. Para concentrações acima desse valor interações impureza-impureza tornam-se importantes e o sistema pode ser descrito por uma generalização do modelo.

Ligas magnéticas diluídas apresentam um mínimo na resistência em baixas temperaturas, conhecido como efeito Kondo. Esse mínimo não pode ser devido a fônons ou espalhamento por impurezas não magnéticas. Em 1964, Kondo^[4] demonstrou ser o mínimo na resistividade devido ao espalhamento de elétrons de condução pelas impurezas magnéticas. Ao contrário da contribuição de fônons o espalhamento magnético aumenta a medida que a temperatura cai: quando a temperatura vai diminuindo a interação magnética entre a impureza e os elétrons de condução torna-se mais importante. Os elétrons de condução de spin oposto ao da impureza tendem a formar uma nuvem em torno dela, de forma a eliminar o momento magnético naquela região. Como consequência, em temperaturas mais baixas a resistividade sentirá a contribuição de um centro espalhador não magnético. Atualmente, sabe-se que o estado fundamental desse sistema é não magnético, e devido à blindagem do spin da impureza a banda de condução sofre uma defasagem de $\pi/2$.

Figura 1.2: Modelo Kondo de uma impureza. Esse modelo apresenta um momento magnético de spin no orbital de impureza, o qual tem interação de troca, J , com a banda de condução.

Para estudar este sistema, Kondo^[4] analisou um modelo baseado na suposição de que se existe momento magnético na impureza, esse momento pode ser descrito por um operador de spin S e, desde que a impureza está inserida no metal, esse momento interage com os spins dos elétrons da banda de condução através de uma interação de troca J . O Hamiltoniano de Kondo é o seguinte:

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{kk'} J \vec{S} \cdot c_{k\mu}^\dagger \vec{\sigma}_{\mu\nu} c_{k\nu} \quad (1.2)$$

onde S é o spin da impureza e $\sigma_{\mu\nu}$ são as matrizes de Pauli. O modelo é representado na figura 2.

Particularmente, cabe observar que o modelo de Anderson é mais geral que o de Kondo. A existência de um momento magnético na impureza no modelo de Anderson ocorre quando a energia $\epsilon_d < 0$ e $U \gg |V|$. Através da transformação de Schrieffer-Wolf^[28], o modelo de Anderson neste limite se reduz ao de Kondo com uma interação de troca sempre negativa

da forma

$$J = 2V^2U/\epsilon_d(\epsilon_d + U). \quad (1.3)$$

Nesse trabalho nos deteremos em analisar o modelo de Anderson nessa região de parâmetros, onde ele se reduz ao modelo Kondo.

Com o Hamiltoniano (1.2) acima, Kondo calculou a resistividade usando teoria de perturbação até segunda ordem em J . Ele encontrou não só que a resistividade $\mathcal{R}(T)$ cresce, mas divergia logaritmicamente com a temperatura.

$$\mathcal{R}(T) \sim \frac{S(S+1)(J/N)^2}{[1 - 2(J/N)\rho \ln kT/D]^2}, \quad (1.4)$$

onde J é a interação entre o spin da impureza com a banda, ρ é a densidade de estados na banda próximo ao nível de Fermi, S é o spin da impureza e N é o número de elétrons interagentes com a impureza. A temperatura característica na qual ocorre a divergência é denominada Temperatura de Kondo T_k . Ela indica que a interação tornou-se importante e os elétrons de condução passam a neutralizar o momento magnético. A temperatura Kondo, segundo a Referência [23], é dada por

$$T_k = 0.85(|\rho J|)^{1/2} e^{1/\rho J} + \mathcal{O}(\rho J). \quad (1.5)$$

Todas as propriedades—resistividade, susceptibilidade, calor específico, etc.—escalam com a temperatura T_k . Em particular, T_k indica a passagem de um comportamento tipo Curie (sistema com impureza magnética) para tipo Pauli (impureza integrada na banda) na susceptibilidade magnética.

O processo de blindagem do momento magnético na impureza eleva a densidade de elétrons em torno da impureza, o que provoca uma defasagem dos estados de Bloch e um deslocamento nos níveis de energia. A defasagem obedece a regra de soma de Friedel e no problema Kondo é $\pi/2$, a temperatura nula.

No Hamiltoniano de Kondo podemos observar que a impureza é ocupada por um elétron, e portanto existe um momento magnético localizado. O número de ocupação na impureza

é inteiro. No modelo de Anderson, mesmo no caso limite de $V \ll U$ e $\epsilon_d < 0$, quando a ocupação por um elétron é favorecida, há flutuações na ocupação do orbital. Isso ocorre porque ainda existe hibridização, embora muito pequena. Por causa da equivalência, estes dois modelos aparecem sempre juntos nos trabalhos sobre impurezas magnéticas em metais não magnéticos, de forma que muitos resultados obtidos para um modelo valem para o outro, claro, dentro dos limites da equivalência.

1.2 Estudos e Aplicações

Por fornecer uma descrição formal das condições para existência de momentos magnéticos localizados, o modelo de Anderson se tornou importante para estudos de sistemas não magnéticos com impurezas magnéticas localizadas, sendo por isso objeto de numerosos trabalhos. Atualmente é um dos principais modelos utilizados nos estudos de compostos de férmions pesados, de valência flutuantes e de óxidos supercondutores. O modelo é usado para calcular propriedades dinâmicas e termodinâmicas destes sistemas. Nesta seção faremos uma revisão dos resultados fundamentais para o Hamiltoniano de Anderson de uma impureza e discutiremos algumas de suas aplicações e técnicas usadas para sua diagonalização.

Para estudar o modelo que leva seu nome, Anderson^[1] usou o método de Hartree-Fock, o qual fornece resultados exatos apenas no limite de $V^2 \gg U$, no caso $V^2 \leq U$ fornecendo um estado fundamental magnético. Como já mencionado acima a aplicação de métodos perturbativos ao modelo de Anderson, e também ao modelo Kondo^[4] encontram divergências inesperadas, em temperaturas muito baixas, o que causou grande interesse teórico no estudo de ligas magnéticas diluídas. A partir de então vários outros métodos foram usados; em

particular Yosida e colaboradores^[6], usando método variacional, e Takano e Ogawa^[7], usando teoria de campo médio, encontraram corretamente um estado fundamental não magnético, com uma susceptibilidade de Pauli em baixas temperaturas ($\chi = C$) para o modelo Kondo.

Um completo entendimento do estado fundamental, e de todo o problema Kondo, só foi obtido mais tarde por Wilson^[3]. Ele introduziu o método de Grupo de Renormalização Numérico (GRN) e o aplicou ao Hamiltoniano Kondo. O método foi o primeiro a fornecer um resultado quantitativo para propriedades físicas do modelo Kondo. Wilson mostrou que a susceptibilidade passa de uma lei de magnetismo de Curie em altas temperaturas, com correções perturbativas, para um magnetismo de Pauli em baixas temperaturas. A passagem entre as duas regiões é caracterizada pela temperatura de Kondo T_k que define a escala de energia característica do modelo. Os cálculos de GRN mostram que o momento magnético eficaz, dado pela equação

$$\mu_{ef}^2(T) = g\mu_B T \chi(T), \quad (1.6)$$

anula-se quando T tende a zero, e que esse momento obedece a relação de escala

$$\mu_{ef}^2(T) = F(T/T_k) \quad (1.7)$$

sendo F uma função universal.

O GRN foi logo depois empregado no estudo da susceptibilidade do modelo de Anderson^[22]. Esse estudo estabeleceu três regimes de parâmetros distintos para o sistema com alta correlação Coulombiana : (a) região de impureza vazia ($\epsilon_d \ll \Gamma$); (b) região de valência mista ($|\epsilon_d| \leq \Gamma$); (c) região Kondo ($-\epsilon_d \gg \Gamma$). Na região Kondo a susceptibilidade do modelo de Anderson é praticamente igual à do modelo Kondo com uma temperatura Kondo efetiva.

Os resultados de Grupo de Renormalização Numérico para os modelos de Anderson e Kondo de uma impureza foram reforçados com a solução exata obtida usando-se o *Bethe Ansatz* ^[8], e outras técnicas de cálculo, de forma que a termodinâmica dos dois modelos é

agora bem estabelecida.

Para cálculos das propriedades dinâmicas de ligas magnéticas diluídas ainda não existe método definitivo. O *Bethe Ansatz* não é ainda aplicável a este caso, de forma que métodos aproximativos são necessários. Os vários métodos utilizados até agora mostraram muito bons resultados em aplicações específicas. Métodos usando teoria de perturbação e esquema de desacoplamento por funções de Green falham em baixas temperaturas. Os que exploram a degenerescência dos orbitais d e f (expansão $1/N$), tais como: aproximação “no-crossing”^[32], “slave-boson”^[9] e o método variacional de Gunnarsson-Schönhammer^[34], são eficientes tanto para cálculos dinâmicos quanto termodinâmicos. Uma de suas limitações é não conseguir tratar a baixa degenerescência de spin de forma adequada. As tentativas de aplicação destes métodos a sistemas periódicos e de múltiplas impurezas não tem alcançado resultados satisfatório.

O método de Monte Carlo Quântico^[11] é capaz de realizar cálculos termodinâmicos e dinâmicos e pode tratar sistemas periódicos e de múltiplas impurezas. No entanto, sua eficiência é limitada por dois problemas crônicos: um é o “problema de sinal”, que tem sido contornado apenas para sistemas com simetria partícula-buraco. O outro problema é suas dificuldades em alcançar temperaturas relativamente baixas, os melhores resultados chegam um pouco abaixo de $10^{-2}T_k D$, como consequência não é possível determinar com segurança qual o estado fundamental.

As primeiras tentativas de aplicação do método de Grupo de Renormalização Numérico ao cálculo de propriedades dinâmicas empregou convoluções na escala logarítmica de energia^[12, 13, 29]. Com esse procedimento, os cálculos só são justificáveis na região de pontos fixos. Mas, recentemente porém, o GRN foi generalizado por Yoshida *et al*^[14], com a introdução de um segundo parâmetro de discretização, que permite ao método calcular propriedades dinâmicas em todo o espaço paramétrico.

1.2.1 férmions pesados

Nos últimos anos o modelo de Anderson, em sua versão periódica e de múltiplas impurezas, tem despertado grande interesse por suas possibilidades no esclarecimento das propriedades não usuais, ocorrendo em baixas temperaturas, de uma nova classe de materiais contendo Terras Raras. Uma dessas propriedades é a enorme massa efetiva adquirida pelos elétrons de condução, de forma que esta classe de materiais é conhecida como férmions pesados (heavy fermions). Nesta seção iremos apresentar as características desses materiais e discutir as possibilidades do modelo de Anderson de explicação de suas propriedades dinâmicas e termodinâmicas.

Quando a temperatura dos metais cai para zero seu calor específico tem um comportamento da forma $C(T)/T = \gamma + BT^2$, onde γ indica a contribuição eletrônica e B a contribuição devida a fônons. Em férmions pesados o coeficiente γ é centenas de vezes maior que nos metais comuns e para baixas temperaturas é muito maior que BT^2 , o qual pode ser desprezado em temperaturas menores que 20K. O valor de γ para elétrons livres é proporcional à massa efetiva dos elétrons. Obtém-se assim uma massa efetiva para o férmions pesados da ordem de 10^3 vezes maior que a massa dos elétrons livres [$\gamma = 1620 \text{ mJ}/(\text{molK}^2)$ para o CeAl_3 , um férmion pesado, enquanto $\gamma = 1.5 \text{ mJ}/(\text{molK}^2)$ para o Na, um metal comum]. Além do mais, nos férmions pesados, ao contrário dos metais comuns, γ depende fortemente da temperatura, i.e. , $\gamma = \gamma(T)$ mesmo para temperaturas próximo de zero.

Também, a susceptibilidade magnética $\chi(T)$ dos férmions pesados, apresenta uma dependência com a temperatura contrastante com a dos metais normais. Em altas temperaturas o comportamento obedece à lei Curie, devido aos íons magnéticos. Mas em temperaturas abaixo de 20K, a susceptibilidade fica relativamente estabilizada, variando pouco, e é pelo menos duas ordens grandeza maior que a susceptibilidade de Pauli (independente da temperatura), dos metais normais nesta região. A figura 3 mostra o gráfico do calor específico para 4 sistemas de férmions pesados. O calor específico é pelo menos duas ordens de grandeza maior que nos metais normais e depende sensivelmente da temperatura

Figura 1.3: Calor específico, a pressão constante, característico de alguns sistemas de férmions pesados. Os valores do calor específico desses sistemas são centenas de vezes maiores que nos metais comuns. Observe a forte dependência com a temperatura em temperaturas abaixo de 10K. Gráfico extraído da referência [20].

mesmo para temperaturas abaixo de 10K.

Uma outra propriedade de comportamento especial nos férmions pesados é a resistividade. Em altas temperaturas, a resistividade é pouco maior que a dos metais normais, mas ela cresce com o decréscimo da temperatura, ao contrário do que ocorre nos metais normais, e em temperaturas suficientemente baixas ela volta a decrescer na forma convencional, $\rho(T) = \rho(0) + \rho_{ee}T^2$, com um coeficiente ρ_{ee} , o qual mede a importância do espalhamento elétron-elétron, muito maior que no caso normal. ($\rho = 35\mu\Omega cm$ para o $CeAl_3$, enquanto $\rho_{ee} = 6.4 \times 10^{-5}\mu\Omega cm$ para o Na). Além disso a resistividade dos férmions pesados varia com a temperatura mesmo em torno de 10K, região onde nos metais normais ela já se tornou constante.

Dessas observações podemos ter uma visão do que ocorre fisicamente nesses materiais. A susceptibilidade magnética indica que, a altas temperaturas, existe uma coleção de momentos locais cujas magnitudes são próximos dos encontrados em átomos livres. A baixas temperaturas seu valor alto e quase independente da temperatura, indica um metal com alta densidade de estados nas vizinhanças do nível de Fermi; também o alto valor do calor específico sugere que elétrons de massa efetiva muito grande dominam o comportamento térmico em baixas temperaturas. Da resistividade conclui-se que, a baixas temperaturas o sistema se comporta como um líquido de Fermi formado por elétrons pesados, os quais são espalhados por impurezas, flutuações de spin localizados, e por eles mesmos, chegando, em alguns casos, a uma fase supercondutora. A transição entre o comportamento de altas e baixas temperaturas não ocorre bruscamente mas de forma razoavelmente suave, isto é, não ocorre uma transição de fase nem divergências das suas propriedades. No decorrer desta transformação, quando a temperatura decresce, os momentos locais desaparecem dando lugar a elétrons itinerantes pesados. O que parece ocorrer é que os momentos localizados passam a interagir cada vez mais fortemente com os elétrons de condução à medida que baixa a temperatura, de forma que os momentos magnéticos se anulam gerando elétrons itinerantes de massa efetiva muito grande. Os momentos localizados passam a fazer parte do líquido de Fermi. Existe uma temperatura T^* (temperatura de coerência) caracterizando a passagem entre os regimes de alta e baixa temperatura.

Comparando as propriedades dos sistemas férmions pesados e do modelo de Kondo, com energia da impureza abaixo do nível de Fermi, observa-se que algumas têm comportamentos muito semelhantes. Por exemplo, o momento magnético da impureza é compensado por elétrons de condução em baixas temperaturas. Poderia imaginar-se que os sistemas férmions pesados pudessem ser descritos por um modelo Kondo generalizado, uma vez que estes sistemas mostram alguns aspectos semelhantes ao de uma impureza multiplicado pela concentração de íons localizados. No entanto, em temperaturas muito próximas de zero, os elétrons de condução colidem, predominantemente de forma elástica, com os íons. As

funções de onda eletrônica se interferem coerentemente resultando em estados de Bloch. O modelo Kondo de uma impureza não consegue descrever efeitos dessa coerência a baixas temperaturas dos férmions pesados.

Em particular, um grande problema é o comportamento da resistividade. A baixas temperaturas nos dois sistemas, Kondo e férmions pesados, ela cresce com o decréscimo da temperatura até alcançar um máximo em determinada região próximo de zero. A partir daí o modelo Kondo dá resistividade constante com a temperatura T , enquanto nos férmions pesados, verifica-se experimentalmente que ela começa a cair com T^2 , uma característica de elétrons de Bloch na rede.

Por outro lado, a susceptibilidade no modelo Kondo apresenta um comportamento tipo Curie-Weiss por causa da compensação parcial dos momentos locais pelos elétrons de condução. Como nos férmions pesados os momentos magnéticos interagem entre si através dos elétrons de condução, interação tipo RKKY (Rudermann e Kittel, Kasuya, e Yoshida, [42]), haverá uma contribuição tipo campo molecular de Weiss para a temperatura de Curie-Weiss.

É observado que os efeitos de coerência aumentam com a concentração de íons magnéticos, indicando que a interação entre os momentos magnéticos localizados é importante. O passo inicial para estudar esses compostos é, então, calcular sistemas de duas impurezas interagentes. No Hamiltoniano Kondo original os elétrons são confinados ao orbital da impureza (o número de ocupação n_f no orbital é inteiro), mas, na realidade, os elétrons do orbital da impureza podem pular para a banda de condução, como ocorre no modelo de Anderson. Nesse caso, o número de ocupação, n_f , no orbital é não inteiro. Como consequência disso, os estados de férmions pesados a baixas temperaturas são superposições dos elétrons localizados e dos elétrons de condução. Portanto, é necessário trabalhar com um Hamiltoniano que permita um número variável de elétrons no orbital f e contenha uma grande quantidade de nível orbitais de impureza. Vê-se, assim, que o Hamiltoniano de Anderson periódico é um dos mais indicados, no entanto, resolvê-lo exatamente ainda não é

possível, mas um passo inicial é estudar o modelo de Anderson de duas impurezas.

Um ponto importante a se observar é que no caso de uma impureza no limite Kondo existe apenas uma escala de energia característica: todas propriedades físicas escalam com a temperatura de Kondo T_K . No caso da rede de impurezas magnéticas outras escalas irão aparecer. No de duas impurezas, como veremos no modelo de Anderson simétrico, a interação RKKY é uma delas.

1.3 Duas Impurezas Magnéticas em Metal não Magnético

Como vimos na seção anterior alguns comportamentos anômalos dos férmions pesados são atribuídos à competição entre o efeito Kondo e a interação indireta entre impurezas. Um dos grandes interesses dos estudos nesta área é determinar as regiões onde o efeito Kondo é estável ou instável, além disso descrever a transição entre estas regiões. O Hamiltoniano de Anderson Periódico (PAM) é um dos modelos mais promissores para descrição de férmions pesados, porém sua diagonalização ainda não é possível fora dos limites triviais. Com isso, procura-se estudar uma variação mais simples do modelo que mantenha as suas características mais importantes para determinação do estado fundamental dos férmions pesados. O modelo de Anderson com duas impurezas, embora pouco realista, é o mais simples modelo que mantém a competição entre o estado singlete Kondo, onde os spins das impurezas são compensados pelo spin efetivo devido aos elétrons da banda na vizinhança, e o estado singlete antiferromagnético, onde os spins das impurezas se compensam mutuamente alinhando-se antiparalelamente.

O modelo de duas impurezas será apresentado nesta seção que está dividida em três partes. Na primeira, faremos uma descrição das propriedades e características do modelo, discutiremos a competição RKKY e efeito Kondo, e discutiremos as leis de conservação e simetrias do modelo. Na segunda parte será feita uma breve revisão dos trabalhos teóricos da literatura. Na terceira, apresentaremos um resumo dos resultados obtidos neste trabalho.

1.3.1 Propriedades e características

O Hamiltoniano do modelo de Anderson de duas impurezas é escrito na forma

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \epsilon_d \sum_{\sigma i} d_{\sigma i}^\dagger d_{\sigma i} + U \sum_i d_{\uparrow i}^\dagger d_{\uparrow i} d_{\downarrow i}^\dagger d_{\downarrow i} + V \sum_{k\sigma i} (e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} c_{k\sigma}^\dagger d_{\sigma i} + H.c.). \quad (1.8)$$

onde $i=1,2$ especifica as impurezas e $\vec{R}_i = \pm \vec{R}/2$ é a posição.

Os níveis de impureza são degenerados com energia ϵ_d . O modelo é representado

Figura 1.4: Modelo de Anderson de duas impurezas mostrado de maneira esquemática ressaltando a interação entre impurezas através dos elétrons de condução. No limite de $U \gg \Gamma$, a existência de um momento magnético líquido é favorecido.

esquemáticamente na figura 1.4 para U muito maior que V , quando um momento magnético líquido é formado nas impurezas. A impureza interage com a banda de condução através da hibridização que resulta numa interação de troca (“exchange”) efetiva entre o spin da impureza e o spin dos elétrons de condução (ver seção anterior). Essa interação é sempre negativa. Como ressaltado na figura 1.4, se as impurezas estão razoavelmente próximas, elétrons de condução sofrem interação das duas ao mesmo tempo, de forma que as impurezas estarão interagindo entre si indiretamente. Esse tipo de interação é conhecida como RKKY [42]. A interação RKKY tem comportamento oscilante entre valores negativos e positivos, dependendo da distância R entre impurezas, como mostrado na figura 1.5. No limite de $R \rightarrow \infty$ a interação decai como $\cos(K_f R)/(K_f R)^3$. Em valores intermediários, outros termos contribuirão dando um caráter anisotrópico à interação RKKY.

Figura 1.5: Interação RKKY em função de $K_F.R$. Essa interação surge no modelo de Anderson em quarta ordem na hibridização V .

No modelo de Anderson, a interação RKKY está embutida no Hamiltoniano através da hibridização que gera uma interação efetiva entre impureza e elétrons de condução que, por sua vez, gera a interação indireta entre impurezas. A interação RKKY aparece em segunda ordem perturbativa no acoplamento efetivo impureza-banda e, portanto, em quarta ordem na hibridização do modelo de Anderson. Em alguns trabalhos, uma interação de troca entre spins das impurezas da forma $-I_0 \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$, com I_0 sendo a forma assintótica da RKKY, é adicionada ao modelo para simular fenomenologicamente a interação RKKY, de forma a se ter um maior controle sobre os parâmetros que determinam o comportamento do modelo.

O efeito da interação RKKY é ordenar os spins da impureza—ferromagneticamente se for positiva e antiferromagnética se for negativa—enquanto que o efeito Kondo tende a quebrar esse ordenamento através da blindagem dos spins. Essa competição entre o efeito Kondo e a interação RKKY determina regiões características no espaço de parâmetros onde a predominância de um ou outro leva a diferentes estados fundamentais. Se a temperatura Kondo T_K é muito maior que a o acoplamento RKKY (isto é, o acoplamento efetivo entre impureza e banda de condução é muito maior que o acoplamento entre impurezas) o momento magnético de cada impureza será compensado individualmente, o estado fundamental é singlete com as duas impurezas isoladas. Quando o acoplamento RKKY é muito maior que T_K , dois casos distintos ocorrem: se $I_{RKKY} < 0$ (caso antiferromagnético), as impurezas se acoplam, antes de sentir qualquer efeito tipo Kondo, e seus spins formam um estado singlete isolado da banda de condução; se $I_{RKKY} > 0$ (caso ferromagnético), as impurezas se acoplam num estado magnético tripleto, um efeito Kondo de dois estágios ocorre até a formação de um estado singlete com os spins dos elétrons da banda. Neste último caso, quando a temperatura vai diminuindo os graus de liberdade dos spins vão sendo eliminados em duas etapas: spin 1 para spin 1/2 seguido de spin 1/2 para spin 0.

Quando ocorre efeito Kondo, alguns elétrons da banda passam a blindar o spin das impurezas, o efeito na banda de condução é uma defasagem de $\delta = \pi/2$ nos níveis de energia de banda. Quando ocorre acoplamento antiferromagnético o isolamento das impurezas acopladas não provoca nenhuma mudança na banda de condução. Essa diferença de fase distingue o regime Kondo e o Antiferromagnético.

[htb]

O Hamiltoniano de Anderson de duas impurezas apresenta simetrias que podem ser exploradas na sua diagonalização. É fácil, observando a figura 1.4, ver que a troca da impureza 1 pela 2 não altera o problema. O problema tem simetria de inversão em relação ao ponto médio entre as impurezas. Quando as impurezas estão separadas por uma distância

Figura 1.6: Estado fundamental para uma forte interação RKKY negativa. As impurezas se acoplam antiferromagneticamente, anulando seus spins. A compensação dos spins desacopla as impurezas da banda de condução; nesse estado fundamental não ocorrem defasagens nos níveis de condução.

R infinita o Hamiltoniano pode ser separado em dois problemas de uma impureza. No entanto, quando R é finito os operadores de Wannier de condução centrados em torno das impurezas não são ortogonais e uma separação trivial não pode ser feita. Não obstante, a ortogonalidade pode ser obtida fazendo-se uma combinação linear par e outra ímpar dos estados de condução, tomando como origem o ponto médio entre as impurezas. Dessa forma, a parte quadrática do Hamiltoniano é separado em partes par e ímpar, enquanto o termo de interação na impureza passa a ser um mais complicado, considerando todos as possíveis correlações entre os operadores pares e ímpares compatíveis com a simetria de inversão de paridade. Uma outra simetria importante que pode ser vista do Hamiltoniano é a conservação de spin.

Podemos observar, também, que o Hamiltoniano conserva o número de partículas, ou seja, a carga é conservada. Quando o acoplamento entre impureza e banda de condução

Figura 1.7: Estado fundamental tipo Kondo. Os spins das impurezas são compensados pelos spins dos elétrons de condução. Essa forte interação banda-impureza causa uma defasagem de $\pi/2$ nos níveis de condução. No caso de forte acoplamento ferromagnético (figura b), os elétrons de condução blindam o tripleto de spin 1 das impurezas acopladas.

independe da energia, a hibridização entre impureza e banda de condução é constante; se $\epsilon_d = -U/2$ e se a banda for simétrica em relação ao nível de Fermi, então existe simetria partícula-buraco, isto é, partícula e buraco têm mesma energia em módulo. Nesse caso, pode-se mostrar que existe um operador chamado carga axial [26], o qual será discutido nos capítulos seguintes, que se conserva. Esse operador é também conservado no modelo simétrico de uma impureza.

1.3.2 Revisão da teoria

O problema de duas impurezas em metais começou a ser estudado ainda na década de 60 por Alexander e Anderson [35]. Eles usaram o método de Hartree-Fock da mesma forma como Anderson utilizou para estudar o caso de uma impureza. Com as dificuldades para resolução do problema Kondo, só surgiram trabalhos relevantes para o entendimento do problema a partir da década de 80. O primeiro deles foi o de Jayaprakash, Krishna-murthy e Wilkins [15]. Usando técnica de *scaling* perturbativo, eles calcularam a susceptibilidade magnética em função da temperatura para os casos limites da relação entre o acoplamento entre impurezas I_0 (veja seção anterior) e a temperatura Kondo T_K .

Para $|I_0|/T_K \gg 1$, eles encontraram que os spins das impurezas se acoplam antes de serem blindados pelos elétrons de condução. Se I_0 é negativo (antiferromagnético), as impurezas formam um estado um estado singleto ($S = 0$) e não ocorre efeito Kondo. Se I_0 é positivo (ferromagnético), as impurezas formam um estado tripleto ($S = 1$) ocorrendo efeito Kondo em dois estágios, com estado final impureza-banda com spin zero. Para o caso $|I_0|/T_K \ll 1$, eles encontraram que as impurezas são blindadas antes de qualquer tipo de acoplamento entre elas. Esses primeiros resultados para a susceptibilidade são ilustrados no gráfico esquemático obtido por Jayaprakash, Krishna-murthy e Wilkins [15], mostrado na figura 1.8.

A técnica usada por Jayaprakash *et al* [15] é baseada na observação de Hamiltonianos efetivos que descrevem o sistema para escalas de energias sucessivamente mais baixas. O resultado é eficiente em altas temperaturas, mas as equações de escala não têm precisão a temperaturas inferiores T_K . Mesmo assim, eles conseguiram observar o efeito Kondo de dois estágios, um efeito descrito por poucas técnicas.

Mudanças substanciais no quadro obtido por Jayaprakash *et al* [15], só ocorreram com os trabalhos de Jones e Varma [25] e Jones, Varma e Wilkins [26], em 87 e 88. Até então alguns trabalhos usando método de integral funcional [16, 18], teoria de perturbação [17, 36] e outras técnicas analíticas [19, 20], eficientes no regime de altas temperaturas, obtiveram resultados que apenas concordam com os resultados obtidos por Jayaprakash *et al* [15]. Cragg e Lloyd [21]

Figura 1.8: Resultado obtido por Jayaprakash *et al* para a susceptibilidade magnética no modelo de Anderson com duas impurezas. São obtidos resultados para os limites de acoplamento forte e fraco ferromagnético, além de forte acoplamento antiferromagnético. Devemos observar o efeito Kondo de dois estágios.

usaram o GRN para estudar o problema Kondo de duas impurezas no caso de separação zero e spin igual a um.

Usando o método de Grupo de Renormalização Numérico, Jones e Varma^[25] encontraram que, mesmo quando a interação entre as impurezas é muito menor que a energia Kondo, o comportamento assintótico em baixa temperatura é de um efeito Kondo correlacionado, isto é, as impurezas interagem mesmo quando $|I_0| \gg T_k$. Isto havia sido conjecturado por Abrahams e Varma através de teoria de perturbação de alta ordem.

Figura 1.9: Resultados obtidos por Jones *et al* para o modelo Kondo de duas impurezas. Devemos destacar o ponto crítico onde ocorre divergências no coeficiente do calor específico e na susceptibilidade *staggered*.

Jones *et al.* [26] também usaram o GRN e calcularam as susceptibilidades magnética e “staggered”, o calor específico, razão de Wilson-Sommerfeld e correlação entre impurezas em temperatura zero. Eles encontraram um ponto crítico no regime antiferromagnético caracterizado por divergências no coeficiente do calor específico e na susceptibilidade “staggered”. Este ponto crítico em $I_0 \simeq 2.4T_k$ separa a região de estado fundamental singleto Kondo da região singleto antiferromagnético. A razão de Wilson-Sommerfeld (definida como

$$R_W = \frac{\pi^2}{S(S+1)} \frac{k_B T}{(g\mu_B)^2} \frac{\chi_{imp}}{C_{imp}}, \quad (1.9)$$

onde S é o spin da impureza, μ é o magneton de Bohr e g o fator giromagnético eletrônico) varia fortemente com a relação I_0/T_k , e aproxima-se de zero no ponto crítico. Nesse ponto T_k varia em cerca de duas ordens de grandeza. Devido à falta de precisão perto do ponto crítico, eles apenas fizeram especulações sobre o comportamento da susceptibilidade magnética perto do ponto fixo. Eles indicaram que a susceptibilidade decaía neste ponto. Seus resultados são mostrados na figura 1.9.

A descoberta do ponto crítico gerou muitas controvérsias, pois na mesma época Fye, Hirsch e Scalapino^[24] usando Monte Carlo Quântico no Hamiltoniano de Anderson, e depois Fye e Hirsch^[27] no Hamiltoniano Kondo, não obtiveram nenhum indício de criticalidade. No entanto, seus resultados concordam com o quadro geral dos obtidos por Jones *et al.*^[26]. Além disso, Fye *et al.*^[24] encontraram que os spins das impurezas nunca chegam a formar um estado tripleto quando $T \rightarrow 0$ no regime ferromagnético. Fye e Hirsch^[27] encontraram que a correlação spin-spin das impurezas cresce com o decréscimo da temperatura até a temperatura T_k , quando passa a ser uma constante (diferente de zero). Os dois trabalhos usando Monte Carlo não conseguem distinguir os diferentes regimes de escala de Jayaprakash *et al.*^[15] para correlações ferromagnéticas. Isto ocorre por causa das limitações do método em baixas temperaturas.

A partir de então o entendimento do ponto crítico no problema de duas impurezas se tornou o principal objetivo dos trabalhos nesta área. Usando teoria de campo médio com "slave boson", Coleman^[33] estudou o Hamiltoniano de Anderson para impurezas desacopladas. Ele calculou propriedades termodinâmicas a partir de flutuações no campo médio e encontrou que o comportamento delas com a distância entre as impurezas depende da simetria da banda. Usando mesmo método Jones *et al.*^[30] estudaram as impurezas acopladas com correlação Coulombiana infinita. Estes encontraram para $T = 0$ dois possíveis regimes: um onde ocorre efeito Kondo e outro onde não ocorre. No regime Kondo as bandas de condução par e ímpar apresentam diferenças de fases diferentes, embora a soma das duas seja π . Nenhuma divergência foi encontrada nas propriedades termodinâmicas nestes dois

trabalhos.

Sakai *et al.*^[29] usaram o Grupo de Renormalização Numérico para calcular o espectro de excitação do modelo de Anderson de duas impurezas. Eles concluíram que o ponto crítico surge pelo fato de Jones *et al.*^[26] considerarem constantes de acoplamento independentes da energia. Naquele trabalho a função espectral é calculada usando-se uma convolução Gaussiana, procedimento que limita os cálculos a região de pontos fixos do método GRN. Saso^[37] usou o método variacional no problema Kondo e encontrou divergências apenas no limite de degenerescência orbital infinita. Ele observou algum aumento na susceptibilidade “staggered”, mas nada pôde ser tirado como conclusão.

O conflito entre GRN e Monte Carlo, duas técnicas essencialmente exatas, foi estudado por Affleck e Ludwig^[31] através de uma nova abordagem para teoria de campo conforme (com simetria partícula-buraco), que é exata na região de criticalidade. No problema de duas impurezas acopladas a regra da soma de Friedel diz que o deslocamento de fase (δ) total, devido aos dois canais, deve ser π , pois dois spins eletrônicos são compensados. Poderia ser esperado que os deslocamentos de fase fossem diferentes em cada canal. Por exemplo, o canal par poderia ter um deslocamento de fase maior que $\pi/2$, enquanto no canal ímpar o deslocamento de fase seria menor que $\pi/2$ e o deslocamento total seria π . Affleck e Ludwig mostraram que a simetria partícula-buraco e a simetria de tempo-reverso limitava o deslocamento de fase a zero e $\pi/2$ e que ocorria uma transição de fase entre as regiões de efeito Kondo ($\delta_p = \pi/2$; $p = \text{par, ímpar}$) e de acoplamento antiferromagnético ($\delta_p = 0$). Eles obtiveram, ainda, que os operadores que surgem devido ao não uso da aproximação $KR \rightarrow K_F R$ são irrelevantes.

Nos trabalhos de Jones *et al.*^[25, 26], usando GRN, a simetria partícula-buraco surge devido a aproximação $KR \rightarrow K_F R$ no acoplamento entre banda e impureza. Não foram possíveis cálculos fora dessa aproximação usando o método GRN até o término de nosso trabalho, de forma que também usamos esta aproximação. A generalização do método para cálculos nesse sentido tem sido feita por Oliveira e Lima^[43].

Em trabalho mais recente, Fye [41] examina mais detalhadamente o hamiltoniano Kondo de duas impurezas usando o método de Monte Carlo Quântico de forma mais controlada. Ele não observa nenhum comportamento anômalo nos seus resultados e conclui que as anomalias obtidas anteriormente [25, 26, 31] ocorrem devido a aproximação de acoplamento independente da energia ($KR \rightarrow K_F R$). Fye, em seu trabalho, conseguiu alcançar temperaturas baixas o suficiente para observar anomalias caso ocorressem. Para nós, parece claro que essa aproximação introduz artificialmente simetria partícula-buraco no Hamiltoniano. Não obstante, para efeito de comparação com o trabalho de Jones *et al*, e como teste da técnica de cálculo aqui introduzida, preferimos trabalhar na aproximação $KR \rightarrow K_F R$. O não uso dessa aproximação pode levar à quebra da simetria partícula-buraco, os operadores que surgem aparentam não serem irrelevantes, como mostram resultados obtidos recentemente [41, 43, 44].

Em recente trabalho, o modelo de Anderson de duas impurezas com correlação Coulombiana $U = \infty$ foi estudado por Andreani e Beck [40] usando uma nova abordagem via método variacional. Um termo de interação indireta da forma $-J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ é introduzido no Hamiltoniano. Os resultados para uma impureza, usados como teste reproduzem, grosseiramente o quadro qualitativo dos resultados do *Bethe Ansatz* [8]. De forma que seus resultados para temperaturas finitas se limitam à região $T < |E_f|$. Para duas impurezas seus resultados são qualitativamente semelhantes aos obtidos por Jayaprakash *et al* [15]. Nenhum efeito de um possível ponto crítico é encontrado. A função de correlação encontrada reproduz razoavelmente bem a obtida por simulações de Monte Carlo. Adicionalmente, eles encontram uma distância crítica $R_c \simeq 2.5/K_f$ separando dois regimes distintos: para $R > R_c$ a interferência entre as nuvens de blindagem em torno das impurezas é pequena e as propriedades escalam com a razão I_0/T_k , para $R < R_c$ a energia de ligação cresce exponencialmente e surge uma nova escala característica $\delta_- \sim \exp[\pi E_f/(3\Gamma)]$. Em distância zero as impurezas se acoplam ferromagneticamente e o spin total é compensado parcialmente. Os resultados do método variacional são muito sensíveis a escolha da base de funções de

onda, além de não poder-se estudar propriedades de líquidos de Fermi, de forma que esses resultados exigem comprovação por outros métodos.

1.3.3 Resumo dos resultados

Neste trabalho nós usamos uma nova abordagem do método de Grupo de Renormalização Numérico, para calcular a susceptibilidade magnética do modelo de Anderson de duas impurezas, no limite $U \gg V, D$ onde esse modelo se reduz ao de Kondo. O método permite cálculos em todas regiões dos parâmetros, no entanto, nós damos ênfase ao caso de forte correlação Coulombiana impureza-banda de condução, com a energia da impureza abaixo do nível de Fermi, caso que favorece a formação de momento magnético localizado na impureza. Nossa nova abordagem reduz o tempo computacional e o erro implícito do GRN, permitindo trabalhar com valores grandes do parâmetro de discretização Λ .

Nós obtemos o diagrama de fluxo de energias e calculamos a susceptibilidade magnética para vários valores do acoplamento entre impurezas. Os diagramas de fluxo de energia são obtidos para os seis estados de mais baixas energias, para 39 iterações. Nesses diagramas observamos que nas primeiras iterações os níveis estão sempre no ponto fixo de impurezas livres. Para forte acoplamento ferromagnético os níveis sentem a influência do operador marginal do ponto fixo de acoplamento forte $R = 0$, formando um patamar, na região intermediária do número de iterações. O ponto fixo de acoplamento forte impureza-banda é estável em baixas temperaturas para qualquer valor de acoplamento ferromagnético e pequenos acoplamentos antiferromagnéticos. Nesse ponto fixo os seis níveis são degenerados, o espectro apresenta uma defasagem de $\pi/2$. Para grandes acoplamentos antiferromagnéticos, os níveis são não degenerados e não há defasagem no espectro. Para

pequenos acoplamentos antiferromagnéticos entre impurezas existe uma fronteira entre valores que resultam num ponto fixo com estados degenerados e aqueles que resultam no ponto fixo de estados não degenerados, esta é caracterizada por operadores marginais que deixam os níveis em patamar, diferente daquele observado no acoplamento ferromagnético, caracterizando um ponto fixo instável. Esse é o ponto crítico observado por Jones *et al* [25, 26].

Nos gráficos da susceptibilidade para acoplamento ferromagnético observamos o efeito Kondo de dois estágios. O segundo estágio ocorre a temperatura cada vez mais baixa a medida que aumenta o valor de S , isto é, a medida que aumenta o acoplamento impureza-banda. Os dois estágios concordam bem com as curvas universais para spin 1 e spin 1/2 obtidos pelo método de *Bethe Ansatz* [8]. Os gráficos para acoplamento antiferromagnéticos obtidos com a introdução do termo de interação entre impurezas $-I_0 S_1 \cdot S_2$ e acoplamento entre impurezas via hibridização mostram rápida redução dos momentos magnéticos das impurezas. Essa redução é mais rápida quanto maior for o acoplamento.

Para acoplamento ferromagnético o efeito Kondo de dois estágios aparece. Cada estágio é comparado com resultados universais para uma impureza obtido pelo *Bethe Ansatz* [8], para o caso de $S = 1/2$ e $S = 1$. A concordância é muito boa.

Para o caso de acoplamento antiferromagnético ocorre uma competição entre o efeito Kondo e o acoplamento RKKY. Um ponto fixo instável separa a região de predominância de cada efeito. Para região onde ocorre efeito Kondo obtemos uma defasagem na banda de condução de $\pi/2$, enquanto que na região onde a interação RKKY domina nenhuma defasagem ocorre. O ponto crítico se manifesta nos diagramas de fluxo através de operadores irrelevantes, mantendo as energias num patamar constante, indicando susceptibilidade nula nesse ponto.

Capítulo 2

O Método de Grupo de Renormalização Numérico

O Método de Grupo de Renormalização numérico foi introduzido por K. G. Wilson^[3] para estudar o problema de uma impureza magnética em um metal não magnético, descrito pelo Hamiltoniano Kondo. Esse método conseguiu dar pela primeira vez uma descrição formal e precisa, inclusive quantitativamente, do efeito Kondo e estabelecer a natureza do estado fundamental do problema. O GRN consegue alcançar temperaturas arbitrariamente pequenas com precisão controlável. Logo foi usado com sucesso na resolução do modelo de Anderson de uma impureza ^[22]. Como observamos no capítulo introdutório, o método tem evoluído bastante permitindo, além de cálculos de propriedades termodinâmicas, o cálculo de propriedades dinâmicas, tornando-se uma das ferramentas mais poderosas no estudo de impurezas magnéticas em metais não magnéticos.

Para se obter uma visão mais abrangente sobre o método, e sua evolução, sugerimos para leitura a referência [39]. Neste capítulo vamos apresentar o método aplicado ao Hamiltoniano de Anderson de duas impurezas sem correlação entre elétrons no mesmo sítio de impureza. Nesse caso o Hamiltoniano pode ser separado em duas partes: par e ímpar. Cada parte é Hamiltoniano de uma impureza sem correlação, que pode ser diagonalizado analiticamente. Nosso objetivo é ilustrar, de uma maneira simples, a nova abordagem proposta neste trabalho comparando com resultados obtidos na forma anterior e na forma exata.

Como ilustração calcularemos a densidade espectral em teoria de perturbação, de primeira ordem, na correlação Coulombiana entre elétrons. Na seção 2.1 discutiremos as bases do método, como a precisão é controlada e as limitações de tempo computacional. Em seguida,

faremos a preparação do Hamiltoniano de Anderson para aplicação do método. Também discutiremos a discretização da banda de condução e a diagonalização do Hamiltoniano na via da nova abordagem. Finalmente na seção 2.2 apresentamos o cálculo da densidade espectral.

2.1 GRN no modelo de Anderson sem Correlação Coulombiana

O GRN é baseado na discretização da banda de condução e na geração de um Hamiltoniano iterativo definindo uma transformação de grupo de renormalização, onde a cada iteração escalas de energias diferentes são adicionadas. Nesta seção discutiremos o processo de discretização da banda de condução e a montagem da matriz Hamiltoniana para diagonalização. A matriz do Hamiltoniano sem correlação será diagonalizada para ilustração da nova abordagem da discretização.

2.1.1 Preparação do Hamiltoniano

Para usar o GRN no modelo de Anderson é conveniente reescrever o Hamiltoniano 1.8 numa forma mais adequada. Para isso iremos supor que toda a superfície de Fermi está contida numa banda de condução isotrópica com energia que vai de $-D$ a D , ou seja, a energia dos elétrons de condução é função apenas do módulo do vetor de onda $\vec{K}$ [$\epsilon(\vec{K}) = \epsilon(K)$]. Também iremos supor que a amplitude de hibridização independe da energia ($V_{\vec{K}} = V$). Isso significa que a banda de condução é composta de orbitais tipo s , consequentemente as impurezas com orbitais localizados tipo d ou f acoplam apenas com os estados de onda tipo

s. Essas aproximações não são cruciais como mostrado nas referências [3] e [22].

Então, tomando as impurezas localizadas na posição $\vec{R}_i = \pm \vec{R}/2 (i = 1, 2)$, o Hamiltoniano de Anderson fica na forma

$$H = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} + \epsilon_d \sum_{\sigma i} d_{\sigma i}^\dagger d_{\sigma i} + U \sum_i d_{1i}^\dagger d_{1i} d_{2i}^\dagger d_{2i} + V \sum_{k\sigma i} (e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}/2} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger d_{-i} + H.C.). \quad (2.1)$$

Para escrever esse Hamiltoniano numa forma mais conveniente, exploramos a simetria de inversão em torno do ponto médio entre as impurezas, para definir os seguintes operadores fermiônicos:

$$\begin{aligned} c_{e\sigma} &\equiv N_p(\epsilon) \sum_{\vec{k}} \cos(\vec{k}\cdot\vec{R}/2) \frac{c_{\vec{k}\sigma} + c_{-\vec{k}\sigma}}{\sqrt{2}} \delta[\epsilon - \epsilon(\vec{k})], \\ c_{o\sigma} &\equiv N_p(\epsilon) \sum_{\vec{k}} i \sin(\vec{k}\cdot\vec{R}/2) \frac{c_{\vec{k}\sigma} - c_{-\vec{k}\sigma}}{\sqrt{2}} \delta[\epsilon - \epsilon(\vec{k})], \\ d_{p\sigma} &\equiv \frac{d_{1\sigma} \pm d_{2\sigma}}{\sqrt{2}}, \end{aligned} \quad (2.2)$$

com

$$N_p^{-2} \equiv A_p^2 = 1/2 \left[1 \pm \frac{\sin kR}{kR} \right], \quad (2.3)$$

onde $p = e, o$ indica combinação linear par ou ímpar, respectivamente, dos operadores originais. N_p é a normalização obtida da condição: $\{c_{kp\sigma}, c_{kp\sigma}^\dagger\} = 1$.

Nós podemos ainda definir os seguintes operadores:

$$f_{0e} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\vec{k}} c_{ke\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\vec{k}} \cos \frac{\vec{k}\cdot\vec{R}}{2} \frac{1}{A_e(kR)} c_{\vec{k}\sigma}, \quad (2.4)$$

$$f_{0o} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\vec{k}} c_{ko\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\vec{k}} \sin \frac{\vec{k}\cdot\vec{R}}{2} \frac{1}{A_o(kR)} c_{\vec{k}\sigma}, \quad (2.5)$$

que podem ser interpretados como os estados de Wannier mais localizados em torno da impureza p . Dessa forma a impureza acopla apenas com os elétrons mais localizados em sua volta. Essa definição [25] é mais uma generalização do método apresentado por Wilson [3, 22].

Aqui uma aproximação importante é feita. Com as definições acima, o acoplamento entre banda de condução e impurezas via hibridização dependem da energia, nós tomaremos essa dependência constante calculada no nível de Fermi. Isto significa supor $A_p(kR) = A_p(k_F R)$. Segundo a referência [31], essa aproximação despreza apenas operadores irrelevantes. Sem ela o Hamiltoniano não comuta com o operador de carga axial, ou seja, não possui simetria partícula-buraco. Uma das conseqüências dessa aproximação é ser o acoplamento efetivo entre impurezas sempre ferromagnético.

Como já mencionamos, o tratamento do problema de duas impurezas magnéticas através do GRN sem a aproximação de constantes de acoplamento independentes da energia só se tornou possível após a elaboração desta tese. Sem a aproximação, não é possível usar o processo tradicional para definição dos operadores f_n da banda discretizada detalhada abaixo. Sem ela, é necessário uma generalização do GRN definindo-se um novo conjunto de operadores f partindo do operador 2.4, ou 2.5 (caso ímpar). As dificuldades dessa generalização residem no procedimento de ortonormalização e na inversão de definições como 2.4 e 2.5 para f_0 .

Usando as definições e aproximações expostas acima o Hamiltoniano pode ser reescrito na forma

$$H_A = \sum_{k\sigma p} \epsilon_k c_{k\sigma p}^\dagger c_{k\sigma p} + \epsilon_d d_p^\dagger d_p + 2V_p (f_{0p}^\dagger d_p + H.C.) + H(U). \quad (2.6)$$

onde

$$H(U) = U/2 [d_{e\uparrow}^\dagger d_{e\uparrow} d_{e\downarrow}^\dagger d_{e\downarrow} + d_{o\uparrow}^\dagger d_{o\uparrow} d_{o\downarrow}^\dagger d_{o\downarrow} + d_{e\uparrow}^\dagger d_{e\uparrow} d_{o\downarrow}^\dagger d_{o\downarrow} + d_{o\uparrow}^\dagger d_{o\uparrow} d_{e\downarrow}^\dagger d_{e\downarrow} + d_{e\uparrow}^\dagger d_{o\uparrow} d_{e\downarrow}^\dagger d_{o\downarrow} + d_{o\uparrow}^\dagger d_{e\uparrow} d_{o\downarrow}^\dagger d_{e\downarrow} + d_{e\uparrow}^\dagger d_{o\uparrow} d_{o\downarrow}^\dagger d_{e\downarrow} + d_{o\uparrow}^\dagger d_{e\uparrow} d_{e\downarrow}^\dagger d_{o\downarrow}]. \quad (2.7)$$

com $V_p = VA_p$, e $p = e, o$ indicando os operadores de paridade par ou ímpar, respectivamente. Devemos observar que o Hamiltoniano escrito desta forma assegura que qualquer manipulação no termo de condução não afete o acoplamento entre os elétrons de condução e as impurezas. Estamos, portanto, em condições de realizar a discretização da banda de condução, de maneira a tornar possível o uso do GRN. Para mostrar mais

claramente a nova abordagem do método, vamos trabalhar no restante deste capítulo desconsiderando o termo de correlação coulombiana.

2.1.2 Discretização

O Hamiltoniano de condução descreve todos os estados possíveis com energias dentro de um espectro contínuo de $-D$ a D , de forma que uma série infinita deve ser somada. A temperatura zero uma banda semi-preenchida terá todos os estados com energia ϵ_k negativa ocupados ($-D \leq \epsilon_k \leq \epsilon_{Fermi} = 0$), o seu estado fundamental. Qualquer acréscimo na temperatura gera uma infinidade de estados excitados. Isto provoca divergências logarítmicas, como observado por teoria de perturbação, sinalizando que uma escala de energias logarítmica é conveniente para se tratar o problema de impurezas no metal.

Com isso, o GRN propõe uma discretização logarítmica da banda de condução. Na forma generalizada^[14], a banda é dividida em intervalos de larguras proporcionais Λ^{-n-z} ($n = 0, 1, \dots$), como mostrado na figura 2.1a. O parâmetro Λ assume valores maiores que um e o parâmetro z varia entre 0 e 1. O espectro contínuo é reproduzido quando $\Lambda = 1$ e a discretização de Wilson^[3] quando $z = 1$.

O procedimento proposto por Wilson apresenta oscilações indesejáveis em baixas temperaturas quando propriedades termodinâmicas são calculadas com parâmetro de discretização $\Lambda > 3$. Como quanto menor Λ maior o tempo de computação, a limitação $\Lambda \leq 3$ restringe seriamente a aplicação do método a modelos com grande número de graus de liberdade. A técnica desenvolvida neste trabalho evita esse problema. Trabalhando com valores grandes de Λ , reduzimos por um fator de 1000 o tempo de cálculo computacional necessário para diagonalizar o modelo de Anderson de duas impurezas.

Como mencionado no capítulo introdutório o parâmetro z é indispensável para cálculos de propriedades de excitação, desde que essas propriedades envolvem excitações no espectro

Figura 2.1: Discretização das bandas de condução par e ímpar na nova abordagem. Para comparação mostramos na figura (b) a discretização feita no modo tradicional. A superposição das duas bandas mostra que, na nova abordagem, o contínuo é melhor recoberto.

contínuo da banda de condução. A variação do parâmetro entre 0 e 1 recobre todo o espectro contínuo.

Nossa proposta é dar a ele uma utilidade diferente. Nós usaremos parâmetros diferentes dependendo da paridade da banda de condução, i.e., $z = z_p$. O valor de z_p é definido como $z_p \equiv 1/n_p$, onde $n_e = 1$ e $n_o = 2$. A Figura 2.1.2a mostra a discretização em comparação com o método tradicional. [Para um sistema com N_i impurezas localizadas nos sítios da rede, com momentum $q = L\pi/(N_i R)$, o parâmetro $z = z_i$ estaria relacionado ao momentum, sendo definido como $z_i \equiv 1/n_i$ com $n_i = 1, \dots, N_i$]. A consequência disso será o espectro do Hamiltoniano de condução com mais energias que o obtido da forma anterior para o mesmo valor de Λ e número de iterações, ou seja, a banda de condução é melhor recoberta. Com isso, obtemos mais energias para o Hamiltoniano sem acarretar grande aumento no tempo de cálculo numérico. Portanto, poderemos obter mais precisão com o mesmo tempo computacional.

Ambas formas de discretização mantêm, embora de forma restrita, a invariância por uma transformação de escala da banda de condução. A banda é invariante por dilatação na escala por um fator Λ ($\epsilon \rightarrow \Lambda\epsilon$). A ampliação na escala por um fator Λ não impede que uma excitação que existia antes continue existindo, veja figura 2.1.2. (É interessante observar que numa discretização linear isto não ocorre). Esta invariância significa que o Hamiltoniano de condução mantém seus níveis espectrais após a transformação de escala. Esses níveis de energias invariantes definem *pontos fixos* na transformação de grupo de renormalização.

Com a discretização, apenas energias caracterizando cada intervalo são somadas no Hamiltoniano de condução. A transformação do Hamiltoniano para a forma discretizada é feita basicamente do mesmo modo como no caso de uma impureza^[14]. O Hamiltoniano é projetado em uma nova base discreta definida de forma a preservar a invariância de escala da banda de condução. A base é formada com os operadores de Fermi definidos, em cada intervalo da banda discretizada, da seguinte forma

$$a_{m\rho\sigma\pm} \equiv \pm(1 - \Lambda^{-1})^{-1/2} \int_{\pm D\Lambda^{-m-1-z}}^{\pm D\Lambda^{-m-z}} c_{k\rho\sigma} dk. \quad (2.8)$$

Figura 2.2: Ilustração da transformação de escala mantendo a banda invariante. A excitação $\Delta\epsilon$ continua existindo após a dilatação da escala de energia pelo fator Λ .

$$a_{p\sigma\pm} \equiv \pm(1 - \Lambda^{-1})^{-1/2} \int_{\pm D\Lambda^{-z}}^{\pm D} c_{kp\sigma} dk. \quad (2.9)$$

Evidentemente, a base formada por estes operadores não é completa com respeito a $c_{kp\sigma}$. Porém essa aproximação é controlada [22], uma vez que o parâmetro Λ pode ser variado. Em particular, quando $\Lambda \rightarrow 1$ o contínuo é recuperado.

O Hamiltoniano de condução escrito nessa base ainda não é conveniente pois existe uma série infinita a ser somada. Para resolver este problema construímos uma nova base de operadores fermiônicos $f_{np\sigma}$, formados a partir de combinações lineares dos operadores $a_{mp\sigma\pm}$ e $a_{p\sigma\pm}$, forçando uma forma tridiagonal para o Hamiltoniano de condução. Nessa construção, o operador $f_{0p\sigma}$ é o mesmo da equação 2.5 e os outros $f_{np\sigma}$ são definidos, segundo procedimento de Lanczos^[14], de maneira que o Hamiltoniano assume a forma

$$H_{bc} = \sum \epsilon_n^z (f_{n\sigma}^\dagger f_{n+1,\sigma} + H.C.) \quad (2.10)$$

onde os coeficientes ϵ_n^z são determinados recursivamente pela construção de Lanczos. Para grandes valores de n , os coeficientes ϵ_n^z decrescem rapidamente. Para uma relação de

dispersão linear o valor assintótico dos coeficientes é

$$\bar{\epsilon}_n^z = \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} \Lambda^{1-z-n/2}. \tag{2.11}$$

De forma que podemos determinar uma energia mínima ϵ de interesse para o problema e encontrar um valor N tal que $\epsilon_N^z \ll \epsilon$. Portanto, podemos truncar a soma no Hamiltoniano de condução, com um erro desprezível, somando N termos. Após o truncamento, a menor energia dos elétrons de condução será

$$\epsilon_{N-1}^z = (1 + \Lambda^{-1}) \Lambda^{-(N-1)/2+1-z/2}. \tag{2.12}$$

Então, por conveniência, definiremos o Hamiltoniano adimensional H_N truncado no N -ésimo termo, cujo menor coeficiente codiagonal é ≈ 1 ,

$$H_N \equiv \Lambda^{(N-1)/2} \sum_{\substack{n=0 \\ p=e,o}}^{(N-1)} \xi_{np} (f_{np}^\dagger f_{n+1,p} + H.C.) + \bar{V}_p (f_{0p}^\dagger d_p + H.C.) + \xi_d d_p^\dagger d_p \tag{2.13}$$

onde

$$\begin{aligned} \xi_{np} &= \frac{2}{(1 + \Lambda)} \Lambda^{z-1} \frac{\epsilon_{np}}{D} \\ \bar{V}_p &= \frac{2}{(1 + \Lambda)} \Lambda^{z-1} \frac{2V A_p}{D} \\ \xi_d &= \frac{2}{(1 + \Lambda)} \Lambda^{z-1} \frac{\epsilon_d}{D} \end{aligned} \tag{2.14}$$

A soma nos spins σ foram omitidos para não sobrecarregar a Eq. 2.14 com índices.

Nós temos agora dois Hamiltonianos isolados: par e ímpar, sem correlação entre elétrons de spins diferentes na mesma impureza. O processo de diagonalização é portanto igual ao caso de uma impureza, o qual será detalhado a seguir.

Handwritten notes:

$$V_p = \frac{(1 + \Lambda^{-1})}{2} \Lambda^{-(z-1)} \frac{D}{2} \bar{V}_p$$
$$V_p = V A_p$$
$$\Gamma_p = \frac{(1 + \Lambda^{-1})}{2} \Lambda^{-(z-1)} \bar{V}_p$$
$$V = \frac{\Gamma}{A}$$

$\Gamma = 0.54D$

2.1.3 Diagonalização

O processo de diagonalização do Hamiltoniano através do método GRN é feita de maneira iterativa, explorando as diferentes escalas de energia surgidas com a discretização. O Hamiltoniano pode ser escrito numa forma recursiva através da transformação de grupo de renormalização

$$\mathcal{T}[H_N] = H_{N+1}. \quad (2.15)$$

O Hamiltoniano é diagonalizado a cada iteração N e o resultado é usado para diagonalização na iteração seguinte. A diagonalização continua iterativamente até a obtenção de ponto fixo estável. Com isso, pode-se obter o diagrama de fluxo de energias do Hamiltoniano e gráficos de propriedades em função da temperatura ou da energia.

No entanto, quando inexistente correlação coulombiana, o tratamento de grupo de renormalização pode ser simplificado, a diagonalização iterativa não sendo necessária. Além disso, como o Hamiltoniano mantém apenas os termos quadráticos, pode ser diagonalizado analiticamente.

A forma quadrática permite reescrever o Hamiltoniano como um produto de matrizes

$$H_N = v^\dagger \mathcal{H} v, \quad (2.16)$$

onde $v^\dagger$ é o vetor formado pelos operadores fermiônicos e definido na forma

$$v^\dagger = (c_d^\dagger, f_0^\dagger, f_1^\dagger, \dots, f_N^\dagger), \quad (2.17)$$

e $\mathcal{H}$ é uma matriz quadrada $(N+2) \times (N+2)$ codiagonal cujos elementos não nulos são

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{1,2} &= \mathcal{H}_{2,1} = \sqrt{2\bar{V}_p} \Lambda^{(N-1)/2} \\ &\text{e} \\ \mathcal{H}_{n+1,n+2} &= \mathcal{H}_{n+2,n+1} = \sqrt{2\epsilon_{n-1}} \Lambda^{(N-1)/2} \\ \mathcal{H}_{1,1} &= \xi_d \end{aligned} \quad (2.18)$$

onde $n = 1, 2, \dots, N$. A matriz $\mathcal{H}$ é diagonalizada numericamente, obtendo-se $N + 2$ autovalores. Devido a simetria partícula-buraco [o Hamiltoniano é invariante sob a transformação $f_n \rightarrow (-1)^{n+1} f_n^\dagger$, com $n = 1, 2, \dots, N$], para cada autovalor η existe um simétrico $-\eta$. Quando N é par teremos os autovalores $\pm \eta_j^N$ com $j = 1, 2, \dots, (N + 1)/2$; quando ímpar um autovalor é zero. Na figura 2.3 mostramos o espectro de autovalores para uma relação de dispersão linear com os valores do parâmetro z igual a 0.5 e 1.0. Observe-se como o espectro contínuo é melhor recoberto que da forma anterior.

Figura 2.3: Espectro de energia do Hamiltoniano de condução par e ímpar diagonalizado. Para o Hamiltoniano par $z = 1.0$ e para o ímpar $z = 0.5$. O espectro contém mais energias que o obtido pelo método tradicional.

Como todo o processo de diagonalização das partes par e ímpar é o mesmo, já conhecido para o caso de uma impureza, o diagrama de fluxo e os pontos fixos [22] são os mesmos. O diagrama de fluxo apresenta dois patamares refletindo a existência de dois pontos fixos (figura 2.1.3). Esses pontos fixos refletem a invariância por escala da banda de condução, apenas quebrada pela largura de hibridização Γ . Para N pequeno, Γ é desprezível em relação às energias de condução, o ponto fixo é o Hamiltoniano de banda de condução livre. À medida que N cresce, as energias diminuem e Γ passar a influenciar fortemente os autovalores. Quando N é muito grande, a impureza está fortemente acoplada à banda, de forma que os níveis de condução sofrem um defasagem em relação à banda livre de $\pi/2$. Os pontos fixos para N par e ímpar são diferentes; portanto, são ponto fixos da transformação de grupo de renormalização $\mathcal{T}^2[H_N] = H_{N+2}$.

Figura 2.4: Diagrama de fluxo para o Hamiltoniano de Anderson de uma impureza (par, $z=1$), com energia $\bar{\epsilon}_d = 0$. A invariância de escala da banda de condução é quebrada pela energia de hibridização caracterizada por $\bar{\Gamma}_e$.

Os autovetores fornecem a matriz de transformação para a base onde o Hamiltoniano é escrito na forma diagonal. A relação entre os antigos e os novos operadores fermiônicos é dada por

$$\begin{aligned} a_{jp\sigma} &= u_{jp} d_{p\sigma} + \sum_{n=0}^N u_{jnp} f_{np\sigma} & \epsilon > 0 \\ b_{jp\sigma} &= \bar{u}_{jp} d_{p\sigma} + \sum_{n=0}^N \bar{u}_{jnp} f_{np\sigma} & \epsilon < 0 \end{aligned} \quad (2.19)$$

onde u_j são os elementos dos autovetores. O Hamiltoniano diagonalizado pode ser escrito como

$$H = \sum_{jp\sigma} \eta_{jp}^z a_{jp\sigma}^\dagger a_{jp\sigma} + \bar{\eta}_{jp}^z b_{jp\sigma}^\dagger b_{jp\sigma} \quad (2.20)$$

2.2 Cálculo da densidade Espectral

Para uma avaliação inicial da nova abordagem, e como ilustração, vamos agora calcular a função densidade espectral. A função espectral é interessante por ser medida diretamente em laboratório através das técnicas: Espectroscopia de Fotoemissão de Raio X (XPS), para energias negativas e Espectroscopia isocromática de "Bremstrahlung" (BIS), para energias positivas. Para o caso $U = 0$ a densidade espectral pode ser obtida exatamente, o que é útil para mostrar que os resultados numéricos são independentes do parâmetro de discretização. Aqui iremos calcular adicionalmente a densidade usando teoria de perturbação em $U \ll \Gamma$, para mostrar como evolui a abordagem.

2.2.1 Densidade Espectral para $U = 0$

Vimos no capítulo introdutório que a generalização do GRN através do parâmetro z possibilita o cálculo de propriedades de excitação^[14] em todo o espaço paramétrico, com precisão comparável às propriedades termodinâmicas. Em particular, a densidade espectral ρ_d é calculada através da integração no parâmetro z da densidade ρ_d^z . Nesse caso de $U = 0$ os resultados foram obtidos e analisados por Yoshida *et al*^[14]. A diferença aqui é a existência dos canais par e ímpar.

A regra de ouro de Fermi fornece a seguinte expressão para a densidade espectral em um determinado valor z :

$$\begin{aligned}\rho_d^z(\epsilon) &= \sum_F |\langle F | d_p | \Omega \rangle|^2 \delta(E_F^z - E_\Omega^z - \epsilon) \quad \epsilon > 0 \\ \rho_d^z(\epsilon) &= \sum_F |\langle F | d_p^\dagger | \Omega \rangle|^2 \delta(E_F^z - E_\Omega^z + \epsilon) \quad \epsilon < 0.\end{aligned}\tag{2.21}$$

onde $|\Omega\rangle$ é o estado fundamental caracterizado por $a_j^\dagger |\Omega\rangle = 0$, se $\epsilon < 0$, e $b_j |\Omega\rangle = 0$, se $\epsilon > 0$, sendo a e b operadores de destruição de partículas e buracos respectivamente. Os

estados $|F\rangle$ são os estados finais definidos como

$$\langle F| = \begin{cases} a_j^\dagger |\Omega\rangle & \text{if } \epsilon > 0 \\ b_j |\Omega\rangle & \text{if } \epsilon < 0 \end{cases} \quad (2.22)$$

Desde que a densidade espectral é calculada realizando-se a integração sobre z :

$$\rho_f(\epsilon) = \int_0^1 \rho_f^z(\epsilon) dz, \quad (2.23)$$

podemos obter a seguinte expressão para a densidade

$$\rho_d(\epsilon > 0) = \sum_{F\sigma} \left| \frac{\langle F|d_{p\sigma}|\Omega\rangle|^2}{\left| \frac{d(E_F^z - E_\Omega^z)}{dz} \right|} \right|_{(E_F^z - E_\Omega^z) = \epsilon} \quad (2.24)$$

Para $U = 0$, com Γ e ϵ_d muito menor a largura da banda, uma análise direta ^[14] mostra que

$$\rho_d(\epsilon) = \frac{2}{\pi} \frac{\bar{\Gamma}^2}{\bar{\Gamma}^2 + (\epsilon + \epsilon_d)^2}, \quad (2.25)$$

onde $\bar{\Gamma}_p = \Gamma_p/A_\Lambda$, com $A_\Lambda = \frac{(1+\Lambda^{-1}) \ln \Lambda}{2}$ e $\Gamma_{efp} = \pi V_p^2/D$, com $\bar{\Gamma}_p$ convergindo rapidamente para Γ_p quando $\Lambda \rightarrow 1$. Este resultado concorda com o exato a menos do fator de renormalização A_Λ . A densidade espectral para $U = 0$ é uma Lorentziana com meia largura Γ . A densidade pode ainda ser escrita em termos dos autovetores, com a energia $E_\Omega = 0$, como

$$\rho_{dp}(\epsilon < 0) = \left| \frac{u_{jp}^2}{\left| \frac{d(E_{jp}^2 - E_{\Omega p})}{dz} \right|} \right|_{E_{jp}^2 = \epsilon} \quad (2.26)$$

A figura 2.5 mostra a densidade espectral para diversas escolhas dos parâmetros z_e e z_o , com $U = 0$. Aparecem dois picos referentes as ressonâncias das duas partes do Hamiltoniano. Isso ocorre porque as larguras de hibridização efetiva Γ , ou larguras de ressonância são evidentemente diferentes, pois $V_e \neq V_o$. Nós observamos que, para $z_e = z_o$, se obtém a discretização tradicional. Nesse caso o valor da densidade espectral é diferente para cada parte, porém a energia é a mesma. Para $z_e \neq z_o$ os pontos aparecem em energias diferentes – no ponto médio entre os pontos de cada parte, para $z_o = z_e/2$. Portanto o espectro contínuo

Figura 2.5: Densidade espectral para o modelo de Anderson com duas impurezas sem correlação Coulombiana (os sinais +=parte par e - = impar), com $z_e = 1.0$ e $z_o = 0.5$. Aparecem duas ressonâncias Kondo de larguras diferentes, devido às larguras de hibridização Γ_e e Γ_o .

é melhor recoberto quando as duas partes se superpõem (por exemplo no caso $V_e = V_o$) ou se misturam. Também comparando os gráficos observamos que as discretizações não influenciam o comportamento da densidade.

2.2.2 Densidade Espectral para $U \ll \Gamma$

O objetivo desta seção é conferir a evolução da nova abordagem com a introdução de uma energia que põe em comunicação os dois canais do Hamiltoniano. Na verdade, para $U \ll \Gamma$, os Hamiltonianos par e ímpar estarão conectados apenas perturbativamente, uma vez que

os estados e autovalores não perturbados são ainda pares e ímpares. O cálculo perturbativo, cujos detalhes são apresentados no apêndice I, fornece

$$\rho_{dp}(\epsilon < 0) = \frac{[2\bar{u}_{jp}[1 - \sum_n \left[\frac{u_{jp}^2}{(E_{jp} + \bar{E}_{jp})} + \frac{\bar{u}_{jp}^2}{(E_{jp} + \bar{E}_{jp})} \right] \frac{U}{2} \sum_l (\bar{u}_{jp}^2 + \bar{u}_{jp}^2)]]^2}{\left| \frac{d}{dz} [2\bar{E}_{jp} + [\sum (\bar{u}_{jp}^2 + \bar{u}_{jp}^2) - 2\bar{u}_{jp}^2] \frac{U}{2} \sum_l (\bar{u}_{jp}^2 + \bar{u}_{jp}^2)] \right|} \Bigg|_{\mathcal{E}_n = \epsilon} \quad (2.27)$$

e

$$\rho_{dp}(\epsilon > 0) = \frac{[2u_{jp}[1 + \sum_n \left[\frac{\bar{u}_{jp}^2}{(E_{jp} + \bar{E}_{jp})} + \frac{u_{jp}^2}{(E_{jp} + \bar{E}_{jp})} \right] \frac{U}{2} \sum_l (\bar{u}_{jp}^2 + \bar{u}_{jp}^2)]]^2}{\left| \frac{d}{dz} [2\bar{E}_{jp} + [\sum (\bar{u}_{jp}^2 + \bar{u}_{jp}^2) - 2u_{jp}^2] \frac{U}{2} \sum_l (\bar{u}_{jp}^2 + \bar{u}_{jp}^2)] \right|} \Bigg|_{\mathcal{E}_n = \epsilon} \quad (2.28)$$

onde $\mathcal{E}_n$ é a expressão dentro derivada no denominador de cada equação.

A figura 2.2.2 mostra as densidades espectrais par (devido a $d_{e\sigma}$) e ímpar (devido a $d_{o\sigma}$). As densidades foram obtidas a partir equação acima, para vários valores da correlação coulombiana $\bar{U}$ e para energias $\epsilon > 0$ e $\epsilon < 0$. As densidades par e ímpar apresentam o mesmo comportamento. A evolução do parâmetro $\bar{U}$ provoca o surgimento de uma elevação na região próximo a $\log \epsilon = -2.5$, para energias positivas. Para energias negativas, observa-se uma depressão na mesma região de $\log \epsilon$, a qual aumenta com o crescimento de $\bar{U}$.

As densidades que obtemos apresenta um comportamento semelhante ao obtido na referência [29] para o caso com quebra da simetria partícula-buraco: um pico na densidade para energias positivas com uma correspondente depressão em energias negativas. Desde que nós usamos valores dos parâmetros tais que $\bar{U} \neq 2\bar{\epsilon}_d$ (modelo assimétrico, onde inexistente simetria partícula-buraco) tal comportamento assimétrico poderia ser esperado.

A manifestação da correlação coulombiana na densidade espectral é o surgimento de um pico na região próxima a $\bar{U}^{[29]}$. Nos nossos resultados aparece um pico na região de energias positivas, aparentando ser um manifestação desse tipo. Correspondente a esse pico, um rebaixamento na curva da densidade é observada em energias negativas. Esse comportamento é observado tanto para a parte par quanto para a ímpar, uma vez o método perturbativo gera equações iguais para as duas partes. A diferença entre as partes par e ímpar aparece nos valores das energias e autovetores, devido à diferença na hibridização Γ_p .

Figura 2.6: Densidade espectral para o modelo de Anderson com duas impurezas com $\bar{U} \ll \bar{\Gamma}$, obtido usando teoria de perturbação. Um pico em energias positivas e uma depressão em energias negativas caracterizam uma quebra na simetria partícula-buraco

Esses resultados podem ser comparados aos obtidos por Sakai *et al* [29], o que mostra que nossa técnica pode ser aplicada ao cálculo dessa propriedade.

Capítulo 3

O GRN aplicado ao Modelo de Anderson com duas impurezas correlacionadas

O modelo de Anderson de duas impurezas com correlação ainda não pôde ser diagonalizado analiticamente. Métodos aproximados e numéricos têm sido usados. O quadro geral dos resultados de estudos do modelo foi apresentado no capítulo introdutório. Como vimos, esse quadro ainda é incompleto, principalmente na região de baixas temperaturas. Neste capítulo usaremos a nova abordagem proposta neste trabalho para calcular, como ilustração, a susceptibilidade magnética do modelo.

Na seção 3.1 discutiremos mais profundamente a nova abordagem e suas conseqüências na diagonalização iterativa do método tradicional de Grupo de Renormalização Numérico. Discutiremos ainda o processo de redução do tamanho das matrizes a serem diagonalizadas usando as simetrias do problema. Na seção 3.2 apresentaremos o cálculo da susceptibilidade magnética e seu processo de cálculo numérico, enquanto que na seção 3.3 discutiremos o procedimento computacional com as linhas gerais da abordagem numérica.

3.1 A Nova Abordagem

O método de Grupo de Renormalização Numérico usa o fato de o Hamiltoniano poder ser escrito numa forma recursiva para diagonalizá-lo. A diagonalização é iterativa, observando-se que para uma determinada temperatura apenas uma faixa de energias contribui para a susceptibilidade magnética da impureza, e aproveitando-se a hierarquia de escalas discretas. Essa hierarquia, no método tradicional, é caracterizada pelo número de iterações N . (A energia diminui à medida que N cresce). Na nova abordagem, a hierarquia é caracterizada também pelo parâmetro z_p . Como vimos no capítulo anterior, p têm dois valores possíveis, conseqüentemente teremos duas escalas diferentes de energia em cada iteração. Nós definiremos $p = \text{alto}$ para indicar o valor de z associado a escala energia mais alta, e $p = \text{baixo}$ indicando o valor de z associado a escala mais baixa, na iteração N . Na iteração N , portanto, duas escalas de energia são possíveis: uma associada com z_{alto} e outra com z_{baixo} , de forma que o ciclo da transformação de grupo de renormalização só se completa após a entrada dessas duas escalas de energias.

Observando o Hamiltoniano 2.6 podemos escrever a relação recursiva, na nova abordagem,

$$\begin{aligned} H_{N+1,\text{alto}} &= H_{N,\text{baixo}} + \xi_N^{z_{\text{alto}}} (f_{N\text{alto}\sigma}^\dagger f_{(N+1)\text{alto}\sigma} + f_{(N+1)\text{alto}\sigma}^\dagger f_{N\text{alto}\sigma}) \\ H_{N+1,\text{baixo}} &= \Lambda^{1/2} H_{N+1,\text{alto}} + \xi_N^{z_{\text{baixo}}} (f_{N\text{baixo}\sigma}^\dagger f_{(N+1)\text{baixo}\sigma} + f_{(N+1)\text{baixo}\sigma}^\dagger f_{N\text{baixo}\sigma}), \end{aligned} \quad (3.1)$$

com $N = -1, 0, 1, \dots$, onde o Hamiltoniano inicial H_{-1} é o Hamiltoniano devido a impureza

$$\begin{aligned} H_{-1} &= \epsilon_d \sum_{p\sigma} d_{p\sigma}^\dagger d_{p\sigma} + U/2 [d_{\text{alto}\uparrow}^\dagger d_{\text{alto}\uparrow} d_{\text{alto}\downarrow}^\dagger d_{\text{alto}\downarrow} + d_{\text{baixo}\uparrow}^\dagger d_{\text{baixo}\uparrow} d_{\text{baixo}\downarrow}^\dagger d_{\text{baixo}\downarrow} + \\ &\quad d_{\text{alto}\uparrow}^\dagger d_{\text{alto}\uparrow} d_{\text{baixo}\downarrow}^\dagger d_{\text{baixo}\downarrow} + d_{\text{baixo}\uparrow}^\dagger d_{\text{baixo}\uparrow} d_{\text{alto}\downarrow}^\dagger d_{\text{alto}\downarrow} + \\ &\quad d_{\text{alto}\uparrow}^\dagger d_{\text{baixo}\uparrow} d_{\text{alto}\downarrow}^\dagger d_{\text{baixo}\downarrow} + d_{\text{baixo}\uparrow}^\dagger d_{\text{alto}\uparrow} d_{\text{baixo}\downarrow}^\dagger d_{\text{alto}\downarrow} + \\ &\quad d_{\text{alto}\uparrow}^\dagger d_{\text{baixo}\uparrow} d_{\text{baixo}\downarrow}^\dagger d_{\text{alto}\downarrow} + d_{\text{baixo}\uparrow}^\dagger d_{\text{alto}\uparrow} d_{\text{alto}\downarrow}^\dagger d_{\text{baixo}\downarrow}]. \end{aligned} \quad (3.2)$$

onde $p = \text{alto, baixo}$. $H_{0p\sigma}$ é o Hamiltoniano de acoplamento por hibridização

$$H_{0p\sigma} = \sum_{\sigma} V_p (f_{0p\sigma}^\dagger d_{p\sigma} + h.c.). \quad (3.3)$$

Na equação recursiva usamos, por economia, $f_{-1p\sigma} \equiv d_{p\sigma}$.

A diagonalização do Hamiltoniano $H_{N+1,alto}$ é então feita usando-se como ponto de partida os autovalores e autovetores do Hamiltoniano diagonalizado $H_{N,baixo}$; da mesma forma a do $H_{N+1,baixo}$ é feita usando-se os autovalores e autovetores $H_{N+1,alto}$. Com esse esquema toda a seqüência H_N é diagonalizada a partir de H_{-1} . Vamos agora descrever esse processo.

Os autoestados do Hamiltoniano inicial H_{-1} são formados a partir dos operadores $d_{baixo\sigma}$ e $d_{alto\sigma}$, resultando numa matrix 16×16 . Esta matrix pode ser diagonalizada analiticamente e seus autoestados e autovalores usados para construir a matrix seguinte. Na iteração $N = 0$, as próximas energias na hierarquia devem ser adicionados. Isto significa incluir o termo de hibridização com o operador $f_{0e\sigma}$. De uma maneira geral, seja $|\alpha, 0\rangle_{baixo}$ [$\alpha = 0, 1, \dots, (L_{Nbaixo} - 1)$], sendo um autoestado de $H_{N,baixo}$ de dimensão L_{Nbaixo} , com $\alpha = 0$ correspondendo ao estado fundamental. Desde que, o Hamiltoniano $H_{N,baixo}$ tem $4(N + 2) - 2$ operadores de Fermi, a dimensão L_{Nbaixo} da matrix é $2^{4(N+2)-2}$. [$H_{N,alto}$ tem $4(N + 2)$ operadores, a dimensão da matrix é $2^{4(N+2)}$]. Então, com a inclusão do operador $f_{N0\sigma}$, quatro novos estados são criados:

$$\begin{aligned} |0, \alpha, 0\rangle &= |\alpha, 0\rangle_{baixo} \\ |1, \alpha, 0\rangle &= f_{N0\uparrow}^\dagger |\alpha, 0\rangle_{baixo} \\ |2, \alpha, 0\rangle &= f_{N0\downarrow}^\dagger |\alpha, 0\rangle_{baixo} \\ |3, \alpha, 0\rangle &= f_{N0\uparrow}^\dagger f_{N0\downarrow}^\dagger |\alpha, 0\rangle_{baixo}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Por exemplo, a inclusão do operador $f_{0alto\sigma}$ gera, a partir dos autoestados de H_{-1} , uma matrix 64×64 , que pode ser diagonalizada numericamente. Após a diagonalização, novos estados serão formados da mesma maneira, incluindo o operador $f_{0baixo\sigma}$. A nova matrix terá dimensão 256×256 . Assim, os L_{Nbaixo} estados da iteração N_{baixo} irão formar $4L_{Nbaixo}$ estados que fornecerão uma base ortonormal para $H_{N+1,alto}$. A matrix Hamiltoniana de $H_{N+1,alto}$ nessa base é obtida calculando os elementos de matrix $\langle i', \alpha', N | H_{N+1,alto} | i, \alpha, N \rangle$.

Na verdade, todo o processo é semelhante ao método tradicional. A diferença reside no fato de a forma tradicional incluir os dois operadores, $f_{Nalto\sigma}$ e $f_{Nbai\sigma\sigma}$, obrigatoriamente ao mesmo tempo, já que ambos operadores estão relacionados com a mesma escala de energia ξ_N^z . Portanto, a matriz 16×16 passaria a uma 256×256 . Na nova abordagem, $f_{Ne\sigma}$ e $f_{No\sigma}$ se associam a energias diferentes. As matrizes passam de 16×16 para 64×64 e, depois, para 256×256 . Podemos observar que, para uma dada iteração, na fase alta do cálculo ($H_{N,alto}$) o método tradicional contém mais estados que a nossa abordagem. Além disso, o intervalo entre as escalas é maior no método tradicional; na nova abordagem, nós conseguimos mais escalas de energias, recobrimos melhor a banda de condução. Uma escala de energia intermediária é introduzida ao método tradicional, o que significa estar mais próximo do contínuo. Os detalhes sobre a diagonalização iterativa usando nossa abordagem são apresentados no apêndice II.

3.1.1 As simetrias

O número de estados, e, portanto, o tamanho da matriz Hamiltoniana, na diagonalização iterativa cresce na proporção de 4^N , de modo que rapidamente a memória de computador disponível para cálculo é exaurida. Assim, é necessário limitar o tamanho das matrizes a serem diagonalizadas. Primeiramente, podemos explorar as simetrias do Hamiltoniano (partícula-buraco, spin e paridade) já discutidas no capítulo introdutório. Estas conduzem a números quânticos que reduzem substancialmente as matrizes a serem diagonalizadas.

O Hamiltoniano 2.6 conserva o spin. O operador de spin total apropriado para esse Hamiltoniano é

$$\vec{S}_N = \frac{1}{2} \sum_{\substack{p=\epsilon,o \\ \mu,\nu}} d_{p\mu}^\dagger \vec{\sigma} d_{p\nu} + \frac{1}{2} \sum_{n,p,\mu,\nu} f_{np\mu}^\dagger \vec{\sigma} f_{np\nu}. \quad (3.5)$$

onde $\vec{\sigma}(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ são as matrizes de Pauli. O operador S^2 e S_z comuta com o Hamiltoniano, gerando dois números quânticos s e s_z .

Outra simetria do Hamiltoniano é a de partícula-buraco. O Hamiltoniano 1.14 é invariante sob a transformação: $f_{np\mu} \rightarrow (-1)^n (-1)^{\frac{1}{2}-\mu} f_{np\mu}^\dagger$ e $f_{np\mu}^\dagger \rightarrow (-1)^n (-1)^{\frac{1}{2}-\mu} f_{np-\mu}$.

Como observamos no capítulo anterior, essa simetria é assegurada com a aproximação que a hibridização efetiva não depende da energia [$V_p(k.R) = A_p(kR)V \rightarrow V_p(k_F R) = A_p(k_F.R)V$, o que significa um acoplamento entre impurezas independente da energia].

Com a simetria partícula-buraco é conveniente definir-se o operador J^2 , denominado carga axial, que comuta com o Hamiltoniano. Sua forma é a seguinte:

$$\begin{aligned} J_N^+ &= \sum_{p=\text{alto},\text{baixo}} d_{p\uparrow}^\dagger d_{p\downarrow}^\dagger + \sum_{n=0}^N \sum_{p=\text{alto},\text{baixo}} (-1)^n f_{np\uparrow}^\dagger f_{np\downarrow}^\dagger \\ J_N^- &= [J_N^+]^\dagger \\ J_N^z &= \frac{1}{2} \left[\sum_{p=\text{alto},\text{baixo}} d_{p\uparrow}^\dagger d_{p\downarrow} \right] - 1 + \frac{1}{2} \left[\sum_{n=0}^N \sum_{p=\text{alto},\text{baixo}} f_{np\uparrow}^\dagger f_{np\downarrow} \right] - 1 \\ J_N^2 &= \frac{1}{2} [J_N^+ J_N^- + J_N^- J_N^+] + (J_N^z)^2. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Devemos observar que a componente J_N^z é igual à carga normal, medida em relação ao estado fundamental da banda de condução. O operador $\vec{J}$ obedece as mesmas regras de comutação que o operador $\vec{S}$.

A última simetria que usaremos é a paridade P . Essa simetria inexistente, claro, no modelo de uma impureza sendo inerente ao caso de duas impurezas. A paridade é um operador unitário escalar cuja ação obedece a regra usual: o produto de dois estados eletrônicos ímpares formam um estado par, o produto de um estado par e um ímpar forma um estado ímpar e assim por diante. O estado singleto é um estado par e o tripleto um estado ímpar. Por exemplo, operador ímpar atuando no estado de vácuo forma um estado ímpar; da mesma forma o operador par formará um estado par.

Os autoestados do Hamiltoniano H_N são autoestados dos operadores: J^2, J_z, S^2, S_z e P , que rotularemos com os números quânticos correspondentes: j, j_z, s, s_z e p , respectivamente. Assim, ao construir os estados podemos classificá-los de acordo com j, j_z, s, s_z e p . Como não há elementos de matriz de H_N entre os estados com diferentes valores desses números quânticos, a diagonalização é feita apenas em cada subespaço (j, j_z, s, s_z, p) . No entanto, os autovalores independem, ainda, de j_z e s_z ; com isso usamos o teorema de Wigner-Eckart [45] para trabalhar com os elementos de matriz reduzidos: $\langle j, s, p || f_N^\dagger || j', s', p' \rangle$, no lugar

de $\langle j, j_z, s, s_z, p | f_N^\dagger | j', j_z, s', s_z, p' \rangle$. Este processo, além de reduzir o tamanho das matrizes, reduz o número de matrizes.

O Hamiltoniano inicial (3.2) é completamente diagonal na base (j, j_z, s, s_z, p) . Na tabela 3.1 mostramos seus autoestados com a notação de operadores e de números quânticos. Mostramos ainda suas energias antes e depois de tomarmos o caso do modelo simétrico $U = -2\epsilon_d$ e subtrairmos o estado fundamental. No Apêndice B apresentamos detalhes sobre a diagonalização iterativa.

Apesar das reduções do tamanho e número das matrizes permitidas pelas simetrias, calcular todos os estados de H_N para N grande é impossível por causa do crescimento exponencial do número de estados (4^N). É necessário limitar-se de alguma forma esse número.

A prática comum é levar em conta que, em baixas temperaturas, as maiores contribuições virão dos estados de mais baixas energias de H_N . Isto é, existe uma energia máxima E_{max} onde o fator de Boltzmann pode ser desprezado. Dessa forma, a cada diagonalização numérica os autoestados acima de E_{max} são abandonados. Quando H_N está em um ponto fixo da transformação de grupo de renormalização, o número de estados entre o menor valor da energia, que é da ordem de 1, e E_{max} é rigorosamente independente de N . Quando H_N está fora do ponto fixo, este número varia com N , porém muito pouco, e as matrizes diagonalizadas são essencialmente do mesmo tamanho.

	Estados	H_{-1}	$\overline{H}_{-1}$	$ 2j, 2j_z, 2s, 2s_z, p, r\rangle$
1	$ \Omega\rangle$	0	0	$ 2, -2, 0, 0, 0, 1\rangle$
2	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(d_{\text{alto}\uparrow}^\dagger d_{\text{alto}\downarrow}^\dagger + d_{\text{baixo}\uparrow}^\dagger d_{\text{baixo}\downarrow}^\dagger) \Omega\rangle$	$\overline{U} + 2\overline{\epsilon}_d$	$\overline{U}$	$ 2, 0, 0, 0, 0, 1\rangle$
3	$d_{\text{alto}\uparrow}^\dagger d_{\text{alto}\downarrow}^\dagger d_{\text{baixo}\uparrow}^\dagger d_{\text{baixo}\downarrow}^\dagger \Omega\rangle$	$2\overline{U} + 4\overline{\epsilon}_d$	$\overline{U}$	$ 2, 2, 0, 0, 0, 1\rangle$
4	$-d_{\text{alto}\uparrow}^\dagger(d_{\text{baixo}\uparrow}^\dagger d_{\text{baixo}\downarrow}^\dagger) \Omega\rangle$	$\overline{U} + 3\overline{\epsilon}_d$	$\overline{U}/2$	$ 1, 1, 1, 1, 0, 1\rangle$
5	$-d_{\text{baixo}\uparrow}^\dagger(d_{\text{alto}\uparrow}^\dagger d_{\text{alto}\downarrow}^\dagger) \Omega\rangle$	$\overline{U} + 3\overline{\epsilon}_d$	$\overline{U}/2$	$ 1, 1, 1, 1, 1, 1\rangle$
6	$-d_{\text{alto}\downarrow}^\dagger(d_{\text{baixo}\uparrow}^\dagger d_{\text{baixo}\downarrow}^\dagger) \Omega\rangle$	$\overline{U} + 3\overline{\epsilon}_d$	$\overline{U}/2$	$ 1, 1, 1, -1, 0, 1\rangle$
7	$-d_{\text{baixo}\downarrow}^\dagger(d_{\text{alto}\uparrow}^\dagger d_{\text{alto}\downarrow}^\dagger) \Omega\rangle$	$\overline{U} + 3\overline{\epsilon}_d$	$\overline{U}/2$	$ 1, 1, 1, -1, 1, 1\rangle$
8	$d_{\text{alto}\uparrow}^\dagger \Omega\rangle$	$\overline{\epsilon}_d$	$\overline{U}/2$	$ 1, -1, 1, 1, 0, 1\rangle$
9	$d_{\text{baixo}\uparrow}^\dagger \Omega\rangle$	$\overline{\epsilon}_d$	$\overline{U}/2$	$ 1, -1, 1, 1, 1, 1\rangle$
10	$d_{\text{alto}\downarrow}^\dagger \Omega\rangle$	$\overline{\epsilon}_d$	$\overline{U}/2$	$ 1, -1, 1, -1, 0, 1\rangle$
11	$d_{\text{baixo}\downarrow}^\dagger \Omega\rangle$	$\overline{\epsilon}_d$	$\overline{U}/2$	$ 1, -1, 1, -1, 1, 1\rangle$
12	$d_{\text{alto}\uparrow}^\dagger d_{\text{baixo}\uparrow}^\dagger \Omega\rangle$	$2\overline{\epsilon}_d$	0	$ 0, 0, 2, 2, 1, 1\rangle$
13	$\frac{1}{\sqrt{2}}(d_{\text{alto}\uparrow}^\dagger d_{\text{baixo}\downarrow}^\dagger - d_{\text{baixo}\uparrow}^\dagger d_{\text{alto}\downarrow}^\dagger) \Omega\rangle$	$2\overline{\epsilon}_d$	0	$ 0, 0, 2, 0, 1, 1\rangle$
14	$d_{\text{alto}\downarrow}^\dagger d_{\text{baixo}\downarrow}^\dagger \Omega\rangle$	$2\overline{\epsilon}_d$	0	$ 0, 0, 2, 2, 1, 1\rangle$
15	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(d_{\text{alto}\uparrow}^\dagger d_{\text{alto}\downarrow}^\dagger - d_{\text{baixo}\uparrow}^\dagger d_{\text{baixo}\downarrow}^\dagger) \Omega\rangle$	$2\overline{\epsilon}_d$	0	$ 0, 0, 0, 0, 0, 1\rangle$
16	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(d_{\text{alto}\uparrow}^\dagger d_{\text{baixo}\downarrow}^\dagger + d_{\text{baixo}\uparrow}^\dagger d_{\text{alto}\downarrow}^\dagger) \Omega\rangle$	$\overline{U} + 2\overline{\epsilon}_d$	$\overline{U}$	$ 0, 0, 0, 0, 1, 1\rangle$

Tabela 3.1: Autoestados e autovalores do Hamiltoniano inicial 3.2. O Hamiltoniano é diagonal na base determinada pelos números quânticos: j, j_z, s, s_z e p . Na tabela usamos a definição $\overline{H}_{-1} = H_{-1}(\overline{U} = -2\overline{\epsilon}_d) + \overline{U}$. Também definimos $p = 0$, se o estado tem simetria par, e $p = 1$ se sua simetria é ímpar. Por conveniência, multiplicamos os números quânticos que podem ser fracionários por dois. Devemos observar que as energias são degeneradas para diferentes j_z e s_z .

3.2 Cálculo da Susceptibilidade

Nesta seção apresentaremos o cálculo da susceptibilidade magnética, a campo magnético nulo, usando o processo de diagonalização iterativo do Hamiltoniano 2.6 descrito na seção anterior. Mostraremos como o número de iteração N está ligado à temperatura. Este cálculo é o teste final da nova abordagem, e como veremos, o resultado é excelente.

A susceptibilidade magnética a campo nulo é calculada a partir de sua definição em Física Estatística:

$$\chi = \left. \frac{\partial}{\partial B} \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial B} \right|_{B=0} \quad (3.7)$$

onde Z é a função de Partição definida como: $\text{Tr} \exp \beta(H + \mu B S_z)$, B é o campo magnético, μ o magneton de Bohr e S_z a componente z do spin total, com $\beta = 1/(k_B T)$. Nós estamos interessados na susceptibilidade da impureza, de forma que é necessário subtrair a contribuição da banda de condução. Isso ajuda, ainda, a tornar o resultado independente da discretização, uma vez que a contribuição da parte discretizada—a banda de condução—é subtraída. Então, usando a equação para H_N 2.6 temos

$$\chi_{\text{imp}}(T) = \frac{(g\mu_B)^2}{k_B T} \lim_{M \rightarrow \infty} \left[\frac{\text{Tr} S_{Mz}^2 \exp -\bar{\beta}_M H_M}{\text{Tr} \exp -\bar{\beta}_M H_M} - \frac{\text{Tr} (S_{Mz}^0)^2 \exp -\bar{\beta}_M H_M^0}{\text{Tr} \exp -\bar{\beta}_M H_M^0} \right] \quad (3.8)$$

onde H_N^0 é o Hamiltoniano de banda de condução livre, o qual é quadrático e pode ser diagonalizado conforme discutido no capítulo 2. Também usamos as definições:

$$\begin{aligned} \bar{\beta}_M &\equiv \beta \left[\frac{(1 + \Lambda^{-1})}{2} \right] D \Lambda^{-(M-1)/2} \\ &= \left[\frac{(1 + \Lambda^{-1})}{2} \right] D \Lambda^{-(M-1)/2} \left[\frac{k_B T}{D} \right]^{-1} \end{aligned} \quad (3.9)$$

$$\tilde{S}_M^0 = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{M-1} f_{n\mu}^\dagger \tilde{\sigma} f_{n\nu} \quad (3.10)$$

Como vimos anteriormente a menor escala de energia em H_M é da ordem de 1, de forma que o limite $M \rightarrow \infty$ significa considerar valores de M grande o suficiente para fazer $\bar{\beta}_M \ll 1$. Assim, se calcularmos o lado direito da equação (3.8) substituindo $M \rightarrow \infty$ por um determinado N , finito o erro cometido será da ordem de $\bar{\beta}_N/\Lambda$ [3, 22]. Assim, para um

determinado número pequeno fixo $\bar{\beta}$, podemos escolher número N tal que $\bar{\beta}_N \cong \bar{\beta}$, e se calcularmos ξ usando H_N , estaremos cometendo um erro da ordem de $\bar{\beta}/\Lambda$, em toda uma seqüência de temperaturas T_N determinados pela condição

$$T_N = D/k_B \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2} \Lambda^{-(N-1)/2} / \bar{\beta}. \quad (3.11)$$

Uma observação importante aqui é que o número N define uma escala logarítmica para a temperatura T_N . Valores grandes de N correspondem a temperaturas T_N pequenas em relação à largura de banda D .

A susceptibilidade magnética da impureza será calculada, conseqüentemente, usando a expressão

$$\frac{k_B T_N}{(g\mu_B)^2} \chi_{imp}(T_N) \cong \left[\frac{Tr S_{Nz}^2 \exp -\bar{\beta} H_N}{Tr \exp -\bar{\beta} H_N} - \frac{Tr (S_{Nz}^0)^2 \exp -\bar{\beta} H_N^0}{Tr \exp -\bar{\beta} H_N^0} \right]. \quad (3.12)$$

Na seção anterior vimos que as energias dos autoestados $|j, j_z, s, s_z, p\rangle$ de Hamiltoniano H_N são independentes de j_z e s_z . Denotando essas energias como $E_N(j, s, p)$, o cálculo dos traços da equação anterior resultam

$$Tr \exp -(\bar{\beta} H_N) = \sum_{jsp} (2s + 1) Tr \exp -[\bar{\beta} E_N(j, s, p)] \quad (3.13)$$

$$Tr S_{Nz}^2 \exp -(\bar{\beta} H_N) = \sum_{jsp} \frac{1}{3} (2s + 1) s(s + 1) Tr \exp -[\bar{\beta} E_N(j, s, p)] \quad (3.14)$$

Finalmente estamos em condições de calcular a susceptibilidade magnética do Hamiltoniano de duas impurezas usando a nova abordagem do método de grupo de renormalização.

3.3 Procedimento Computacional

O objetivo dessa seção é descrever o procedimento numérico. Em cada iteração N , faz-se o seguinte: primeiro calculam-se os elementos de matriz de H_{Nalto} , diagonaliza-se a matriz na base $(j, j_z, s, s_z, p)_{Nalto}$, calculam-se os elementos de matriz invariante do operador $f_{Ne\sigma}$, atualizam-se os elementos de matriz invariante do operador $f_{No\sigma}$ nessa base e finalmente

calculam-se os elementos de matriz de H_{Nbaixo} . Este processo é repetido até alcançar o ponto fixo.

Todo o programa foi feito em linguagem C++ e rodado em estação de trabalho SUN SPARC 2 no IFQSC-USP. Nós usamos a energia máxima adimensional $E_{max} = 18$; as energias acima desse valor foram ignoradas (ver seção 3.1). O número de iterações foi $N = 39$, onde observamos estar no ponto fixo, dentro de uma precisão de 10^{-9} . O tempo de CPU necessário para cálculo da dependência térmica da susceptibilidade para dado conjunto de parâmetros do modelo ficou em torno de 1 hora e 15 minutos.

A matriz H_{-1} é completamente diagonal na base determinada pelos números quânticos (j, j_z, s, s_z, p) . Os autoestados mostrados na tabela 3.1 são usados para construir a base de estados para próxima iteração. Essa construção é feita, como mostrado de maneira geral pela tabela 3.2, com a ação do operador $f_{0e\sigma}^\dagger$. A matriz H_{0alto} , de dimensão 64×64 , é construída calculando-se os elementos de matriz nessa base de estados. Esses elementos de matriz são construídos usando-se os elementos de matriz invariantes d_e da tabela 3.3 e as energias da tabela 3.1. A matriz H_{0baixo} é então diagonalizada. (Veja detalhes no apêndice B).

segundo passo da iteração N		
1	$ j, j_z, s, s_z, p, r; 0\rangle_{N\text{baixo}}$	$= \sqrt{\frac{j-j_z}{2j}} j-1/2, j_z+1/2, s, s_z, p, r\rangle_{N\text{alto}}$ $+ (-1)^N \sqrt{\frac{j+j_z}{2j}} f_{Np\uparrow}^\dagger f_{Np\downarrow}^\dagger j-1/2, j_z-1/2, s, s_z, p, r\rangle_{N\text{alto}}$
2	$ j, j_z, s, s_z, p, r; 1\rangle_{N\text{baixo}}$	$= \sqrt{\frac{s-s_z}{2s}} f_{Np\downarrow}^\dagger j, j_z, s-1/2, s_z+1/2, p, r\rangle_{N\text{alto}}$ $+ \sqrt{\frac{s+s_z}{2s}} f_{Np\uparrow}^\dagger j, j_z, s-1/2, s_z+1/2, p, r\rangle_{N\text{alto}}$
3	$ j, j_z, s, s_z, p, r; 2\rangle_{N\text{baixo}}$	$= \sqrt{\frac{j+j_z+1}{2j+2}} j+1/2, j_z+1/2, s, s_z, p, r\rangle_{N-1\text{alto}}$ $- (-1)^N \sqrt{\frac{j-j_z+1}{2j+2}} f_{Np\uparrow}^\dagger f_{Np\downarrow}^\dagger j+1/2, j_z-1/2, s, s_z, p, r\rangle_{N\text{alto}}$
4	$ j, j_z, s, s_z, p, r; 3\rangle_{N\text{baixo}}$	$= \sqrt{\frac{s+s_z+1}{2s+2}} f_{Np\downarrow}^\dagger j, j_z, s+1/2, s_z+1/2, p, r; 0\rangle_{N\text{alto}}$ $- \sqrt{\frac{s-s_z+1}{2s+2}} f_{Np\uparrow}^\dagger j, j_z, s+1/2, s_z-1/2, p, r\rangle_{N\text{alto}}$
primeiro passo da iteração N+1		
1	$ j, j_z, s, s_z, p, r; 0\rangle_{N+1\text{alto}}$	$= \sqrt{\frac{j-j_z}{2j}} j-1/2, j_z+1/2, s, s_z, p, r\rangle_{N\text{baixo}}$ $+ (-1)^N \sqrt{\frac{j+j_z}{2j}} f_{Np\uparrow}^\dagger f_{Np\downarrow}^\dagger j-1/2, j_z-1/2, s, s_z, p, r\rangle_{N\text{baixo}}$
2	$ j, j_z, s, s_z, p, r; 1\rangle_{N+1\text{alto}}$	$= \sqrt{\frac{s-s_z}{2s}} f_{Np\downarrow}^\dagger j, j_z, s-1/2, s_z+1/2, p, r\rangle_{N\text{baixo}}$ $+ \sqrt{\frac{s+s_z}{2s}} f_{Np\uparrow}^\dagger j, j_z, s-1/2, s_z+1/2, p, r\rangle_{N\text{baixo}}$
3	$ j, j_z, s, s_z, p, r; 2\rangle_{N+1\text{alto}}$	$= \sqrt{\frac{j+j_z+1}{2j+2}} j+1/2, j_z+1/2, s, s_z, p, r\rangle_{N\text{baixo}}$ $- (-1)^N \sqrt{\frac{j-j_z+1}{2j+2}} f_{Np\uparrow}^\dagger f_{Np\downarrow}^\dagger j+1/2, j_z-1/2, s, s_z, p, r\rangle_{N\text{baixo}}$
4	$ j, j_z, s, s_z, p, r; 3\rangle_{N+1\text{alto}}$	$= \sqrt{\frac{s+s_z+1}{2s+2}} f_{Np\downarrow}^\dagger j, j_z, s+1/2, s_z+1/2, p, r\rangle_{N\text{baixo}}$ $- \sqrt{\frac{s-s_z+1}{2s+2}} f_{Np\uparrow}^\dagger j, j_z, s+1/2, s_z-1/2, p, r\rangle_{N\text{baixo}}$

Tabela 3.2: Geração da base primitiva para o primeiro passo na iteração $N+1$, usando a base própria obtido no segundo passo da iteração N .

Desde que os estados de diferentes j_z e s_z mas com j, s e p iguais são degenerados, diagonalizamos apenas uma matriz com determinado valor de j_z e s_z . Escolhemos os valores $j_z = -j$ e $s_z = s$. No final de cada diagonalização o estado fundamental é subtraído, a energia mais baixa energia passando a ser zero. Os estados são ordenados, dentro do subespaço (j, s, p) , em ordem crescente de energia indicado pelo índice r . Na tabela 3.1

	elementos de matriz invariantes	
	$\langle 2j, 2s, p, r d_{alto}^\dagger 2j', 2s', p', r' \rangle$	
1	$\langle 1, 1, 0, 1 d_{alto}^\dagger 2, 0, 0, 1 \rangle$	$\sqrt{6}$
2	$\langle 2, 0, 0, 1 d_{alto}^\dagger 1, 1, 0, 1 \rangle$	$-\sqrt{6}$
3	$\langle 0, 0, p, 1 d_{alto}^\dagger 1, 1, p, 1 \rangle$	$\sqrt{2}$
4	$\langle 0, 2, 1, 1 d_{alto}^\dagger 1, 1, 1, 1 \rangle$	$\sqrt{6}$
5	$\langle 1, 1, 1, 1 d_{alto}^\dagger 0, 2, 1, 1 \rangle$	$-\sqrt{6}$
6	$\langle 1, 1, p, 1 d_{alto}^\dagger 0, 0, p, 1 \rangle$	$\sqrt{2}$
	$\langle 2j, 2s, p, r d_{baixo}^\dagger 2j', 2s', p', r' \rangle$	
1	$\langle 1, 1, 1, 1 d_{baixo}^\dagger 2, 0, 0, 1 \rangle$	$\sqrt{6}$
2	$\langle 2, 0, 0, 1 d_{baixo}^\dagger 1, 1, 1, 1 \rangle$	$-\sqrt{6}$
3	$\langle 0, 0, (1-p), 1 d_{baixo}^\dagger 1, 1, p, 1 \rangle$	$(-1)^p \sqrt{2}$
4	$\langle 0, 2, 1, 1 d_{baixo}^\dagger 1, 1, 0, 1 \rangle$	$-\sqrt{6}$
5	$\langle 1, 1, 0, 1 d_{baixo}^\dagger 0, 2, 1, 1 \rangle$	$\sqrt{6}$
6	$\langle 1, 1, (1-p), 1 d_{baixo}^\dagger 0, 0, p, 1 \rangle$	$-\sqrt{2}$

Tabela 3.3: Elementos de matriz invariantes na primeira iteração. Os elementos de matriz com operadores d_{baixo} serão utilizados no proximo passo da iteração. Os elementos de matriz com d_{alto} serão atualizados no próximo passo para ser utilizado no passo seguinte.

podemos observar a degenerescência em j_z e s_z e a subtração do estado fundamental.

Após a diagonalização de H_{0baixo} , os elementos de matriz invariantes de $f_{0e\sigma}$ são calculados segundo a equação B.3 (apêndice B). Os elementos de matriz invariantes de d_o na tabela 3.3 são atualizados nessa base diagonal segundo apêndice B. Então, uma nova base é construída pela tabela 3.2, onde agora o operador introduzido é $f_{0o\sigma}$. A matrix H_{0alto} , de dimensão 256×256 , é gerada e todo o processo é repetido.

Figura 3.1: Desenho esquemático do procedimento computacional. Cada quadrado é um subespaço com números quânticos $2J, 2S$ para uma determinada paridade. A outra paridade seria um diagrama colocado ao lado em superposição. Os subespaços achurados participam da formação dos não achurados que fazem parte de sua fronteira. Evidentemente, participarão também da formação dos subespaços vizinhos de paridade diferente.

O corte das energia maiores que $E_{max} = 18$ só é feita a partir da diagonalização do Hamiltoniano H_{1alto} . Ou seja, todos os 64 estados de H_{0alto} foram usados para construir os 256 estados de H_{0baixo} , que por sua vez foi usado na construção de H_{1alto} . O uso desse corte a partir H_{0baixo} reduziria o tempo de CPU para 20 minutos. No entanto, isso implicaria aproximar o acoplamento entre banda e impureza, uma vez que H_0 contém os termos de hibridização. Resolvemos, então, não assumir essa perda de precisão.

Uma visualização do procedimento de diagonalização iterativa é mostrada na figura 3.1. O espaço dos estados com números quânticos j e s de paridade par é representado por um gráfico cartesiano bidimensional de eixos $2s$ e $2j$. Cada bloco, determinado por valores inteiros de $2s$ e $2j$, representa um subespaço independente. Este bloco, os quais têm os valores fixos de $j_z = -j$ e $s_z = s$, podem ser diagonalizado isoladamente. Para montar

outros subespaços de $j_z \neq -j$ e $s_z \neq s$, usa-se o teorema de Wigner-Eckart. Os elementos de matrizes não nulos ocorrem entre os blocos ligados pelos vértices. A geração dos estados da próxima iteração pode ser vista claramente neste esquema. Os novos estados da iteração seguinte, são aqueles não achurados na figura, eles são gerados a partir dos estados dos blocos que o circunda. Os espaços de paridade par e ímpar colocados um ao lado do outro, são evidentemente ligados pela Tabela 2.

Terminado cada fase do cálculo, a contribuição de cada estado para a susceptibilidade é calculada. No cálculo do fator de Boltzmann usamos cinco valores diferentes de $\bar{\beta}$ em cada fase, com o menor valor $\bar{\beta}_0 = 0.32$. O valor do maior temperatura em cada iteração, ou mesmo em cada fase, é igual a menor temperatura da iteração seguinte, ou fase seguinte. Ou seja, o maior valor para T_{Nbaixo} é igual ao menor valor de T_{Nalto} e maior valor de T_{Nalto} é igual ao menor valor de $T_{N+1baixo}$.

A diferença entre as susceptibilidade para dois valores obtidos na mesma temperatura com diferentes $\bar{\beta}$ ($T_{Nbaixo} = T_{N+1alto}$) dá uma estimativa do erro cometido no cálculo da susceptibilidade. Esse erro é ordem de 7×10^{-3} em $T\chi_{imp}$. A possibilidade da introdução de um operador de cada vez, determinando a introdução de duas escalas diferentes de energia, permite a obtenção mais valores para a susceptibilidade, para um determinado valor de Λ , que pelo método tradicional. Obtemos muito mais valores T_N e T_{N+1} , isso proporciona maior precisão ao cálculo da susceptibilidade. Também permite trabalhar com valores grandes do parâmetro de discretização Λ (que é uma dificuldade no método tradicional pelo surgimento de oscilações indesejáveis a baixas temperaturas)^[46], como consequência resultando em menor tempo de cálculo numérico. No nosso método são necessários muito menos estados para se alcançar uma dada energia limite. (Também valores mais próximos do nível de Fermi são alcançados mais rapidamente, no entanto, essa vantagem é mínima uma vez que precisamos fazer duas diagonalização por iteração.)

Capítulo 4

Resultados e Discussões

Os resultados da aplicação da nova abordagem ao modelo de Anderson de duas impurezas aparecem neste capítulo. Nós escolhemos trabalhar na região de forte correlação Coulombiana, onde as impurezas se tornam fortemente magnéticas, ou seja, a região onde – a altas temperaturas – as impurezas têm momento magnético. Dessa forma, é nessa região onde há maior competição entre efeito Kondo e estado antiferromagnético.

Como vimos no capítulo introdutório, a hibridização dos elétrons de condução com o orbital f de impureza, gera uma interação efetiva RKKY, em quarta ordem, entre impurezas. Essa aproximação $KR \rightarrow K_F R$ torna essa interação sempre ferromagnética. Para obtermos acoplamento antiferromagnético entre as impurezas escolhemos $K_F R$ tal que o acoplamento se anule e somamos fenomenologicamente o termo de interação magnética $-I_0 \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ ao Hamiltoniano.

Na seção 4.1 apresentaremos os diagramas de fluxo de energias obtidos com a diagonalização iterativa. Os diagramas relacionam os diferentes pontos fixos, em cada região do espaço paramétrico. Maior destaque dado à transição entre as regiões de efeito Kondo e alinhamento antiferromagnético. Diagramas de fluxos semelhantes foram obtidos por Jones *et al*, para o modelo Kondo de duas impurezas. Aqui esses diagramas são mostrados para iluminar a discussão sobre os resultados obtidos para a susceptibilidade magnética apresentados na seção seguinte.

A seção 4.2 apresenta os resultados obtidos para a susceptibilidade magnética. O efeito Kondo de dois estágios, na região de acoplamento ferromagnético, é discutido. Também

comparamos os resultados com as curvas universais, obtidas através do método do *Bethe Ansatz*, para spin $1/2$ e 1 . O efeito da competição Kondo-antiferromagnetismo pode também ser observado.

4.1 Diagramas de Fluxo de Energia

A diagonalização do Hamiltoniano seguindo a transformação de grupo renormalização, equação 3.1, gera um processo evolutivo, de acordo com número de iterações N , nos níveis de energias dos autoestados do Hamiltoniano. Nesse processo, os autoestados passam por vários pontos fixos até alcançar o ponto fixo estável característico do estado fundamental. Os pontos fixos encontrados nesse trabalho são os mesmos obtidos para o modelo Kondo de duas impurezas^{25,26}, de forma que não iremos detalhar sua discussão.

Nesta seção apresentaremos e discutiremos os diagramas de fluxo de energias obtidos para os seis estados de mais baixa energia. Primeiro discutiremos o caso de acoplamento ferromagnético no modelo puro ($I_0 = 0$), onde ocorre o efeito Kondo de dois estágios. Depois, com a introdução da interação RKKY, discutiremos o caso de acoplamento antiferromagnético observando as regiões de acoplamento fraco, onde ocorre efeito Kondo, e forte, onde o estado fundamental é antiferromagnético.

No Hamiltoniano de Anderson, com a aproximação $kR \rightarrow k_f R$, o valor do acoplamento entre as impurezas, para um valor fixo da correlação U , é determinado pelo parâmetro $s = \frac{\sin(K_F R)}{K_F R}$, isto é, pela distância R entre as impurezas. Como já mencionamos, este acoplamento é sempre ferromagnético. Quando $s = 0$ as impurezas estão separadas de tal forma que o acoplamento entre elas via hibridização, isto é, via elétrons de condução é nulo e

teremos o caso de dois modelos de uma impureza isolados. Nesse caso o estado fundamental é um estado singlete Kondo em cada impureza. Quando $s = 1$, a distância entre as impurezas é nula ($R = 0$), dessa forma o acoplamento ferromagnético entre elas é máximo. Nesse caso os spins das impurezas estão alinhados paralelamente. Podemos observar no Hamiltoniano 1.7 que a banda de condução de um dos canais fica desacoplada da impureza correspondente; essa impureza não pode então ser compensada pelos elétrons da banda de condução.

As figuras 4.1 a 4.4 mostram a evolução dos diagramas de fluxo de acordo com a variação do parâmetro s . O diagrama para $s = 0,1$ representa a região de acoplamento fraco, quando as impurezas estão começando a interagirem via hibridização. O diagrama para $s = 0,7$ está na região intermediária, enquanto o diagrama com $s = 0,9$ está na região de acoplamento forte com impurezas muito próximas.

Os diagramas de fluxo são apresentados em energia ϵ versus número de iterações N . As energias são adimensionais (ver equação (2.14)) e o estado fundamental é subtraído, de forma que a energia desse estado é nula nos diagramas. O número de iterações está relacionado com a temperatura pela equação (3.11). A temperatura diminui logarithmicamente com o aumento do número de iterações ($T_N \propto \Lambda^{-(N-1)/2}$). São mostrados os seis estados de mais baixas energias, denominados segundo seus números quânticos—carga axial J , spin S e paridade P —como $|2j, 2s, P\rangle$. Os valores dos parâmetros do modelo—hibridização V , correlação Coullobiana U , parâmetro S , acoplamento RKKY I_0 e parâmetro de discretização Λ —aparecem em destaque nos diagramas.

A figura 4.1 mostra o diagrama de fluxo para $s = 0,1$. Nas primeiras iterações os níveis de energias são aqueles de spins das impurezas livres, a escala de energia importante sendo a correlação Coulombiana. À medida que diminui a temperatura (aumentando o número de iteração, N) a interação banda-impureza via hibridização torna-se importante, levando ao surgimento da interação indireta entre impurezas o qual é refletido na pequena elevação da diferença entre as energias do estado $|021\rangle$ e $|000\rangle$. Quando o número de iterações aumenta ainda mais observamos que os níveis alcançam um ponto fixo onde todos são degenerados,

indicando não haver mais interação entre impurezas. Nesse ponto fixo, os spins das impurezas são compensados pelos spins da banda de condução.

Figura 4.1: Diagrama de fluxo para $s = 0, 1$ (impurezas distantes uma da outra) que significa fraco acoplamento ferromagnético. Os níveis tornam-se rapidamente degenerados no estado fundamental. A diferença entre as energias do estado $|000\rangle$ e $|021\rangle$, também cai rapidamente a zero indicando que as impurezas estão desacopladas no estado fundamental.

O diagrama para $s = 0, 7$ (figura 4.2) também começa com os níveis característicos de impurezas livres. O diagrama mostra uma diferença bem maior entre as energias do estado de mais baixa energia($|021\rangle$) e o estado seguinte($|000\rangle$), indicando um acoplamento maior entre impurezas. Observamos na região em torno de $N=17$ uma tendência dos níveis formarem um patamar. Isso reflete as diferentes hibridizações das partes par e ímpar. Como a escala de energia diminui à medida que aumenta o número de iterações, a menor hibridização torna-se

importante numa temperatura mais baixa, retardando a chegada dos níveis ao ponto fixo estável.

Figura 4.2: Diagrama de fluxo de energia para $s = 0, 7$. Nessas condições a distância gera um acoplamento entre impurezas $I_0 = 0,68$. Um patamar em regiões intermediárias no número de iterações pode ser observado. O estado fundamental é degenerado.

Observando a evolução com o aumento do valor de s , podemos observar na figura 4.3 ($s = 0, 9$) que custa mais iterações para os níveis de energia chegarem ao ponto fixo estável de impurezas com spins compensados e fortemente acoplados à banda. O aumento de S faz a hibridização da parte ímpar cada vez menor, a compensação dos spins da impureza por elétrons de condução da banda ímpar ocorrendo a temperaturas muito mais baixa. Visto de outra maneira, $s \rightarrow 1$ significa que a distância entre as impurezas está diminuindo. Os níveis de energia, portanto, apresentam tendências a ficar no ponto fixo de impurezas fortemente

acopladas com $R = 0$. Para $s < 1$ o estado fundamental é aquele de spins da impureza compensados. Já para $s = 1$, o estado fundamental apresenta um momento de spin líquido $1/2$. Nesse ponto fixo observamos que ocorre uma defasagem de $\pi/2$ em apenas umas das bandas (na banda par), enquanto na outra não ocorre defasagem. Isso é facilmente entendido, pois a banda ímpar não interage com as impurezas, nenhum de seus elétrons participando da blindagem das impurezas.

Figura 4.3: Diagrama de fluxo para impurezas muito próximas ($s = 0,9$). Esse diagrama mostra que os níveis ainda não chegaram ao ponto fixo estável mesmo a temperaturas $k_B T/D = 1.0 \times 10^{-4}$. O sistema sofre forte influência do ponto fixo $R = 0$. A diferença entre os níveis $|000\rangle$ e $|021\rangle$ indica que as impurezas ainda estão acopladas.

Nas figuras 4.4 a 4.6 mostramos os diagramas com $S = 0$, ou seja, não ocorre acoplamento entre impurezas via hibridização ($R \rightarrow \infty$). Na figura 4.4, podemos observar o efeito do

termo de interação $-I_0\vec{S}_1.\vec{S}_2$ entre as impurezas somado ao Hamiltoniano. A figura mostra o resultado obtido para $I_0 = 0,7$. Nenhum patamar aparece, uma vez que só existe uma escala de energia associada a hibridização, $\Gamma_e = \Gamma_o$. O estado fundamental é aquele com os níveis degenerados, refletindo a compensação dos spins das impurezas pelos elétrons de condução. Como vemos, introduzir um acoplamento artificial entre impurezas, fazendo $s = 0$, não é o mesmo que considerar $s \neq 0$. Nos diagramas seguintes o acoplamento é antiferromagnético.

Figura 4.4: Diagrama de fluxo destacando o efeito da inclusão do termo de interação $-I_0\vec{S}_1.\vec{S}_2$ no Hamiltoniano. O diagrama foi obtido para $I_0 = 0,7$. Nenhum patamar é observado, os níveis tornam-se degenerados no ponto fixo estável de baixa temperatura.

Para acoplamento antiferromagnético fraco, $I_0 = -1,91938 \times 10^{-4}$, (figura 4.5), podemos observar no diagrama que os níveis saem do ponto fixo de impurezas livres e passam a interagir à medida que $k_b T_N$ se torna comparável com I_0 . Isso é visto observando-se que, à

medida que cai a temperatura, aumenta N , os estados $|021\rangle$ e $|000\rangle$ deixam de ser degenerados e aumenta a diferença entre eles. Observamos que em torno de $N = 15$ os seis níveis de energia passam por um patamar e depois caem a zero e se tornam degenerados, como nos casos de acoplamento ferromagnético. O patamar indica proximidade de um ponto fixo do modelo. Os níveis de energias da banda de condução apresentam uma defasagem de $\pi/2$ no ponto fixo estável, como consequência da blindagem dos spins das impurezas pelos elétrons de condução. Ou seja, as impurezas não interagem entre si, mas interagem fortemente com a banda de condução. Assim, o estado fundamental é um singlete tipo Kondo.

Figura 4.5: Diagrama de fluxo para fraco acoplamento antiferromagnético ($I_0 = -1.91938 \times 10^{-4}$). Os níveis permanecem em patamar na região intermediária de N para depois tornarem-se degenerados como no caso de acoplamento ferromagnético.

Figura 4.6: Diagrama de fluxo para acoplamento antiferromagnético moderado ($I_0 = 1.91944 \times 10^{-4}$). Nesse caso após o patamar os níveis de energia chegam a um ponto fixo estável com estado fundamental não degenerado. A diferença entre os níveis $|000\rangle$ e $|021\rangle$ indicam que nesse ponto fixo as impurezas estão acopladas.

A figura 4.6 mostra o diagrama obtido para $I_0 = -1,91944 \times 10^{-4}$. Observamos nesse diagrama a existência do mesmo patamar do diagrama anterior, com o sistema indo para um outro ponto fixo estável. Nesse ponto fixo, diferente dos anteriores, não ocorre degenerescências nos estados. Observamos que a diferença entre as energias dos estados $|021\rangle$ e $|000\rangle$ não diminui quando a temperatura baixa, ao contrário aumenta permanecendo constante no ponto fixo estável. Isso significa que o acoplamento entre impurezas não diminui e no estado fundamental as impurezas interagem. Observamos, ainda, que não existe defasagem nos níveis de energias; não ocorre efeito Kondo, portanto.

O primeiro patamar observado nas figuras 4.5 e 4.6 indica existência de um ponto fixo instável na transição entre os pontos fixos estáveis de impurezas acopladas e de impurezas desacopladas (singleto Kondo). Existe, evidentemente, um valor de I_0 que deixa o sistema exatamente nesse ponto fixo, para o qual aquele patamar se estende até $N \rightarrow \infty$. Observamos que, nesse estado, as impurezas são interagentes, uma vez que os estados $|021\rangle$ e $|000\rangle$ têm energias diferentes. As figuras 4.5 e 4.6 mostram que o estado fundamental nesse ponto é não degenerado, como no caso de forte interação antiferromagnética. A defasagem dos níveis de energias da banda de condução, nesse ponto fixo, não é bem definida.

4.2 Gráficos da Susceptibilidade

Nesta seção apresentaremos o gráfico da susceptibilidade magnética usando os mesmos parâmetros usados nas construções dos diagramas de fluxo de energia. Cada gráfico da susceptibilidade corresponde a um diagrama apresentado na seção anterior.

A figura 4.7 mostra a susceptibilidade para acoplamento ferromagnético com $s = 0,1$. As impurezas estão distantes uma da outra, de forma que o acoplamento entre elas é pequeno. Quando a escala de energia $k_B T_N$, determinada pelo número da iteração, é da ordem do acoplamento efetivo entre as impurezas, seus spins começam a se alinhar ferromagneticamente. No entanto, a nuvem de elétrons de condução que blinda a impureza começa a ser formada à medida que baixa a temperatura, de forma que acoplamento não é suficientemente forte para alinhar totalmente os spins. Podemos observar, claramente, na figura que a tentativa de alinhamento é logo frustrada pela blindagem dos spins: como ilustrado pelo diagrama de fluxo, o acoplamento entre as impurezas cai logo a zero. O estado fundamental é um estado singlete Kondo, com os spins das impurezas compensados individualmente. A curva da susceptibilidade magnética universal para impurezas isoladas, obtido pelo *Bethe Ansatz*, para o caso de spin $1/2$ aparece para efeito de comparação.

O gráfico para $s = 0,7$ (figura 4.8) mostra que o acoplamento efetivo ferromagnético entre impurezas já é suficiente para se acoplarem, e formarem um estado tripleto de spin 1, antes que seus spins sejam blindados pelos elétrons de condução. À medida que baixa a temperatura, os elétrons de condução formam uma nuvem de blindagem em torno das impurezas acopladas com spin magnético 1. A diferença entre as hibridizações efetivas dos canais ímpar e par faz com que os dois canais tenham comportamentos diferentes. No canal par, com hibridização maior, a compensação dos spins da impureza ocorre a temperaturas mais elevadas, ou seja nas primeiras iterações. A hibridização menor do canal ímpar só se tornará importante em escalas de energia bem menores, ou seja em temperaturas bem mais baixas. Isso ocorre em torno da iteração $N = 20$.

Após a blindagem no canal par, persiste um momento magnético equivalente ao causado

Figura 4.7: Gráfico da susceptibilidade magnética obtido usando $s = 0, 1$. O gráfico mostra o efeito da blindagem dos spins das impurezas pelos elétrons de condução, o qual impede a tentativa de acoplamento entre seus spins. O estado fundamental é não magnético.

por uma impureza de spin $1/2$. Esse spin persiste até ser compensado pelos elétrons de condução da banda ímpar. Isso é evidenciado na figura 4.8 pelo patamar existente entre o primeiro decaimento do momento magnético e o segundo.

A blindagem do spin total das impurezas acopladas—à medida que cai a temperatura—ocorrendo em dois passos, claramente separados, permite a observação de duas temperaturas Kondo diferentes. Essas temperaturas podem ser calculadas pela equação 1.4, usando a equação 1.3 com $V = V_p$. O resultado é $T_k = 9,8 \times 10^{-4}$ e $T_k = 4,9 \times 10^{-15}$. A compensação dos spins em dois passos é o chamado efeito Kondo de dois estágios, observado por Jayaprakash *et al* [15].

Figura 4.8: Gráfico da susceptibilidade para $s = 0,7$, mostrando o efeito Kondo de dois estágios. As curvas contínuas foram obtidas pelo *Bethe Ansatz* e ressaltam o efeito Kondo de spin 1 e o de spin $1/2$.

Na figura 4.8 as curvas universais da susceptibilidade, obtidas pelo *Bethe Ansatz* [47], para spin $1/2$ e 1 são introduzidas, em escalas e temperatura Kondo apropriadas, para ressaltar que as blindagens são referentes ao spin $1/2$ e spin 1. A concordância é excelente. As diferenças no início e no fim para a curva universal de spin 1 ocorrem porque o spin efetivo 1 das impurezas é imediatamente blindado pelos spins da banda par (início da curva), e por causa dos primeiros efeitos da segunda blindagem no final da curva. Observemos que a spin não deve ser exatamente $1/2$ no início do segundo estágio, como evidenciado pela diferença entre a curva universal de spin $1/2$ e a por nós obtida.

No gráfico da susceptibilidade para $s = 0,9$ (figura 4.9) destacamos que o segundo estágio Kondo ocorre a temperaturas baixíssimas, tão perto do zero que não aparecem

Figura 4.9: Gráfico da susceptibilidade para o caso das impurezas muito próximas uma da outra ($s = 0,9$). Existe uma tendência de permanecer um momento magnético eficaz nas impurezas.

na figura. Os elétrons de condução da banda ímpar só conseguem blindar o spin efetivo $1/2$ da impureza quando $k_b T_N \ll 10^{-20} D$, pois a hibridização entre essa banda e as impurezas é muito pequeno, $\Gamma_o = 0,196$. Isso significa que apenas os elétrons da banda de condução par participarão da blindagem das impurezas. Como o gráfico indica, apenas esses elétrons não são suficientes para blindar totalmente o spin das impurezas acopladas ferromagneticamente. Extrapolando esse resultado para o limite $R \rightarrow 0$, vemos que nesse limite o estado fundamental será magnético.

Para analisar o modelo na região de acoplamento negativo entre impurezas nós somamos ao Hamiltoniano a interação direta $-I_0 \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$. O efeito dessa interação é primeiro analisada para o caso de acoplamento ferromagnético com o parâmetro $s = 0$ ($R = \infty$). Nesse caso, as hibridizações efetivas par e ímpar são iguais e as impurezas não interagem via elétrons de

condução. Os resultados são comparados com obtidos para $s \neq 0$.

Figura 4.10: Gráfico da susceptibilidade mostrando o efeito de um acoplamento ferromagnético direto I_0 incluído ao Hamiltoniano. Ocorre um efeito Kondo de spin 1, como evidenciado pela curva contínua obtida pelo *Bethe Ansatz*.

A figura 4.10 mostra o gráfico da susceptibilidade para correlação RKKY ferromagnética $I_0 = 0,7$ entre impurezas. Com essa forte correlação as impurezas irão acoplar-se para formar um estado tripleto ferromagnético com spin 1. A susceptibilidade é característica de um efeito Kondo para spin 1. A curva universal obtida pelo *Bethe Ansatz*, introduzida na figura, evidencia esse resultado. O momento magnético é blindado simultaneamente pelos elétrons de condução das bandas par e ímpar. Assim, não pode ocorrer o efeito Kondo de dois estágios. Vemos mais uma vez que a interação RKKY gerada pelos elétrons de condução não pode ser simulada nem qualitativamente por um termo de acoplamento adicionado artificialmente ao Hamiltoniano.

Figura 4.11: Gráfico da susceptibilidade para acoplamento antiferromagnético próximo e abaixo do acoplamento de ponto crítico. Ocorre um efeito Kondo e o do ponto fixo instável é marcado pela intermitência que aparece após a compensação do momento magnético.

Quando a correlação RKKY é negativa as impurezas tendem a se acoplarem com alinhamento antiparalelo de seus spins. As figuras 4.11 e 4.12 apresentam os resultados da susceptibilidade magnética para esse tipo de correlação, mantendo $s = 0$. O estado fundamental nesses dois resultados são não magnéticos. A figura 4.11 mostra o resultado obtido para o valor $I_0 = -1,91938 \times 10^{-4}$. O diagrama de fluxo correspondente é o da figura 4.5, que mostra um ponto fixo estável com impurezas não interagentes com os seis estados de mais baixa energia degenerados e nulos. O momento magnético cai logo a zero como efeito da blindagem dos spin individuais pelos elétrons de condução. A correlação não é suficiente para manter um alinhamento antiparalelo.

O resultado mostrado na figura 4.12 para $I_0 = -1,91944 \times 10^{-4}$, corresponde ao diagrama 4.6, o qual mostra um ponto fixo estável com impurezas interagindo e os estados não todos degenerados. Essa figura mostra o momento magnético das impurezas caindo a zero indicando que o acoplamento é forte o suficiente para se compensarem mutuamente. As impurezas, então, formam um estado singlete antiferromagnético independente da banda de condução.

Figura 4.12: Gráfico da susceptibilidade obtido para acoplamento antiferromagnético próximo e acima do acoplamento de ponto crítico. O estado fundamental é não magnético devido aos spins das impurezas compensarem-se um ao outro. O efeito do ponto fixo instável é novamente a intermitência, a temperaturas na faixa $10^{-15} < k_B T < 10^{-7}$.

Os diagramas de fluxo de energia para correlação RKKY, mostrados na seção anterior, apresentam um patamar em iterações intermediárias indicando a existência de um ponto fixo

instável. Esse ponto fixo separa as regiões de ponto fixo estável tipo Kondo e alinhamento antiferromagnético. Nesse ponto fixo instável a susceptibilidade é nula. Na região de temperaturas, ou interações, onde ocorre o patamar, os spins das impurezas estão no final do processo de blindagem (figura 4.11) ou já se compensaram mutuamente (figura 4.12). Ou seja, os spins das impurezas se compensam de uma forma ou de outra antes do sistema decidir qual o ponto fixo estável em baixas temperaturas.

O efeito do patamar, observado nos diagramas de fluxo, nos gráficos da susceptibilidade é uma intermitência nos pontos a baixas temperaturas. Espaços vazios aparecem entre pontos na região correspondente ao patamar indicando que a susceptibilidade, no ponto fixo instável, é exatamente nula (devido a erros numéricos alguns pontos são negativos). No patamar, os níveis de energia ficam constantes enquanto a temperatura cai, tornando o fator de Boltzmann muito pequeno. Fora do patamar os níveis de energia caminham para o ponto fixo estável e ainda não são completamente constantes.

4.3 Conclusões

Este trabalho introduziu uma nova discretização da banda de condução no método de Grupo de Renormalização Numérico. Com essa técnica calculou-se a susceptibilidade magnética modelo de Anderson de duas impurezas no limite Kondo. Como ilustração, a densidade espectral do modelo com interação Coulombiana fraca também foi calculada.

A nova abordagem explora a simetria de paridade do modelo de duas impurezas para discretizar diferentemente as bandas dos canais par e ímpar. A discretização é feita introduzindo-se um parâmetro z_p ($p = \text{par}, \text{ímpar}$) assumindo valores $1/2$ e 1 . A discretização feita dessa forma reproduz melhor a banda de condução contínua que o método tradicional. Isso permitiu-nos trabalhar com valores grandes $\Lambda = \Lambda_g$ do parâmetro de discretização, com precisão equivalente á que se obtém no método tradicional com $\Lambda = \sqrt{\Lambda_g}$; com isso o tempo de cálculo numérico se reduz enormemente, por um fator da ordem de 10^3 , com o que a diagonalização do modelo de Anderson de duas impurezas pode ser efetuado em cerca de 80 minutos numa estação de trabalho com velocidade de processamento de ponto flutuante da ordem de 4Mflops.

Basicamente, a vantagem de nossa abordagem é poder recobrir a banda de condução com mais energias, o que reduz os desvios introduzidos pela discretização da banda. A extensão da nova abordagem para cálculos no modelo periódico de Anderson, ou outros modelos de rede, é possível definindo $z_i \equiv 1/n_i$ com $n_i = 1, 2, \dots, N_i$ (N_i é o número de impurezas consideradas). Com isso o ampliamos espectro do método do GRN.

O problema de duas impurezas, no qual testamos nossa abordagem, tem sido bastante estudado, embora careça ainda de um entendimento completo. A controvérsia entre a existência ou não do ponto crítico entre as regiões Kondo e antiferromagnética entre os dois métodos mais poderosos, GRN e Monte Carlo, no estudo do problema de duas impurezas foi intensificado com estudos de mais recentes (ver capítulo introdutório). Parece claro que o ponto fixo instável se deve a simetria partícula-buraco. Uma vez que essa simetria é introduzida artificialmente em nosso trabalho (assim como no método da invariância

conforme) os resultados aqui obtidos não contribuem para esclarecer esse conflito, ainda que sejam muito mais precisos e abrangentes do que os obtidos por Jones, Varma e Wilkins [26]. Nossa abordagem, por outro lado determina a susceptibilidade em todo o espaço paramétrico do modelo com precisão semelhante ao obtido pelo GRN no modelo de uma impureza.

A principal deficiência deste trabalho, assim, se deve à aproximação da hibridização independente da energia, que torna o Hamiltoniano artificialmente simétrico. Estudar o problema de duas impurezas sem essa aproximação será, então, mais uma extensão natural de nossa abordagem.

No capítulo 2 usamos a nova técnica para calcular a densidade espectral para o caso $U \ll \Gamma$. Os resultados são comparáveis aos obtidos por Sakai *et al* [29], para o caso com simetria partícula-buraco. Assim, obtemos uma indicação preliminar de que o método se presta ao cálculo de propriedades dinâmicas.

Nos Capítulos 3 e 4, aplicamos nossa técnica ao cálculo da dependência térmica da susceptibilidade magnética do modelo de duas impurezas. Também, obtivemos os diagramas de fluxo de energia do modelo. Ao Hamiltoniano do modelo foi somado um acoplamento I_0 entre os spins para estudar correlações antiferromagnéticas entre impurezas, já que a aproximação de hibridização independente da energia gera somente acoplamentos ferromagnéticos.

Os cálculos foram realizados usando-se a hibridização $V = 1.118D$ ($\rho J = 0,1D$, a qual fornece uma temperatura Kondo $T_K = 1,22 \times 10^{-5}$. Esse valor T_K é bem abaixo dos conseguidos em trabalhos anteriores, e é mais que suficiente para se observar os fenômenos de interesse. Outros valores de V fornecerão os mesmo resultados, desde que $U \gg V$. Para garantir o limite Kondo do modelo de Anderson usamos $U = 100D$.

Para o caso de interação ferromagnética entre as impurezas, com $I_0 = 0$ o estado fundamental para $R \neq 0$ ($s \neq 1$) é sempre não magnético. Nesse caso, a defasagem na banda de condução é $\pi/2$, mostrando que os elétrons de condução blindam o spin das impurezas e o estado fundamental é um singlete tipo Kondo. Quando a interação

é suficientemente forte para as impurezas se acoplarem ferromagneticamente observamos o efeito Kondo de dois estágios. Muito mais que em trabalhos anteriores [15, 25, 40], esse efeito aparece claramente em nossos resultados . Os estágios aparecem separadamente devido às diferentes hibridizações nos canais par e ímpar. A comparação com resultados obtidos por *Bethe Ansatz* demonstram que primeiro estágio corresponde à blindagem parcial do spin 1 e o segundo a uma blindagem do spin residual 1/2.

Quando $R = 0$ ($s = 0$), o estado fundamental é magnético com momento magnético correspondente ao spin 1/2. Os elétrons de condução não conseguem blindar totalmente as impurezas. Nesse caso, não há hibridização no canal ímpar, a defasagem nesse canal será nula no estado fundamental. Os elétrons de condução do canal par, por outro lado, sofrerão uma defasagem de $\pi/2$. Aqui ocorrerá apenas um estágio do efeito Kondo, o qual reduz, mas não anula o momento magnético efetivo do par de impurezas.

Figura 4.13: Diagrama esquemático mostrando a relação entre T_K e I_0 . Os números indicam a região dessa relação para cada gráfico obtido e especificado pelas legendas.

A interação direta I_0 ferromagnética apenas aumenta a interação entre as impurezas. No caso de acoplamento via hibridização nula, $s = 0$, não se observa efeito Kondo de dois estágios, os spins blindados na mesma temperatura pelos dois canais. Para $I_0 \gg D$, observamos um efeito Kondo de spin total $S=1$.

Para correlação antiferromagnética ($I_0 < 0$) um ponto crítico é obtido separando duas regiões de estados fundamentais distintos: região de efeito Kondo, com uma defasagem $\pi/2$ na banda de condução, e a região de acoplamento antiferromagnético, sem defasagens na banda. Para $\rho J = -0.10$, esse ponto crítico ocorre em $I_0 \sim 1,91941 \times 10^{-4}$. O estado fundamental nas duas regiões é não magnético. Na região Kondo as impurezas são blindadas individualmente e não interagem no estado fundamental. Na região de acoplamento antiferromagnético as impurezas se acoplam no estado fundamental, formando singlete. No ponto crítico, a susceptibilidade magnética é nula, a compensação do momento magnético sendo completa mesmo a temperatura $T > 0$.

Os resultados obtidos mostram a competição entre duas escalas: a temperatura Kondo T_K e a interação entre impurezas RKKY I_0 . O resultado para o estado fundamental é sumarizado pela figura 4.13, a qual mostra a relação entre as escalas e os diferentes estados fundamentais. Para $I_0 \rightarrow \infty$ ($R = 0$) o estado fundamental é magnético, porém não aparece no gráfico. Esse gráfico não têm o objetivo de ser preciso, mas apenas de ser ilustrativo. Para I_0 positivo, ocorre o efeito Kondo de dois estágios, e o estado fundamental é dois spins paralelos blindados isoladamente pelos elétrons da banda. Para $0 < I_0 < -0,06T_K$, o estado fundamental é aquele com os dois spins das impurezas antiparalelos compensados isoladamente pelos elétrons da banda. Nesses dois casos, como já vimos a defasagem da banda é $\pi/2$. Para $I_0 > -0,06T_K$ o spins das impurezas compensam-se mutuamente. Nesses três casos o estado fundamental é não magnético. O valor 0,06 para a relação entre T_K e I_0 é aproximado, desde que não é possível determinar o valor de I_0 para o ponto instável.

4.4 Perspectivas e trabalhos futuros

Nossa abordagem forneceu uma descrição precisa da susceptibilidade magnética em todas as regiões do espaço paramétrico. Detalhes adicionais sobre o comportamento da susceptibilidade no ponto crítico, em temperaturas muito próximas de zero, poderiam ser obtidos com teoria de perturbação no Hamiltoniano de ponto fixo instável. Os resultados obtidos por Jones *et al* [25, 26] com esse procedimento, não conseguiram precisão suficiente para descrever a região próxima ao ponto crítico. Nossa abordagem tem essa precisão, não obstante, tal estudo parece injustificável frente as justificadas críticas recentes levantadas a aproximação de hibridização independente da energia.

Dentro da análise do ponto crítico, poderíamos calcular a susceptibilidade *staggered* do modelo para verificar a divergência encontrada por Jones *et al* [25, 26]. Também frente as críticas parece pouco razoável fazer esse cálculo, além disso, a definição dessa grandeza traz um problema: essa susceptibilidade é definida supondo um campo atuando nas impurezas de tal forma que elas se alinham antiparalelamente sob sua ação. No entanto, tratamentos anteriores não deram adequada atenção ao comportamento da banda de condução sob a ação desse campo. Introduzir definição diferente seria apenas complicar desnecessariamente a discussão do ponto crítico. Outra possibilidade, mais promissora, de estudo do comportamento crítico é o cálculo do calor específico. O coeficiente γ diverge no ponto crítico. Como consequência do cálculos do calor específico e da susceptibilidade poder-se-á calcular a razão de Wilson-Sommerfeld.

Outra propriedade que forneceria informação adicional sobre o ponto crítico é a função de correlação entre os spins das impurezas em temperatura nula ($\langle S_1 \cdot S_2 \rangle_{T=0}$). Essa correlação pode ser calculada com o mesmo procedimento de Jones *et al* [25, 26]: O valor esperado $\langle S_1 \cdot S_2 \rangle$ é calculado numericamente para todos os autoestados em cada iteração até alcançar o ponto fixo estável quando todos estados têm o mesmo valor esperado, esse ponto é considerado o limite de baixas temperaturas.

O cálculo de propriedades dinâmicas usando a nossa abordagem é, finalmente, uma

direção natural a ser tomada. Inicialmente, pretendemos calcular a densidade espectral do modelo de duas impurezas, já iniciada neste trabalho. No cálculo dessas propriedades a característica de recobrir melhor a banda de condução, será importantíssimo para aumentar o acuro do método de GRN.

Todos esses cálculos podem ser feito mantendo a aproximação de acoplamento independente da energia (o que implica simetria partícula-buraco) com objetivos de observar o comportamento crítico do ponto fixo instável. Porém pretendemos usar a nova generalização do método GRN que permite cálculos sem essa aproximação. Evidentemente, essa generalização permite obter resultados mais gerais e importantes para a extensão ao problema de rede, o qual pretendemos estudar com nossa abordagem.

æ

Apêndice A

Cálculo Perturbativo da Densidade Espectral

A definição da densidade espectral é

$$\begin{aligned}\rho_d(\epsilon > 0)_\pm &= \sum_{n\sigma} \left| \frac{\langle \Psi_n^a | d_{\pm\sigma} | \Psi^\Omega \rangle}{\left| \frac{d(E_{n\pm}^a - E^\Omega)}{dz} \right|} \right|^2 \Big|_{(E_n^a - E^\Omega) = \epsilon} \\ \rho_d(\epsilon < 0)_\pm &= \sum_{n\sigma} \left| \frac{\langle \Psi_n^b | d_{\pm\sigma}^\dagger | \Psi^\Omega \rangle}{\left| \frac{d(E_{n\pm}^b - E^\Omega)}{dz} \right|} \right|^2 \Big|_{(E_n^b - E^\Omega) = \epsilon}\end{aligned}\quad (\text{A.1})$$

onde as funções de onda são calculadas perturbativamente até primeira ordem da seguinte forma

$$\begin{aligned}|\Psi^\Omega\rangle &= |\Omega\rangle + \sum_{p \neq 0} \frac{\langle \psi^\Omega | H_{int} | \Omega \rangle}{(E_0^\Omega - E_p^\Omega)} |\psi_p^\Omega\rangle \\ |\Psi_{n\pm}^a\rangle &= a_{n\pm}^\dagger |\Omega\rangle + \sum_{p \neq n\pm} \frac{\langle \psi_{p\pm}^a | H_{int} a_{n\pm}^\dagger | \Omega \rangle}{(E_{0N\pm}^a - E_{p\pm}^a)} |\psi_{p\pm}^a\rangle \\ |\Psi_{n\pm}^b\rangle &= b_{n\pm}^\dagger |\Omega\rangle + \sum_{p \neq n\pm} \frac{\langle \psi_{p\pm}^b | H_{int} b_{n\pm}^\dagger | \Omega \rangle}{(E_{0N\pm}^b - E_{p\pm}^b)} |\psi_{p\pm}^b\rangle.\end{aligned}\quad (\text{A.2})$$

onde os operadores a e b são operadores de destruição de partículas e buracos, respectivamente. O $\pm$ indica o canal par(+) ou impar(-). O hamiltoniano de interação H_{int} é definido pela equação (2.8). As energias perturbadas são

$$E^\Omega = E_0^\Omega + \langle \Omega | H_{int} | \Omega \rangle$$

$$\begin{aligned}
E_{n\pm}^a &= E_{0n\pm}^a + \langle \Omega | a_{n\pm} H_{int} a_{n\pm}^\dagger | \Omega \rangle \\
E_{n\pm}^b &= E_{0n\pm}^b + \langle \Omega | b_{n\pm} H_{int} b_{n\pm}^\dagger | \Omega \rangle
\end{aligned}
\tag{A.3}$$

O operador de destruição (criação) $d_\pm$ ($d_\pm^\dagger$) de partículas no orbital da impureza obtido da equação (2.20) é

$$d_\pm = \sum_{i\pm} u_{i\pm} a_{i\pm} + \bar{u}_{i\pm} b_{i\pm}^\dagger \tag{A.4}$$

Obtemos, então, os elementos de matrizes

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_{n\pm}^b | d_\pm | \Psi^\Omega \rangle &= \\
2\bar{u}_{n\pm} \left[1 - \sum_j \left[\frac{u_{j\pm}^2}{(E_{j\pm} + \bar{E}_{n\pm})} + \frac{\bar{u}_{j\pm}^2}{4(\bar{E}_{n\pm} - E_{j\pm})} \right] \frac{U}{2} \sum_l (\bar{u}_{l+}^2 + \bar{u}_{l-}^2) \right] & \quad (\epsilon < 0) \\
\langle \Psi_{n\pm}^a | d_\pm^\dagger | \Psi^\Omega \rangle &= \\
2u_{n\pm} \left[1 + \sum_j \left[\frac{\bar{u}_{j\pm}^2}{(E_{j\pm} + \bar{E}_{n\pm})} + \frac{u_{j\pm}^2}{4(\bar{E}_{n\pm} - E_{j\pm})} \right] \frac{U}{2} \sum_l (\bar{u}_{l+}^2 + \bar{u}_{l-}^2) \right] & \quad (\epsilon > 0).
\end{aligned}
\tag{A.5}$$

e as energias

$$\begin{aligned}
E^\Omega &= E_0^\Omega + \sum_{j,l} [\bar{u}_{j+}^2 + \bar{u}_{j-}^2] [\bar{u}_{l+}^2 + \bar{u}_{l-}^2] \frac{U}{2} \\
E_{n\pm}^b &= E_{0n\pm}^b + 2 \left[\sum_j (\bar{u}_{j+}^2 + \bar{u}_{j-}^2) - \bar{u}_{n\pm}^2 \right] \sum_l (\bar{u}_{l+}^2 + \bar{u}_{l-}^2) \frac{U}{2} \\
E_{n\pm}^a &= E_{0n\pm}^a + 2 \left[\sum_j (\bar{u}_{j+}^2 + \bar{u}_{j-}^2) + u_{n\pm}^2 \right] \sum_l (\bar{u}_{l+}^2 + \bar{u}_{l-}^2) \frac{U}{2}.
\end{aligned}
\tag{A.6}$$

onde $E_0^\Omega = 0$, $E_{0n\pm}^b = 4\bar{E}_{n\pm}$ e $E_{0n\pm}^a = 4E_{n\pm}$. As energias $E_{n\pm}$ ($\bar{E}_{n\pm}$) são as energias positivas (negativas) do Hamiltoniano não perturbado do canal par (+) ou ímpar (-).

Com esses resultados chegamos, portanto, as equações 2.28 e 2.29 para as densidades espectrais.

Apêndice B

Detalhes sobre a diagonalização iterativa

Vamos supor que $|J, J_z, S, S_z, P, r\rangle_{alto}$ denote um autoestado do Hamiltoniano H_{Nalto} com carga axial J , e sua componente z J_z , spin S e sua componente z S_z , e com paridade P . Para construção da matriz Hamiltoniana no próximo passo iterativo, devemos montar a base de estados $|J, J_z, S, S_z, P, r; l\rangle_{baixo}$, chamada primitiva, usando as equações 3.15 e 3.16 . A matriz é construída calculando-se o elementos de matriz:

$$\begin{aligned} {}_{baixo}\langle J, J_z, S, S_z, P, r; l' | H_{Nbaixo} | J, J_z, S, S_z, P, r; l \rangle_{baixo} = \\ {}_{baixo}\langle J, J_z, S, S_z, P, r; l' | H_{Nalto} | J, J_z, S, S_z, P, r; l \rangle_{baixo} \\ + {}_{baixo}\langle J, J_z, S, S_z, P, r; l' | \psi_N H_{NLbaixo} | J, J_z, S, S_z, P, r; l \rangle_{baixo} \end{aligned} \quad (B.1)$$

onde $H_{NLbaixo} = (f_{N-1baixo}^\dagger f_{Nbaixo} + H.c.)$. Os elementos de matriz diagonais são independentes das componentes z da carga axial e de spin:

$${}_{baixo}\langle J, J_z, S, S_z, P, r; l | H_{Nbaixo} | J, J_z, S, S_z, P, r; l \rangle_{baixo} = E_{Nalto}(l, P, r) \quad (B.2)$$

onde

$$l = \begin{cases} 0 & = (J - 1/2, S) \\ 1 & = (J, S - 1/2) \\ 2 & = (J + 1/2, S) \\ 3 & = (J, S + 1/2) \end{cases}$$

Para obtermos os elementos de matriz fora da diagonal usamos o teorema de Wigner-

Eckart na seguinte forma

$$\begin{aligned}
 \text{baixo} \langle J', J_z - 1/2, S', S_z - \mu, P', r | (-2)^{N+1} \mu f_{N\mu} | J, J_z, S, S_z, P, r \rangle_{\text{baixo}} = \\
 (-1)^{J'+S'-J-S+1} \langle S', S_z - \mu | S, S_z, 1/2, -\mu \rangle \langle J', J_z - 1/2 | J, J_z, 1/2, -1/2 \rangle \frac{\langle J', S' || f_N || J, S \rangle}{\sqrt{2S'+1} \sqrt{2J'+1}}. \\
 \text{baixo} \langle J', J_z + 1/2, S', S_z + \mu, P', r | f_{N\mu} | J, J_z, S, S_z, P, r \rangle_{\text{baixo}} = \\
 (-1)^{J'+S'-J-S+1} \langle S', S_z + \mu | S, S_z, 1/2, \mu \rangle \langle J', J_z + 1/2 | J, J_z, 1/2, 1/2 \rangle \frac{\langle J', S' || f_N || J, S \rangle}{\sqrt{2S'+1} \sqrt{2J'+1}}.
 \end{aligned} \tag{B.3}$$

onde $\langle ||f|| \rangle$ são os elementos de matriz invariantes, sendo $\langle S', S'_z | S, S_z, 1/2, \mu \rangle$ e $\langle J', J'_z | J, J_z, 1/2, \mu \rangle$ os coeficientes de Clebsh-Gordon. Esses coeficientes são calculados usando as regras de soma do momento angular. Os elementos de matriz não nulos são:

$$\begin{aligned}
 \text{baixo} \langle J, J_z, S, S_z, P, r; 3 | \psi_N H_{NL\text{baixo}} | J, J_z, S, S_z, P, r; 0 \rangle_{\text{baixo}} = \\
 \left[(-1)^{N+1} \frac{1}{\sqrt{2S+1} \sqrt{2J+1}_{\text{alto}}} \langle J, S+1/2, P, r || f_{N-1\text{baixo}} || J-1/2, S, P, r \rangle_{N\text{alto}} \right. \\
 \left. \text{baixo} \langle J, J_z, S, S_z, P, r; 1 | \psi_N H_{NL\text{baixo}} | J, J_z, S, S_z, P, r; 0 \rangle_{\text{baixo}} = \right. \\
 \left. (-1)^{N+1} \frac{1}{\sqrt{2S+1} \sqrt{2J+1}_{\text{alto}}} \langle J, S-1/2, P, r || f_{N-1\text{baixo}} || J-1/2, S, P, r \rangle_{N\text{alto}} \right].
 \end{aligned} \tag{B.4}$$

$$\begin{aligned}
 \text{baixo} \langle J, J_z, S, S_z, P, r; 1 | \psi_N H_{NL\text{baixo}} | J, J_z, S, S_z, P, r; 2 \rangle_{\text{baixo}} = \\
 \left[(-1)^N \frac{1}{\sqrt{2S+1} \sqrt{2J+1}_{\text{alto}}} \langle J, S-1/2, P, r || f_{N-1\text{baixo}} || J+1/2, S, P, r \rangle_{N\text{alto}} \right. \\
 \left. \text{baixo} \langle J, J_z, S, S_z, P, r; 3 | \psi_N H_{NL\text{baixo}} | J, J_z, S, S_z, P, r; 2 \rangle_{\text{baixo}} = \right. \\
 \left. (-1)^N \frac{1}{\sqrt{2S+1} \sqrt{2J+1}_{\text{alto}}} \langle J, S+1/2, P, r || f_{N-1\text{baixo}} || J+1/2, S, P, r \rangle_{N\text{alto}} \right].
 \end{aligned} \tag{B.5}$$

Portanto, para construirmos a matriz Hamiltoniana precisamos conhecer as autoenergias da Hamiltoniana anterior $E_{N\text{alto}}(J, S, P, r)$ e os elementos de matriz invariantes $\text{alto} \langle J, S \pm 1/2, P, r || f_{N-1\text{baixo}} || J \pm 1/2, S, P, r \rangle_{N\text{alto}}$. Esses elementos invariantes devem ser calculados após a diagonalização da matriz. Após a diagonalização nós obtemos uma base, chamada

base própria, que está relacionada a base primitiva através da equação

$$|J, J_z, S, S_z, P, r\rangle_{Nbaixo} = \sum_{wl} \mathcal{U}(r; wl) |J, J_z, S, S_z, P, w; l\rangle_{baixo}. \quad (B.6)$$

Assim, precisamos calcular os elementos invariantes $baixo\langle J', S', P', r' || f_{Nbaixo} || J, S, P, r \rangle_{Nbaixo}$ que serão utilizados no segundo passo da iteração seguinte. Além disso, é necessário atualizar os elementos invariantes $alto\langle J, S, P, r || f_{Nalto} || J + 1/2, S, P, r \rangle_{Nalto}$, calculados no passo anterior dessa iteração, para a base atual do processo iterativo. Os elementos de matriz do operador f_{Nbaixo} , chamado operador ativo nesse passo, são

$$\begin{aligned} baixo\langle J \pm 1/2, S - 1/2, P', r' || f_{Nbaixo} || J, S, P, r \rangle_{Nbaixo} = \\ - \sum_{ww'} \mathcal{U}(r'; w'3) \mathcal{U}(r; wl) \sqrt{2s(2J+1)}. \\ baixo\langle J \pm 1/2, S + 1/2, P', r' || f_{Nbaixo} || J, S, P, r \rangle_{Nbaixo} = \\ - \sum_{ww'} \mathcal{U}(r'; w'1) \mathcal{U}(r; wl) \sqrt{(2s+2)(2J+1)} \end{aligned} \quad (B.7)$$

onde $l = 0, 2$. Os elementos de matriz dos operadores f_{Nalto} , chamado operador passivo neste passo iterativo, são atualizados na seguinte forma:

$$\begin{aligned} baixo\langle J + 1/2, S + 1/2, P', r' || f_{Nalto} || J, S, P, r \rangle_{Nbaixo} = \\ \sum_{ww'} [\mathcal{U}(r'; w'0) \mathcal{U}(r; w0) \sqrt{\frac{2J+2}{2J+1}} alto\langle J, S + 1/2, P', r' || f_{Nalto} || J - 1/2, S, P, r \rangle_{Nalto} \\ - \mathcal{U}(r'; w'1) \mathcal{U}(r; w1) \sqrt{\frac{(2s+2)}{(2s+1)}} alto\langle J + 1/2, S, P', w' || f_{Nalto} || J, S - 1/2, P, w \rangle_{Nalto} \\ + \mathcal{U}(r'; w'2) \mathcal{U}(r; w2) \sqrt{\frac{2J+1}{2J+2}} alto\langle J + 1, S + 1/2, P', w' || f_{Nalto} || J + 1/2, S, P, w \rangle_{Nalto} \\ - \mathcal{U}(r'; w'3) \mathcal{U}(r; w3) \sqrt{\frac{(2s+1)}{(2s+2)}} alto\langle J + 1/2, S + 1, P', w' || f_{Nalto} || J, S + 1/2, P, w \rangle_{Nalto} \\ + \mathcal{U}(r'; w'0) \mathcal{U}(r; w2) \sqrt{\frac{2J+1}{2J+2}} alto\langle J, S + 1/2, P', w' || f_{Nalto} || J - 1, S, P, w \rangle_{Nalto} \\ - \mathcal{U}(r'; w'1) \mathcal{U}(r; w3) \sqrt{\frac{(2s+1)}{(2s+2)}} alto\langle J + 1/2, S + 1, P', w' || f_{Nalto} || J, S, P, w \rangle_{Nalto}] . \end{aligned} \quad (B.8)$$

$$\begin{aligned}
& {}_{baizo}\langle J+1/2, S-1/2, P', r' || f_{Nalto} || J, S, P, r \rangle_{Nbaizo} = \\
& = \sum_{ww'} [\mathcal{U}(r'; w'0) \mathcal{U}(r; w0) \sqrt{\frac{2J+2}{2J+1}} {}_{alto}\langle J, S-1/2, P', r' || f_{Nalto} || J-1/2, S, P, r \rangle_{Nalto} \\
& - \mathcal{U}(r'; w'1) \mathcal{U}(r; w1) \sqrt{\frac{(2s+1)}{(2s)}} {}_{alto}\langle J+1/2, S-1, P', w' || f_{Nalto} || J, S-1/2, P, w \rangle_{Nalto} \\
& + \mathcal{U}(r'; w'2) \mathcal{U}(r; w2) \sqrt{\frac{2J+2}{2J+1}} {}_{alto}\langle J+1, S-1/2, P', w' || f_{Nalto} || J+1/2, S, P, w \rangle_{Nalto} \\
& - \mathcal{U}(r'; w'3) \mathcal{U}(r; w3) \sqrt{\frac{(2s)}{(2s+1)}} {}_{alto}\langle J+1/2, S, P', w' || f_{Nalto} || J, S+1/2, P, w \rangle_{Nalto} \\
& + \mathcal{U}(r'; w'0) \mathcal{U}(r; w2) \sqrt{\frac{2J+1}{2J+2}} {}_{alto}\langle J, S-1/2, P', w' || f_{Nalto} || J-1, S, P, w \rangle_{Nalto} \\
& - \mathcal{U}(r'; w'1) \mathcal{U}(r; w3) \sqrt{\frac{(2s+1)}{(2s)}} {}_{alto}\langle J+1, S+1, P', w' || f_{Nalto} || J, S, P, w \rangle_{Nalto}] .
\end{aligned}
\tag{B.9}$$

$$\begin{aligned}
& {}_{baizo}\langle J-1/2, S+1/2, P', r' || f_{Nalto} || J, S, P, r \rangle_{Nbaizo} = \\
& \sum_{ww'} [\mathcal{U}(r'; w'0) \mathcal{U}(r; w0) \sqrt{\frac{2J+1}{2J}} {}_{alto}\langle J-1, S+1/2, P', r' || f_{Nalto} || J-1/2, S, P, r \rangle_{Nalto} \\
& - \mathcal{U}(r'; w'1) \mathcal{U}(r; w1) \sqrt{\frac{(2s+2)}{(2s+1)}} {}_{alto}\langle J-1/2, S, P', w' || f_{Nalto} || J, S-1/2, P, w \rangle_{Nalto} \\
& + \mathcal{U}(r'; w'2) \mathcal{U}(r; w2) \sqrt{\frac{2J}{2J+1}} {}_{alto}\langle J, S+1/2, P', w' || f_{Nalto} || J+1/2, S, P, w \rangle_{Nalto} \\
& - \mathcal{U}(r'; w'3) \mathcal{U}(r; w3) \sqrt{\frac{(2s+1)}{(2s+2)}} {}_{alto}\langle J-1/2, S+1, P', w' || f_{Nalto} || J, S+1/2, P, w \rangle_{Nalto} \\
& + \mathcal{U}(r'; w'0) \mathcal{U}(r; w2) \sqrt{\frac{2J}{2J+1}} {}_{alto}\langle J+1/2, S+1/2, P', w' || f_{Nalto} || J-1/2, S, P, w \rangle_{Nalto} \\
& - \mathcal{U}(r'; w'1) \mathcal{U}(r; w3) \sqrt{\frac{(2s+1)}{(2s+2)}} {}_{alto}\langle J, S+1, P', w' || f_{Nalto} || J+1, S-1/2, P, w \rangle_{Nalto}] .
\end{aligned}
\tag{B.10}$$

$$\begin{aligned}
& {}_{baizo}\langle J-1/2, S-1/2, P', r' || f_{Nalto} || J, S, P, r \rangle_{Nbaizo} = \\
& \sum_{ww'} [\mathcal{U}(r'; w'0) \mathcal{U}(r; w0) \sqrt{\frac{2J+1}{2J}} {}_{alto}\langle J-1, S-1/2, P', r' || f_{Nalto} || J-1/2, S, P, r \rangle_{Nalto}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\mathcal{U}(r'; w'1)\mathcal{U}(r; w1)\sqrt{\frac{(2s+1)}{(2s)}} \text{alto}\langle J-1/2, S-1, P', w' || f_{N\text{alto}} || J, S-1/2, P, w \rangle_{N\text{alto}} \\
& +\mathcal{U}(r'; w'2)\mathcal{U}(r; w2)\sqrt{\frac{2J+1}{2J+2}} \text{alto}\langle J+1, S+1/2, P', w' || f_{N\text{alto}} || J+1/2, S, P, w \rangle_{N\text{alto}} \\
& -\mathcal{U}(r'; w'3)\mathcal{U}(r; w3)\sqrt{\frac{(2s+1)}{(2s+2)}} \text{alto}\langle J+1/2, S+1, P', w' || f_{N\text{alto}} || J, S+1/2, P, w \rangle_{N\text{alto}} \\
& +\mathcal{U}(r'; w'0)\mathcal{U}(r; w2)\sqrt{\frac{2J+1}{2J+2}} \text{alto}\langle J+1, S+1/2, P', w' || f_{N\text{alto}} || J, S, P, w \rangle_{N\text{alto}} \\
& -\mathcal{U}(r'; w'1)\mathcal{U}(r; w3)\sqrt{\frac{(2s)}{(2s+1)}} \text{alto}\langle J+1/2, S-1, P', w' || f_{N\text{alto}} || J, S-1/2, P, w \rangle_{N\text{alto}} \Big] .
\end{aligned}
\tag{B.11}$$

Evidentemente, o processo descrito acima é feito em todos os passos da iteração com as devidas modificações no número de iterações N e na referência aos operadores alto e baixo.

Referências

- [1] P. W. Anderson, Phys. Rev. **124**, 41 (1961).
- [2] G. Grüner e A. Zawadowski, Rep. Prog.Phys. **37**, 1497 (1974).
- [3] K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975).
- [4] J. Kondo, em Solid State Physics, ed. H. Ehrenreich, F.Seitz e D. Turnbull, (Academic, New York, 1969) Vol.23, p. 183.
- [5] B. Coqblin e J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **185**, 847 (1969).
- [6] K. Yosida e A. Yoshimori, Magnetism, ed. H. Suhl (Academic, New York, 1973), Vol. V, p. 253.
- [7] F. Takano e T. Ogawa, Prog. Theor. Phys. **35**, 343 (1966).
- [8] N. Andrei, Phys. Rev. Lett. **45**, 379 (1980).; P. B. Wiegmann, JETP Lett. **31**, 364 (1980).
- [9] A. C. Hewson, D. M. Newns, J. W. Rasul, H.-U. Desgranges e P. Strange, em Teory of Heavy Fermions and Valence Flutuations, ed. T Kasuya e T. Saso (Springer, Berlin, 1985), p. 134.
- [10] O. Gunnarsson e K Schönhammer, Phys. Rev. **B 28**, 4315 (1983).
- [11] J. E. Hirsch e R. M. Fye, Phys. Rev. Lett. **56**, 2521 (1986).
- [12] L. N. Oliveira e J. W. Wilkins, Phys. Rev. **B 24**, 4863 (1981).

- [13] D. E. Heim, Phys. Rev. **B 33**, 5254 (1986).
- ✓ [14] M. Yoshida, M. A. Whitaker e L. N. Oliveira, Phys. Rev. **B 41**, 9403 (1990).
- [15] C. Jayaprakash, H. R. Krishna-murthy e J. W. Wilkins, Phys. Rev. Lett. **47**, 737 (1981) , J. Appl. Phys. **53**, 2142 (1982).
- [16] M. Lavagna, J. Magn. Magn. Mat. **63&64**, 360 (1987).; M. Lavagna e M. Cyrot, Solid State Commun. **55**, 555 (1985).
- [17] C. Zhou e T. K. Lee, J. Magn. Magn. Mat. **63&64**, 248 (1987).
- [18] S. Chakravarty e J. Hirsch, Phys. Rev **B 25**, 3273 (1982).
- [19] P. Schlottmann, Phys. Rev. **B 21**, 1084 (1980); Phys. Rev. **B 23**, 3475 (1981); Phys. Rev. **B 24**, 5394 (1981).
- [20] K. Yamada, Prog. Theor. Phys. **62**, 901 (1979).
- [21] D. M. Cragg e P. Lloyd, J. Phys. **C12**, 3301 (1979).
- OK ✓ [22] H. R. Krishna-murthy, J. W. Wilkins e K. G. Wilson, Phys. Rev. **B 21**, 1003 (1980).
- [23] L. N. Oliveira e J. W. Wilkins, Phys. Rev. Lett. **47**, 1553 (1981).
- [24] R. M. Fye, J. E. Hirsch e D. J. Scalapino, Phys. Rev. **B 35**, 4901 (1987).
- [25] B. A. Jones e C. M. Varma, Phys. Rev. Lett. **58**, 843 (1987).
- [26] B. A. Jones, C. M. Varma e J. W. Wilkins, Phys. Rev. Lett. **61**, 125 (1988) ; B. A. Jones e C. M. Varma, Phys. Rev. **B 40**, 324 (1989).
- [27] R. M. Fye e J. E. Hirsch, Phys. Rev. **B 40**, 4780 (1989).
- [28] J.R. Schrieffer e P. A. Wolf, Phys. Rev. **149**, 491 (1966).

- [29] O. Sakai, Y. Shimizu e T. Kasuya, Solid State Commun., **B 75**, 81 (1990).; O. Sakai e Y. Shimizu, J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 2333(1992).
- [30] B. A. Jones, B. G. Kotliar e A. J. Millis, Phys. Rev. **B 39**, 3415 (1989).
- [31] I. Affleck e A. W. W. Ludwig, Phys. Rev. Lett. **68**, 1046 (1992).
- [32] N. E. Bickers, D. L. Cox e J. W. Wilkins, Phys. Rev. **B 36**, 2036 (1987).
- [33] P. Coleman, Phys. Rev. **B 35**, 5072 (1987).
- [34] O. Gunnarson e K. Schönhammer, Phys. Rev. **B 31**, 4815 (1985).
- ✓ [35] S. Alexander e P. W. Anderson, Phys. Rev. **133**, A1594 (1964).
- [36] V. Zlatić e D. Šokčević, Solid State Commun. **63**, 889 (1987).
- [37] T. Saso, Phys. Rev. **B 44**, 450 (1990).
- [38] Z. Fisk, D. W. Hess, C. J. Pethick, D. Pines, J. L. Smith, J. D. Thompson e J. O. Willis, Science **239**, 33 (1988).
- [39] L. N. Oliveira, Brazilian Journal Physics **22**, 155(1992).
- [40] L. C. Andreani e H. Beck, Phys. Rev. **B 48**, 7322(1993).
- [41] R. Fye, Phys. Rev. Lett. **72**, 916(1994).
- [42] M. A. Rudermann e C. Kittel, Phys. Rev. **96**, 99 (1954).; T. Kasuya, Prog. Theor. Phys. **16**, 45(1956).; K. Yoshida, Phys. Rev. **106**, 893(1957).H
- ✓ [43] L. N. Oliveira e W. L. Lima, comunicação interna.
- [44] O. Sakai Y. Shimizu, J. Phys. Soc. Jpn., **61**, 2333(1992); O. Sakai, Y. Shimizu e N. Kaneko, Physica, bf B 186-188, 323(1993).

- [45] A. L. Fetter e J. D. Walecka, Quantum Theory of Many-Particle Systems, New York, Mc-Graw-Hill, Apêndice B.
- [46] W. C. Oliveira, L. N. Oliveira, Phys. Rev. bf B (no prelo).
- [47] N. Andrei, K. Furuya e J. H. Lownstein, Rev. Mod. Phys, **55**, 331(1983).

æ